

Я.С. Буджак, А.О. Дружинін, С.І. Нічкало

## Теоретичний аналіз експериментальних термоелектричних характеристик ниткоподібних кристалів на основі кремнію

Національний університет «Львівська політехніка», Львів, Україна, [druz@polynet.lviv.ua](mailto:druz@polynet.lviv.ua)

У роботі показано, що коли в провідному кристалі створити електричне поле з напруженістю  $\vec{E}$  та градієнт температури  $\nabla_r T$  і помістити цей кристал в магнітне поле з вектором індукції  $\vec{B}$ , то в ньому виникають процеси перенесення носіїв заряду і теплоти, які описуються відомими узагальненими рівняннями електропровідності і теплопровідності. Тензори і скалярні коефіцієнти, які входять в склад цих рівнянь, це кінетичні властивості кристалів. Вони описують природу актуальних властивостей кристалів і мають широке прагматичне застосування в сучасній твердотілій електроніці, описується процес просторового квантування спектра та його вплив на кінетичні властивості кристалів.

**Ключові слова:** потенціал Гіббса, хімічний потенціал, закон дисперсії, віскер, термоелектрика.

Стаття постуила до редакції 13.12.2019; прийнята до друку 15.12.2019.

### Вступ

Відома феноменологічна теорія кінетичних властивостей твердого тіла дає розуміння того, як визначити основні кінетичні властивості напівпровідникових кристалів, наприклад, енергетичний спектр  $\varepsilon(p)$ , функцію розсіювання  $u(\varepsilon)$  та хімічний потенціал  $\mu$  [1-4]. Ці властивості дозволяють прогнозувати характеристики кристалів та їх потенційне застосування [5, 6]. Кінетичні властивості кристалів напівпровідника можна також розглядати з погляду статистичної теорії твердого тіла. У цій роботі проведено теоретичний аналіз експериментальних термоелектричних характеристик ниткоподібних кристалів (віскерів) на основі кремнію з використанням раніше опублікованої моделі кінетичної теорії [7-9]. Дані термоелектричних характеристик віскерів на основі кремнію взято з праць [10-12].

### I. Елементи загальної теорії кінетичних властивостей кристалів

Кінетичні властивості провідних кристалів зумовлюються концентрацією вільних носіїв заряду в кристалах і характером їх руху в міжвузлях кристалічної ґратки.

В стані термодинамічної рівноваги вільні носії заряду рухаються хаотично, їх середня енергія зберігається, а ентропія всієї сукупності носіїв заряду має максимальне значення. Це термодинамічно рівноважний газ носіїв зарядів.

Наявність в кристалі дрейфових збурень, а саме електричного поля з напруженістю  $\vec{E}$ , градієнта температури  $\nabla_r T$ , (ці збурення можуть існувати в кристалі одночасно) зумовлює вихід газу носіїв заряду із стану термодинамічної рівноваги і перетворює його на нерівноважний ансамбль частинок. В такому випадку на кожному частинку із зарядом  $ze$  діє дрейфова сила  $\vec{F}_d$  [7-9]:

$$\mathbf{F}_d^{\mathbf{r}} = ze\mathbf{E}_d^{\mathbf{r}}; \quad \mathbf{E}_d^{\mathbf{r}} = \mathbf{E}^{\mathbf{r}} - \left( \frac{k}{ze} \right) \left( \frac{e-m}{kT} \right) \nabla_{\mathbf{r}} T \quad (1)$$

де  $e$  – заряд електрона,  $z = \pm 1$  – знак заряду,  $e$  – середня енергія носія заряду,  $k$  – постійна Больцмана,  $T$  – температура кристала.

