

03,19

## Численное моделирование кинетических свойств антимонида индия

© В.Г. Орлов<sup>1,2</sup>, Г.С. Сергеев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“, Москва, Россия

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл., Россия

E-mail: orlov@nrcki.ru

(Поступила в Редакцию 25 марта 2013 г.)

На основе численного решения кинетического уравнения Больцмана проведено систематическое исследование поведения кинетических коэффициентов  $n$ -InSb в широкой области температур и концентраций допирующих атомов. Проанализированы термоэлектрические характеристики антимонида индия. Рассмотрено влияние различных механизмов рассеяния носителей заряда на кинетические коэффициенты и эффективность термоэлектрического преобразования энергии. Выявлена природа особенностей на температурных и концентрационных зависимостях кинетических и термоэлектрических свойств  $n$ -InSb.

Работа выполнена при поддержке гранта ведущей научной школы НШ-215.2012.2.

### 1. Введение

Антимонид индия (InSb) — хорошо изученный узкозонный прямозонный полупроводник типа  $A^{III}B^V$  с рекордными значениями электронной подвижности, малой эффективной электронной массой [1,2], гигантскими значениями  $g$ -фактора электронов проводимости [3]. Уникальные свойства InSb обусловили его широкое использование для изготовления инфракрасных фотодетекторов. Термоэлектрические свойства InSb также исследовались [4,5], 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  $Bi_2Te_3$ ,  $PbTe$  или сплавы  $Ge-Si$ .

В последние годы интерес к InSb возобновился как к материалу, перспективному для наноэлектроники (см., например, [6,7]). Выявлена также лидирующая роль InSb среди соединений типа  $A^{III}B^V$  при исследовании возможности использования полупроводниковых нанопроволок в качестве рабочего материала в устройствах для термоэлектрического преобразования энергии [8,9]. Вследствие расширения областей потенциального применения InSb представляло интерес провести детальное рассмотрение его транспортных свойств путем расчета температурных и концентрационных зависимостей кинетических коэффициентов: проводимости  $\sigma$ , термоэдс (коэффициента Зеебека)  $s$ , теплопроводности  $\kappa$  и термоэлектрических характеристик — с выделением парциальных вкладов от основных механизмов рассеяния носителей заряда и проведением вычислений в максимально широком температурном интервале. В настоящей работе кинетические коэффициенты находились на основе численного решения кинетического уравнения

Больцмана. Ранее расчеты кинетических свойств InSb проводились (см., например, [10–13]), но степень детализации представленной в указанных работах информации была зачастую существенно меньше.

### 2. Метод расчета кинетических коэффициентов InSb

Кинетическое уравнение Больцмана — интегродифференциальное уравнение, его аналитическое решение чаще всего находят в приближении времени релаксации или с помощью вариационного метода. Указанные подходы имеют ряд известных ограничений [14–16].

Альтернативой аналитическому рассмотрению являются численные методы решения уравнения Больцмана, которые используются в подавляющем большинстве работ по расчету кинетических коэффициентов. Несмотря на трудоемкость, численные методы позволяют учитывать как особенности электронной структуры вещества, так и различные механизмы неупругого рассеяния электронов и дырок в полупроводниках. Для численного решения задач электронного транспорта широко используется метод Монте-Карло [17,18], а также различные детерминистические методы [19–25].

В настоящей работе кинетическое уравнение для носителей заряда в полупроводнике [26,27] решалось итерационно (аналогично [28]). Рассматривался линеаризованный вариант уравнения Больцмана для носителей заряда с законами дисперсии, полученными с помощью модели Кейна (см. Приложение 1). Механизмы рассеяния носителей заряда и входящие в них параметры приведены в Приложении 2.