Внаслідок дії дрейфової сили  $\mathbf{F}_d^{\mathbf{r}}$  всі носії заряду починають рухатися спрямовано із швидкістю дрейфа  $\mathbf{v}_d^{\mathbf{r}}$ , яка залежить як від  $\mathbf{F}_d^{\mathbf{r}}$ , так і від властивостей кристалу. Наявність дрейфової

швидкості  $\mathbf{v}_d^{\mathbf{r}}$  спричиняє утворення потоку частинок. При цьому відбувається перенесення електрики, теплоти (енергії) тощо. Отже, сукупність носіїв зарядів у кристалах, за наявності дрейфових полів, перетворюється у великий канонічний нерівноважний ансамбль із змінною кількістю частинок. Такий великий канонічний ансамбль, як показано в роботі [7], враховуючи спінове виродження, характеризується великим термодинамічним потенціалом Гіббса:

$$\Omega = -2kT \sum_{\mathbf{p}} \ln \left\{ 1 + \exp \left( \frac{m + \Delta m_{\mathbf{p}}^{\mathbf{r}} - e \mathbf{p}^{\mathbf{r}}}{kT} \right) \right\} = -2V \int_0^{\infty} \frac{G(e)}{\left( \exp \left( \frac{e - m - \Delta m_{\mathbf{p}}^{\mathbf{r}}}{kT} \right) + 1 \right)} de \quad (2)$$

В формулі (2)  $\mathbf{p}^{\mathbf{r}}$  – хвильовий вектор носія заряду,  $e \mathbf{p}^{\mathbf{r}}$  – закон дисперсії носіїв зарядів, а  $\Delta m_{\mathbf{p}}^{\mathbf{r}}$  – зміна хімічного потенціала однієї частинки під дією збурень, які виводять кристал із стану термодинамічної рівноваги. За відсутності таких збурень  $\Delta m_{\mathbf{p}}^{\mathbf{r}} = 0$ .

Значення  $\Delta m_{\mathbf{p}}^{\mathbf{r}}$  розраховано у роботі [7], в якій показано, що  $\Delta m(\mathbf{p}^{\mathbf{r}})$  є непарна функція вектора  $\mathbf{p}^{\mathbf{r}}$  і має таке значення для ізотропного кристала в магнітному полі з вектором індукції  $\mathbf{B}$ :

$$\Delta m(\mathbf{p}^{\mathbf{r}}) = z \mathbf{p}^{\mathbf{r}} \left( u_{ij}(\mathbf{B}, e) \right) \mathbf{E}_d^{\mathbf{r}} = z \mathbf{p}^{\mathbf{r}} \left( \frac{u(e) d_{ij} + z u(e)^2 d_{ijl} B_l + u(e)^3 B_i B_j}{d(\mathbf{B})} \right) \mathbf{E}_d^{\mathbf{r}}, \quad d(\mathbf{B}) = 1 + (u(e) \mathbf{B})^2 \quad (3)$$

У формулі (3)  $d_{ij}$  і  $d_{ijl}$  – функції Кронекера і Леві-Чівіти, а  $u(e)$  – розмірна функція розсіювання, яка описує вплив процесів розсіювання носіїв заряду на дефектах кристалічної ґратки на кінетичні властивості кристала.

В цитованих роботах показано, що в кристалі, який характеризується великим термодинамічним потенціалом Гіббса (2), існують процеси перенесення електрики і теплоти, які описуються такими узагальненими рівняннями електропровідності і теплопровідності:

$$\mathbf{E} = \left( r_{ij}(\mathbf{B}) \right) \mathbf{j} + R(\mathbf{B}) \cdot [\mathbf{B} \times \mathbf{j}] + \left( a_{ij}(\mathbf{B}) \right) \nabla_{\mathbf{r}} T + N(\mathbf{B}) [\mathbf{B} \times \nabla_{\mathbf{r}} T] \quad (4)$$

$$\mathbf{q} = \left( p_{ij}(\mathbf{B}) \right) \mathbf{j} + P(\mathbf{B}) \cdot [\mathbf{B} \times \mathbf{j}] - \left( c_{ij}(\mathbf{B}) \right) \nabla_{\mathbf{r}} T + S(\mathbf{B}) [\mathbf{B} \times \nabla_{\mathbf{r}} T], \quad (5)$$

В рівняннях (4) і (5) симетричні тензори  $\left( r_{ij}(\mathbf{B}) \right)$ ,  $\left( a_{ij}(\mathbf{B}) \right)$ ,  $\left( p_{ij}(\mathbf{B}) \right)$ ,  $\left( c_{ij}(\mathbf{B}) \right)$  – це відповідно симетричні тензори питомого опору, коефіцієнта ефекта Зеєбека, коефіцієнта ефекта Пельтьє і питомої теплопровідності кристала, які необхідно експериментально визначати або теоретично розраховувати. Вони є парними функціями вектора магнітної індукції.

Коефіцієнти  $R(\mathbf{B})$  і  $N(\mathbf{B})$  – це коефіцієнти поперечних гальваномагнітних ефектів Холла і Нернста–Еттінгсгаузена, а коефіцієнти  $P(\mathbf{B})$  і  $S(\mathbf{B})$  – коефіцієнти поперечних термомагнітних ефектів Нернста і Рігі–Ледюка. В ізотропних кристалах ці коефіцієнти є скалярними парними функціями

магнітної індукції, тобто  $R(\mathbf{B}) = R(-\mathbf{B})$ ,  $P(\mathbf{B}) = P(-\mathbf{B})$ ,  $N(\mathbf{B}) = N(-\mathbf{B})$ ,  $S(\mathbf{B}) = S(-\mathbf{B})$ .

Аналіз рівнянь (4), (5) показує, що ізотропний кристал, поміщений в магнітне поле, стає анізотропним, а відносно прості явища електропровідності і теплопровідності в кристалі ускладнюються. В цьому випадку появляються додаткові поперечні гальваномагнітні і термомагнітні ефекти.

Гальваномагнітні ефекти зумовлені дією магнітного поля на омичну частину електричного струму, а термомагнітні – на теплову частину, згідно з узагальненим рівнянням електропровідності (4).

Кінетичні тензори і коефіцієнти, які входять в

рівняння (4), (5), крім визначення природи важливих кінетичних властивостей провідного середовища, мають широке прикладне значення в проблемах прогнозування синтезованих кристалів із заданими властивостями.

Магнітне поле  $\dot{B}$  в кристалі вважається слабким, якщо виконується умова  $(u(e)\dot{B})^2 \ll 1$ . При цій умові, або у відсутності магнітного поля всі чотири кінетичні тензори вироджуються в скаляри і тоді всі важливі прагматичні кінетичні властивості ізотропного кристала описуються множиною таких скалярів:  $r(m^\bullet, T)$ ,  $a(m^\bullet, T)$ ,  $p(m^\bullet, T)$ ,  $c(m^\bullet, T)$ ,  $R(m^\bullet, T)$ ,  $N(m^\bullet, T)$ ,  $P(m^\bullet, T)$ ,  $S(m^\bullet, T)$ .

Всі ці кінетичні коефіцієнти для кристалів з макроскопічними розмірами, як показано в роботах [7-9], можна розраховувати за допомогою розрахункового функціонала:

$$J(i, j, m^\bullet, T) = \int_0^\infty x^i u(x, T)^j G(x, T) \left( -\frac{df_0}{dx} \right) dx, \quad (6)$$

Функціонал (6) залежить від закону дисперсії  $e(\dot{p})$ .

Законом дисперсії називають аналітичну формулу  $e(\dot{p})$ , яка описує залежність енергії носія заряду кристала від його квазіімпульсу  $\dot{p}$ .

Закон дисперсії  $e(\dot{p})$  – це складна і важка квантово-механічна проблема. Для ізотропних кристалів квантово-механічні дослідження обґрунтовують такий загальний ізотропний закон дисперсії:

$$\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2mm_n} = \frac{p^2}{2mm_n} = E(e) \quad (7)$$

У формулі (7)  $E(e)$  – однорідна квантово-механічна функція енергії першого порядку по відношенню до параметра  $kT$ ,  $m$  – маса електрона,  $m_n$  – відносна ефективна маса носія заряду кристала.

Функція  $E(e)$  є однорідною першого порядку, якщо для всіх значень параметра  $kT$  виконується відношення  $E(kTe) = kT E(e)$ .

Приведений вище аналіз статистичних розрахунків теплових і кінетичних властивостей кристалів показав, що всі вони мають аналітичну

залежність від закону дисперсії (7), від якого мають аналітичну залежність всі розрахункові параметри алгоритмічних розрахункових формул. До таких параметрів належать:  $g(e)$  – густина енергетичних рівнів в дозволених зонах енергії носіїв заряду в

кристалах,  $G(e) = \int_0^e g(e) de$ , функція розсіювання

$u(e)$ , яка описує вплив процесів розсіювання носіїв струму на дефектах кристалічної ґратки на кінетичні властивості кристалів.