При наличии в образце электрического поля  $\mathbf{E}$  и градиента температуры  $\nabla T$  (считаем их сонаправленными) поправка к равновесной фермиевской функции

распределения  $f_0$  электронов ищется пропорциональной левой части уравнения Больцмана [14,15]:

$$\Delta f = f(\mathbf{k}) - f_0(\varepsilon) = \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta) \times \left( \phi_1(k)(eE - \nabla\mu) + \phi_2(k)(\varepsilon - \mu) \frac{\nabla T}{T} \right), \quad (1)$$

где  $\theta$  — угол между вектором  $\mathbf{k}$  и электрическим полем (или градиентом температуры),  $\varepsilon$  — энергия носителей заряда,  $\mathbf{v} = d\varepsilon/d\mathbf{k}$  — скорость,  $e$  — заряд носителя,  $T$  — температура,  $\mu$  — химический потенциал, который находится из условия электронейтральности [26,27],  $\phi_1(k)$  и  $\phi_2(k)$  — неизвестные функции, которые находятся численно из линеаризованного кинетического уравнения.

Согласно [26,27], для описания дырок удобно использовать обозначения

$$\mu_p = -\varepsilon_g - \mu, \quad \varepsilon_p = -\varepsilon_g - \varepsilon, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_g$  — ширина запрещенной зоны.

В этих обозначениях равновесная функция распределения дырок принимает стандартный вид распределения Ферми, а поправка к равновесной функции распределения дырок имеет вид, аналогичный (1).

Линеаризованное уравнение Больцмана для функций  $\phi_1(k)$  и  $\phi_2(k)$  можно переписать в форме уравнения Фредгольма второго рода

$$\phi_1^{(i)}(k) = \frac{\int \phi_1^{(i)}(k') \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon'} v' \cos(\theta') W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d\mathbf{k}' - \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta)}{\int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta) W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\mathbf{k}'}, \quad (3)$$

$$\phi_2^{(i)}(k) = \frac{\int \phi_2^{(i)}(k') \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon'} v' \cos(\theta') [\varepsilon' - \mu] W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d\mathbf{k}' + \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} [\varepsilon - \mu] v \cos(\theta)}{\int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} [\varepsilon - \mu] v \cos(\theta) W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\mathbf{k}'}, \quad (4)$$

где индекс  $i = 1, 2, 3$  подразумевает три сорта носителей (электроны, легкие и тяжелые дырки соответственно).  $W(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  — вероятность перехода из состояния с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и энергией  $\varepsilon$  в состояние с вектором  $\mathbf{k}'$  и энергией  $\varepsilon'$ . Величина  $W(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  в случае рассеяния носителей заряда на колебаниях решетки содержит функцию распределения фононов. С учетом наличия примесей в образце и того факта, что область температур  $T < 77$  К в настоящей работе не рассматривалась, фононы считались равновесными.

Для решения уравнений (3) и (4) использовался метод последовательных подстановок Лиувилля–Неймана. Выполненная отдельно проверка показала, что решение данных уравнений указанным методом не зависит от вида начальной функции. Поэтому в качестве начальных функций брались нулевые функции.

InSb имеет кубическую кристаллическую решетку (пространственная группа  $T_d^2$  или  $F\bar{4}3m$ ), вследствие чего кинетические коэффициенты — проводимость  $\sigma$ , теплопроводность  $\kappa$  и термоэдс  $s$  — являются скалярами. Проводимость  $\sigma$  в отсутствие  $\nabla T$  вычисляется с помощью решения уравнения (3)

$$\sigma = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \sum_i \int v^2 \phi_1^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^2(\theta) d\mathbf{k}. \quad (5)$$

При нахождении  $s$  и электронного вклада в теплопроводность  $\kappa_e$  следует учесть электроизолированность образца. Данное условие позволяет выразить  $\nabla\mu$  через  $\nabla T$

$$\nabla\mu = -\nabla\mu_p = \gamma \nabla T / T. \quad (6)$$

В (6) введено обозначение

$$\gamma = \frac{\sum_i e_i \int \phi_2^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \cos^2(\theta) (\varepsilon - \mu) d\mathbf{k}}{\sum_i (\pm) e_i \int \phi_1^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \cos^2(\theta) d\mathbf{k}}. \quad (7)$$

В (7) и далее верхний знак относится к электронам, нижний — к дыркам.