Для закону дисперсії (7) ці величини мають такі значення:

$$\begin{aligned} G(e) &= \frac{8}{3\sqrt{p}} \left( \frac{2pmm_n}{h^2} \right)^{3/2} E^{3/2}(e), \\ g(e) &= \frac{dG(e)}{de} = \frac{4p}{\sqrt{p}} \left( \frac{2pmm_n}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2}(e) \frac{dE}{de} \\ G(x, T) &= N_C(T) \cdot E^{3/2}(x), \\ g(x, T) &= \frac{3}{2} \frac{1}{kT} N_C(T) E^{1/2}(x) \frac{dE}{dx}, \\ N_C(T) &= \frac{8}{3\sqrt{p}} \left( \frac{2pmm_n kT}{h^2} \right)^{3/2} \\ u(e) &= u^{(r)}(T) p^{(2r-3)} \left( \frac{de}{dp} \right)^2 = \\ &= u^{(r)}(T) p^{(2r-3)} \left( \frac{dp}{de} \right)^{-2}, \\ u(x, T) &= U(r, T) \cdot \frac{E^{(r-1/2)}(x)}{\left( \frac{dE(x)}{dx} \right)} \end{aligned}$$

В останній формулі  $U(r, T)$  – розмірна функція температури з розмірністю рухливості, вона описується такою формулою:

$$U(r, T) = \left[ \frac{1}{T} (U_A d(0, r) + U_O d(1, r)) + U_I d(2, r) \right] (m_n)^{(r-5/2)} T^{(r-1/2)} \quad (8)$$

де  $U_A$ ,  $U_O$ ,  $U_I$  – розмірні константи кристала, які залежать від природи кристала та від природи механізмів розсіювання носіїв заряду на дефектах кристалічної ґратки, а  $d(m, n)$  – це відома функція Кронекера, вона має такі значення:  $d(m, n)=1$ , якщо  $m = n$ ,  $d(m, n)=0$ , якщо  $m \neq n$ ;  $r$  – показник розсіювання, який дорівнює  $r = 0$  – для розсіювання на акустичних фонах кристалічної ґратки,  $r = 1$  – для розсіювання на оптичних фонах кристалічної ґратки,  $r = 2$  – для розсіювання на іонізованих домішкових атомах кристалічної ґратки.

Для закону дисперсії (7) розрахунковий функціонал  $J(i, j, m^\bullet, T)$  має таке значення:

$$J(i, j, m^\bullet, T) = \int_0^\infty \left( \frac{e}{kT} \right)^i u(e)^j G(e) \left( -\frac{df_0}{de} \right) de = U(r, T)^j N_C(T) \int_0^\infty x^i \frac{E(x)^{(rj - j/2 + 3/2)}}{\left( \frac{dE(x)}{dx} \right)^{2j}} \left( \frac{df_0}{dx} \right) dx = \quad (9)$$

$$= U(r, T)^j N_C(T) I(i, j, m^\bullet, T),$$

де безрозмірний інтеграл  $I(i, j, m^\bullet, T)$  дорівнює:

$$I(i, j, m^\bullet, b(T)) = \int_0^\infty x^i \frac{E(x)^{(rj - j/2 + 3/2)}}{\left( \frac{dE(x)}{dx} \right)^{2j}} \left( \frac{df_0}{dx} \right) dx \quad (10)$$

Для ізотропного параболічного закону дисперсії функція  $E(x)$  має таке значення:

$$E(x) = x \quad (11)$$

а для закону дисперсії Кейна функція  $E(\varepsilon)$  має таке значення:

$$E(x) = x \left( 1 + \frac{x}{E_G} \right) = x(1 + b(T)x),$$

$$\frac{dE(x)}{dx} = 1 + 2b(T)x \quad (12)$$

де  $E_G$  – ширина забороненої енергетичної зони

кристала,  $b(T) = \frac{kT}{E_G}$  – параметр непараболічності.