С учетом (4) и (6) выражение для  $\kappa_e$  имеет следующий вид:

$$\kappa_e = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{T} \sum_i \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^2(\theta) v^2 (\varepsilon - \mu) \times [\phi_2^{(i)}(k)(\varepsilon - \mu) \mp \gamma \phi_1^{(i)}(k)] d\mathbf{k}. \quad (8)$$

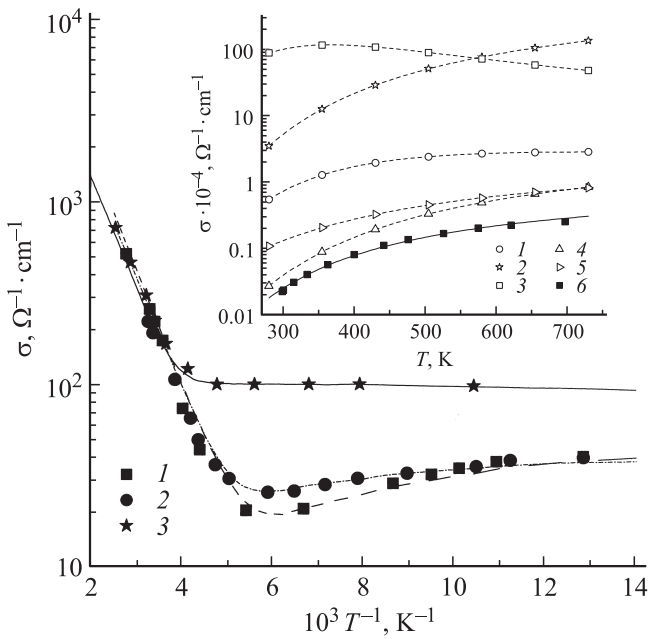
Исходя из выражения для электрического тока  $\mathbf{J} = \frac{e}{c} \nabla\mu + \sigma s \nabla T$  [29], термоэдс  $s$  можно представить в виде

$$s = \frac{1}{\sigma T} \frac{1}{(2\pi)^3} \times \sum_i e_i \int v^2 (\varepsilon - \mu) \phi_2^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^2(\theta) d\mathbf{k}. \quad (9)$$

При вычислении кинетических коэффициентов (5)–(9) интегрирование велось по части зоны Бриллюэна, в которой отклонение функции распределения носителей заряда от равновесной (1) удовлетворяет условию

$$\frac{|\Delta f(k)|}{\max_k |\Delta f(k)|} > 10^{-5}. \quad (10)$$

Проверка показала, что область интегрирования — шар, поверхность которого значительно удалена от границ зоны Бриллюэна. Использование при интегрировании данного условия приводит к погрешности в вычислении  $\sigma$ ,  $\kappa_e$ ,  $s$  не более 0.01%.



**Рис. 1.** Температурная зависимость проводимости для различных значений  $N_d - N_a$ . Точки — экспериментальные данные [31] (1, 2) и [5] (3) для  $N_d - N_a = 7.7 \cdot 10^{14}$  (1),  $1.2 \cdot 10^{15}$  (2) и  $1.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  (3). Штриховая, штрихпунктирная и сплошная линии — расчетные кривые для соответствующих концентраций. На вставке — температурная зависимость проводимости для  $N_d - N_a = 8.8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  при температурах выше комнатной. Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния. Точки, соединенные штриховыми линиями, — расчет с учетом одного механизма рассеяния носителей заряда: 1 — DA, 2 — PA, 3 — DO, 4 — PO, 5 — CC; 6 — экспериментальные данные [31].

### 3. Результаты и обсуждение

С помощью описанного выше численного метода и параметров, приведенных в Приложениях 1 и 2, для  $n\text{-InSb}$  были получены зависимости кинетических коэффициентов  $\sigma$ ,  $s$  и  $\kappa_e$  от концентрации допирующих атомов  $N_d$  и температуры  $T$  в интервале от 77 К до температуры плавления ( $\sim 780$  К). Это позволило найти температурную и концентрационную зависимости термоэлектрических характеристик  $\text{InSb}$ : так называемого „power factor“ ( $P = \sigma s^2$ ) и безразмерной термоэлектрической добротности ( $ZT = PT/\kappa$ ). Вычисления проводились на Многоцелевом вычислительном комплексе НИЦ „Курчатовский институт“ [30] с применением распараллеливания программного кода.