В кристалах з вузькими забороненими зонами енергії  $E_G$ , як правило, закони дисперсії електронів і дірок описуються непараболічним законом дисперсії Кейна. Тому безрозмірний інтеграл  $I(i, j, m^\bullet, T)$  для таких кристалів дорівнює:

$$I(i, j, m^\bullet, b(T)) = \int_0^\infty x^i \frac{E(x)^{(rj - j/2 + 3/2)}}{\left( \frac{dE(x)}{dx} \right)^{2j}} \left( \frac{df_0}{dx} \right) dx = \int_0^\infty x^i \frac{(x + b(T)x^2)^{(rj - j/2 + 3/2)}}{(1 + 2b(T)x)^{2j}} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) dx$$

В напівпровідникових кристалах з широкою забороненою зоною  $E_G$  параметр непараболічності

$b(T) = \frac{kT}{E_G} \ll 1 \rightarrow 0$ , тому цей інтеграл для таких кристалів має таке наближення Тейлора:

$$I(i, j, m^\bullet, b(T)) = \int_0^\infty x^i \frac{(x + b(T)x^2)^{(rj - j/2 + 3/2)}}{(1 + 2b(T)x)^{2j}} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) dx \cong I(i, j, m^\bullet, 0) + \left( \frac{dI(i, j, m^\bullet, b(T))}{db(T)} \right)_{b(T)=0} \times b(T) + \dots = F_{l(i, j)}(m^\bullet) + (l(i, j) - 4j - i) F_{l(i, j)+1}(m^\bullet) \cdot b(T) + \dots \quad (13)$$

В цьому відношенні  $F_{l(i, j)}(m^\bullet)$  – це добре відомий інтеграл Фермі з індексом  $l(i, j) = i + rj - \frac{j}{2} + \frac{3}{2}$ , який має такі асимптотичні властивості:  $F_l(m^\bullet) \cong \Gamma(l+1) \exp(m^\bullet)$ , для  $m^\bullet < -4$ , де  $\Gamma(l+1)$  – гамма функція Ейлера;  $F_l(m^\bullet) \cong (m^\bullet)^l$ , для  $m^\bullet > +4$ .

Такі значення має безрозмірний інтеграл  $I(i, j, m^\bullet, b(T))$  для ізотропних кристалів з параболічним законом дисперсії, в яких параметр непараболічності  $b(T) = \frac{kT}{E_G} = 0$ .

Наближення (13) можна записати в такій формі:

$$I(i, j, m^\bullet, b(T)) \cong F_{l(i, j)}(m^\bullet) \left[ 1 + (l(i, j) - 4j - i) \frac{F_{l(i, j)+1}(m^\bullet)}{F_{l(i, j)}(m^\bullet)} \cdot b(T) \right] \quad (14)$$

Таке наближення буде адекватним, якщо виконується умова:

$$(l(i,j) - 4j - i) \frac{F_{((i,j)+1)}(m^\bullet)}{F_{l(i,j)}(m^\bullet)} \cdot b(T) = F(i, j, m^\bullet) \cdot b(T) < 1$$

При такій умові наближення (14) можна апроксимувати такою зручною для розрахунків функцією:

$$I(i, j, m^\bullet, b(T)) \cong F_{l(i,j)}(m^\bullet) \exp(F(i, j, m^\bullet) \cdot b(T)) \quad (15)$$

## II. Аналіз експериментальних термоелектричних характеристик кристалів кремнію

В роботах [7-9] детальніше проаналізовано формули кінетичних властивостей кристалів для їх застосування до аналізів експериментальних даних з метою виявлення природи відповідних властивостей кристалів. Загальний висновок таких аналізів показав, що загальний алгоритмічний функціонал

адекватно описує природу кінетичних властивостей кристалів і він може використовуватись для вирішення проблеми прогнозування властивостей кристалів.

За допомогою функціонала (6) питомий опір кристала  $r(m^\bullet, T)$ , термоелектричний коефіцієнт ефекта Зеєбека  $a(m^\bullet, T)$  і концентрація носіїв заряду  $n(m^\bullet, T)$  кристала з макроскопічними розмірами та ізотропним параболічним законом дисперсії описуються такими алгоритмічними формулами [9]:

$$r(m^\bullet, T) = \frac{1}{en} \frac{J(0,0, m^\bullet, T)}{J(0,1, m^\bullet, T)} = \frac{1}{e} \cdot \frac{1}{J(0,1, m^\bullet, T)} = \frac{1}{e} \cdot \frac{1}{U(r, T) N_C(T) \int_0^\infty x^{(r+1)} \left( \frac{df_0}{dx} \right) dx} = \frac{1}{e} \cdot \frac{1}{U(r, T) N_C(T) F_{(r+1)}(m^\bullet)} \quad (16)$$

$$a(m^\bullet, T) = \left( \frac{k}{ze} \left[ \frac{J(1,1, m^\bullet, T)}{J(0,1, m^\bullet, T)} - m^\bullet \right] \right) = \left( \frac{k}{ze} \left[ \frac{F_{(r+2)}(m^\bullet)}{F_{(r+1)}(m^\bullet)} - m^\bullet \right] \right) \quad (17)$$

$$n(m^\bullet, T) = J(0,0, m^\bullet, T) \quad (18)$$

Застосуємо тепер формули (16) та (17) для короткого аналізу робіт [10-12]. В цих роботах приведено експериментальні дані  $r(m^\bullet, T)$  та  $a(m^\bullet, T)$  ниткоподібних кристалів  $p$ -SiGe з мікроскопічною товщиною  $d$ , при якій спостерігається просторове квантування енергетичного спектру енергії носіїв заряду кристала. В зв'язку з цим, як показано в роботі [9], в таких кристалах спостерігається кореляція між кінетичними властивостями і товщиною  $d$ . Ця кореляція виникає тому, що загальний розрахунковий функціонал (6) через посередництво закону дисперсії має залежність від  $d$ .

Як показано в роботі [9] загальний розрахунковий функціонал (6) при даних умовах має таке значення:

$$J(i, j, m^\bullet, d) \cong U(r, T)^j N_C(T) F_{l(i,j)}(m^\bullet) \exp(-F(i, j, m^\bullet, d) \cdot \frac{I_D(T)}{d}), \quad (19)$$

$$\text{де } F(i, j, m^\bullet, d) = \frac{3\sqrt{p}}{4} \cdot \frac{F_{(i+rj-j/2+1)}}{F_{(i+rj-j/2+3/2)}} \cdot \left( 1 - \frac{1}{2\sqrt{p}} \cdot \frac{F_{(i+rj-j/2+1/2)}}{F_{(i+rj-j/2+1)}} \cdot \left( \frac{I_D(T)}{d} \right) \right),$$

$$I_D(T) = \left( \frac{h^2}{2mm_p} \right)^{1/2} = \frac{7,455 \cdot 10^{-6}}{\left( m_p \frac{T}{K} \right)^{1/2}} \quad - \text{ довжина}$$

теплової хвилі де Бройля в см.

Умова, за якої існує функціонал (19) описується такою нерівністю:

$$a > \frac{1}{2\sqrt{p}} \cdot \frac{F_{(i+rj-j/2+1/2)}(m^\bullet)}{F_{(i+rj-j/2+1)}(m^\bullet)} I_D \quad (20)$$

Числовий коефіцієнт в цій нерівності для невідроджених носіїв заряду з хімічним потенціалом  $m^\bullet \leq -4$  має значення порядку одиниці. При цій умові нерівність (20) набуває такого вигляду:

$$d > I_D(T), \quad \text{тобто} \quad \frac{I_D(T)}{d} < 1, \quad \text{або}$$

$$\left( \frac{I_D(T)}{d} \right)^2 < \frac{I_D(T)}{d} < 1, \quad (21)$$

і відповідає загальним законам квантової механіки, бо, практично, при загальних умовах спотереження, радіус ниткоподібного кристала не може дорівнювати або бути меншим від радіуса атома водню.

Функціонал (19) приводить формули (16) та (17) до такого вигляду:

$$r(m^\bullet, T, d) = \frac{1}{e} \cdot \frac{1}{U(r, T) N_C(T) F_{(r+1)}(m^\bullet) \exp(-F(0, 1, m^\bullet, d) \cdot \frac{I_D(T)}{d})} \quad (22)$$

$$a(m^\bullet, T, d) = \left( \frac{k}{ze} \right) \left[ \frac{F_{(r+2)}(m^\bullet) \exp(-F(1, 1, m^\bullet, d) \cdot \frac{I_D(T)}{d})}{F_{(r+1)}(m^\bullet) \exp(-F(0, 1, m^\bullet, d) \cdot \frac{I_D(T)}{d})} - m^\bullet \right] \quad (23)$$