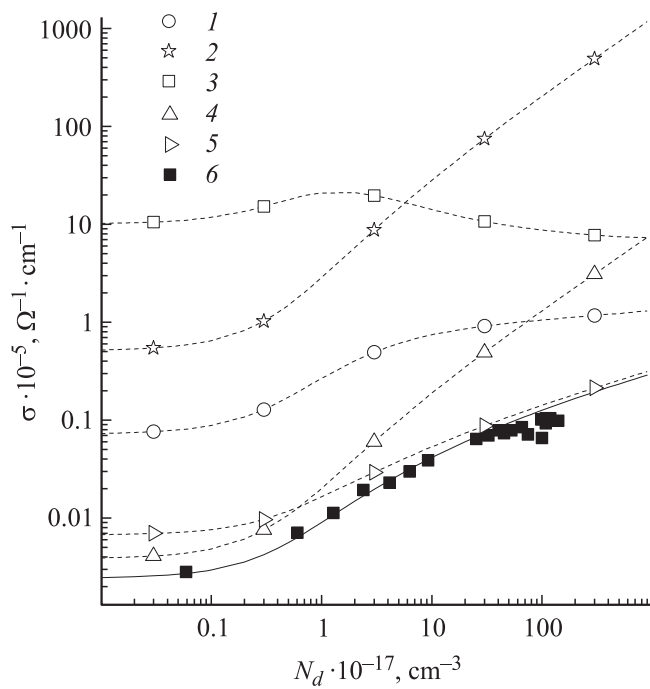
На температурной зависимости проводимости  $\sigma$  образцов  $n\text{-InSb}$  с относительно небольшими концентрациями допирующих атомов экспериментально обнаружен минимум [31] (рис. 1). Данная особенность хорошо воспроизводится в рамках использованной расчетной схемы. При вычислениях разность концентраций донорных и акцепторных атомов  $N_d - N_a$  была взята из экспериментальных данных, а степень компенсации

$N_d/N_a$  ( $N_a$ ,  $N_d$  — концентрации акцепторных и донорных примесных атомов соответственно) выбиралась из условия близости теоретической кривой к эксперименту. При низких температурах концентрация свободных электронов  $n_e$  определяется разностью  $N_d - N_a$ , при более высоких температурах учитывался также вклад собственных электронов в  $n_e$ . Наличие минимума у  $\sigma$  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  $\sigma$  минимум отсутствует. При температурах  $T > 300$  К все образцы обладают собственной проводимостью и имеют примерно одинаковые значения  $\sigma$ . Ранее подобное низкотемпературное поведение было численно получено в [12], но природа особенности температурного поведения  $\sigma$  не обсуждалась.

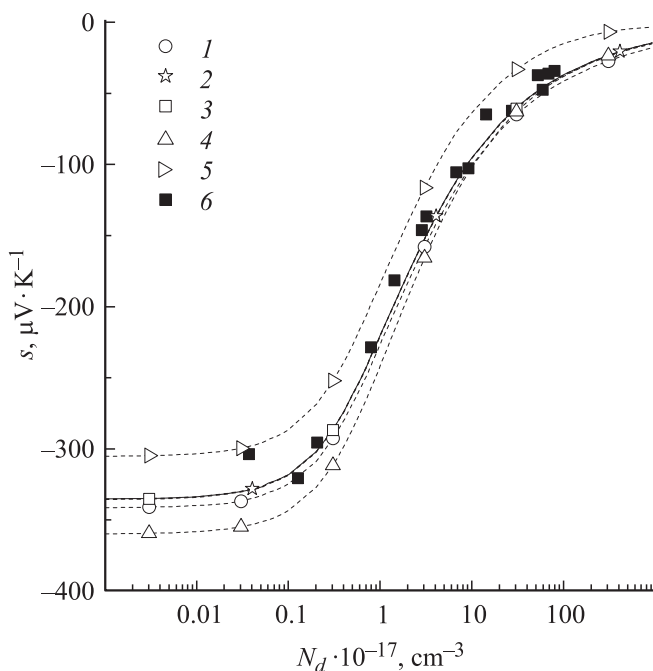
На вставке к рис. 1 представлена зависимость  $\sigma$  от  $T$  в области температур выше комнатной. На этом рисунке также приведены парциальные вклады в  $\sigma$  для различных механизмов рассеяния электронов. В данной области температур существенным является рассеяние на полярных оптических фононах (PO), „тяжелых“ дырках (CC) и на деформационном акустическом потенциале (DA). Хорошее совпадение экспериментальных данных и теоретических результатов свидетельствует о том, что основные механизмы рассеяния в расчетной модели учтены (роль рассеяния на деформационном оптическом (DO) и пьезоакустическом (PA) потенциалах невелика).

На рис. 2 приведена концентрационная зависимость  $\sigma$  и парциальных вкладов в  $\sigma$  от различных механизмов рассеяния при температуре 300 К. Для концентраций  $N_d < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  определяющим является PO-рассеяние, для более высоких концентраций доминирует рассеяние на ионизованных атомах примесей (CC). Вычисления, проведенные для температуры 77 К, показали, что концентрационная зависимость парциальных вкладов ведет себя аналогично найденной при 300 К.

Концентрационные зависимости термоэдс  $\text{InSb}$ , полученные с использованием (4) и (9) в широком диапазоне температур, хорошо согласуются с экспериментальными данными [5]. Результаты для  $T = 300$  К приведены на рис. 3. Поскольку для термоэдс аналога правила Матиссена об аддитивности удельного сопротивления не существует, с целью оценки степени влияния различных механизмов рассеяния носителей на  $s$  были проведены расчеты с исключением одного из механизмов рассеяния. Результаты, приведенные на рис. 3, указывают на то, что рассеяние на полярных оптических фононах и на ионизованных атомах примесей оказывает наиболее существенное влияние на величину  $s$ . Рассеяние на акустическом деформационном потенциале влияет на  $s$  в меньшей степени, а рассеяние на оптическом деформационном и пьезоакустическом потенциалах практически



**Рис. 2.** Зависимость проводимости от концентрации допирующих атомов  $N_d$  при  $T = 300$  К. Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния, 1–5 — то же, что на вставке к рис. 1, 6 — значения проводимости, найденные из экспериментальных данных для подвижности [32] путем умножения на  $N_d$  и заряд электронов.



**Рис. 3.** Зависимость термоэдс от концентрации  $N_d$  при  $T = 300$  К. 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 DA, 2 — без PA, 3 — без DO, 4 — без PO, 5 — без CC; 6 — экспериментальные данные [33].

не влияет на  $s$  при  $T = 300$  К. Полученные температурные зависимости  $s$  находятся в хорошем согласии с результатами расчетов [10,11], соответствующие кривые не приводятся в настоящей работе.