Формули (22) та (23) показують, що за наявності в кристалі просторового квантування енергетичного спектру носіїв заряду кінетичні властивості такого кристала мають аналітичну залежність від його мікроскопічного розміру  $d$ . Ця залежність описується такою функцією кореляції:

$$K(d) = \exp(-F(i, j, m^\bullet, d) \cdot \frac{I_D(T)}{d}) \quad (24)$$

Загальний функціональний аналіз формул (22)–(24) показує, що вони якісно і кількісно описують результати експериментальних досліджень кінетичних коефіцієнтів  $r(m^\bullet, T, d)$  та  $a(m^\bullet, T, d)$ , отриманих в роботах [10-12].

адекватно описує природу фактичних кінетичних властивостей кристалів. Запропоновані загальні формули кінетичних властивостей кристалів дозволили якісно та кількісно описати експериментальні термоелектричні характеристики ниткоподібних кристалів на основі Si.

**Буджак Я.С.** – професор, д.ф.-м.н., професор кафедри напівпровідникової електроніки;  
**Дружинін А.О.** – професор, д.т.н., завідувач кафедри напівпровідникової електроніки;  
**Нічкало С.І.** – к.т.н., старший науковий співробітник кафедри напівпровідникової електроніки.

## Висновки

Ми показали, що теоретична модель кінетичних властивостей напівпровідникових кристалів

- [1] В.М. Askerov, Electron Transport Phenomena in Semiconductors (World Scientific, Singapore, 1994).
- [2] Н. Haug, А.-Р. Jauho, Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors (Springer, 1996).
- [3] О. Madelung, Physics of III-V Compounds (Wiley, New York, 1964).
- [4] К. Seeger, Semiconductor Physics (Springer-Verlag Wien, New York, 1973).
- [5] Р.У. Yu, М. Cardona, Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties (Springer, 2010).
- [6] Т. Pustelny, А. Opilski, В. Pustelny, Acta Physica Polonica A 114(6 A), A183 (2008).
- [7] Я.С. Буджак, Т. Вацлавски, Фізика і хімія твердого тіла 19(2), 134 (2018) (doi: 10.15330/pssc.19.2.134-138).
- [8] Я. С. Буджак, Фізика і хімія твердого тіла 19(3), 217 (2018) (doi: 10.15330/pssc.19.3.217-221).
- [9] Я.С. Буджак, А.О. Дружинін, Т.К. Вацлавський, Фізика і хімія твердого тіла 20(2), 133 (2019) (doi: 10.15330/pssc.20.2.133-138).
- [10] А. Druzhinin, I. Ostrovskii, Iu. Kogut, S. Nichkalo, Т. Shkumbatyuk, Physica Status Solidi C 8(3), 867 (2011) (doi: 10.1002/pssc.200900266).

- [11] A.P. Dolgolenko, A.A. Druzhinin, A.Ya. Karpenko, S.I. Nichkalo, I.P. Ostrovsky, P.G. Litovchenko, A.P. Litovchenko, Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics 14(4), 456 (2011).
- [12] A. Druzhinin, I. Ostrovskii, N. Liakh-Kaguy et al., Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering 10445, Article number 1044556 (2017) (doi: 10.1117/12.2280895).

Ya.S. Budzhak, A.A. Druzhinin, S.I. Nichkalo

## Theoretical Analysis of Experimental Thermoelectric Characteristics of Silicon-Based Whiskers

*Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine, [druzh@polynet.lviv.ua](mailto:druzh@polynet.lviv.ua)*

It is shown that when a conductive crystal with electric field strength  $\vec{E}$  and a temperature gradient  $\nabla_r T$  is placed in a magnetic field with an induction vector  $\vec{B}$ , processes of charge and heat carriers transport occur, and they can be described by known generalized electrical conduction and heat conduction equations. The tensors and scalar coefficients that make up these equations are the kinetic properties of crystals. They describe the nature of actual properties of crystals and have a wide pragmatic application in modern solid-state electronics. The process of spatial quantization of the spectrum and its influence on the kinetic properties of crystals is also analyzed.

**Key words:** Gibbs potential, chemical potential, dispersion law, whisker, thermoelectrics.