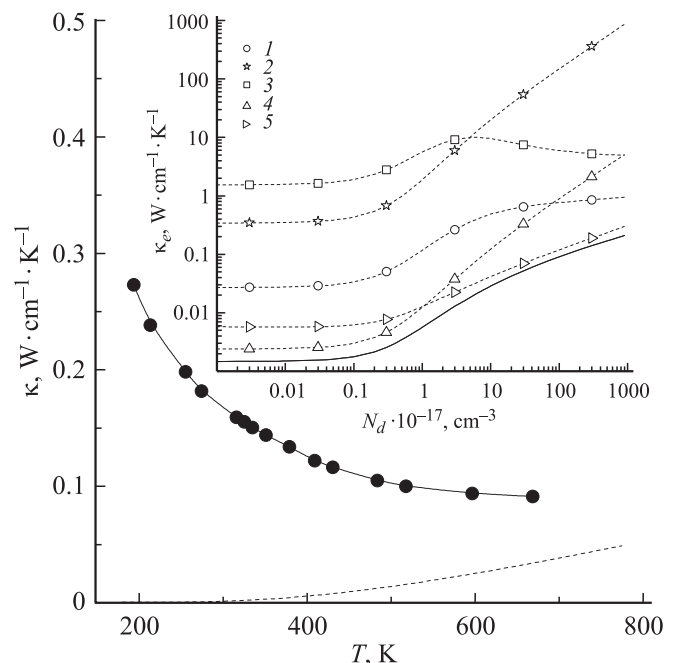
Проведенные с помощью формул (4), (8) расчеты электронного вклада  $\kappa_e$  в теплопроводность InSb показали, что при  $N_d < 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  в области температур ниже 300 К  $\kappa$  определяется главным образом вкладом фононов (рис. 4). При более высоких концентрациях, как следует из вставки на рис. 4, увеличение  $N_d$  приводит к заметному росту  $\kappa_e$  и тем самым к увеличению  $\kappa$ . На вставке к рис. 4 приведена концентрационная зависимость парциальных вкладов в  $\kappa_e$  от различных механизмов рассеяния носителей заряда. Следует отметить, что основной вклад в  $\kappa_e$  вносят те же самые механизмы рассеяния, которые определяют и величину  $\sigma$  (рис. 2).

Интегральной характеристикой кинетических свойств полупроводника является термоэлектрическая добротность [34]

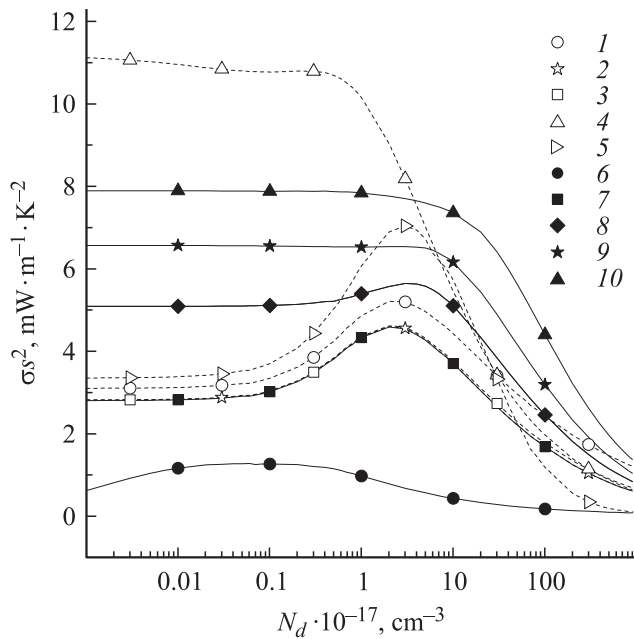
$$Z = \sigma s^2 / \kappa = P / \kappa. \quad (11)$$

Данный параметр, умноженный на температуру, безразмерен. Он определяет эффективность термоэлектрического преобразования энергии и чувствителен к физическим характеристикам образца [29].

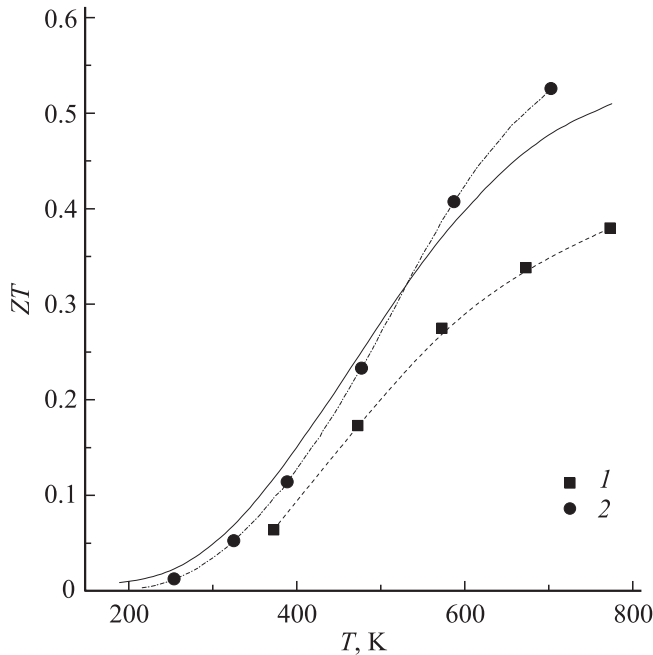
Как следует из рис. 2 и 3, комбинация  $\sigma$  и  $s$  в  $P$  как функция концентрации  $N_d$ , может иметь немонотонный характер. В теоретической работе [8] при  $T = 300$  К



**Рис. 4.** Температурная зависимость теплопроводности InSb. Точки — экспериментальные данные [5]. Сплошная линия проведена для наглядности, штриховая линия — рассчитанный электронный вклад  $\kappa_e$  в теплопроводность. На вставке — концентрационная зависимость  $\kappa_e$ . Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния. 1–5 — то же, что на вставке к рис. 1.



**Рис. 5.** Концентрационная зависимость  $P = \sigma s^2$ . Точки, соединенные штриховыми линиями, — расчет для  $T = 300$  К без учета одного из механизмов рассеяния носителей заряда: 1–5 — то же, что на рис. 3. Точки, соединенные сплошными линиями, — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния для температур: 77 (6), 300 (7), 400 (8), 500 (9) и 700 К (10).



**Рис. 6.** Температурная зависимость  $ZT$ . Сплошная линия — модельная кривая. Экспериментальные точки: 1 — [4] ( $N_d = 4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ), 2 — [5] ( $N_d = 1.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ). Штриховая и штрихпунктирная линии проведены для наглядности.

был обнаружен максимум в концентрационном поведении  $P$ . Для оценки влияния на  $P$  температуры и концентрации допирующих атомов, а также для выяснения роли механизмов рассеяния были проведены расчеты концентрационной зависимости  $P$  в интервале температур от 77 до 780 К. На рис. 5 приведена зависимость  $P$  от  $N_d$  для нескольких значений температуры, а также результаты расчетов  $P$  с исключением одного из механизмов рассеяния при  $T = 300$  К. Из рис. 5 следует, что  $P$  увеличивается с ростом температуры. Кроме того, для температур ниже 500 К существует концентрация примесей, при которой  $P$  имеет максимум. Допирование в области концентраций  $N_d > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  для всех температур приводит к резкому падению  $P$ . Как и следовало ожидать исходя из рис. 2 и 3, в области концентраций  $N_d < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  исключение механизма рассеяния носителей на полярных оптических фононах оказывает наиболее сильное влияние на величину  $P$ .

Температурная зависимость  $ZT$  найдена с использованием результатов расчетов  $\sigma$  и  $s$  для  $N_d = 1.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , а также экспериментальных данных для теплопроводности [5]. На рис. 6 приведены расчетная кривая и экспериментальные данные для  $ZT$  [4,5]. Результаты расчетов удовлетворительно описывают экспериментальную температурную зависимость  $ZT$ . Проведенный выше анализ концентрационной и температурной зависимостей кинетических коэффициентов и  $P$  показал, что в области  $T < 500$  К дополнительное допирование, согласно рис. 5, допускает возможность увеличения  $ZT$ . Для более высоких температур увеличение  $N_d$  не должно приводить к росту  $ZT$ .

#### 4. Заключение

Результаты расчетов кинетических коэффициентов InSb, выполненных в настоящей работе, хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными в широких диапазонах температур и концентраций донорных примесей. Использованный в работе численный метод решения уравнения Больцмана позволил рассмотреть влияние различных механизмов рассеяния носителей заряда на кинетические свойства и термоэлектрическую добротность, определяющую эффективность использования InSb в качестве рабочего материала для термоэлектрического преобразования энергии. Выявлено существенное влияние рассеяния носителей заряда полярными оптическими фононами на термоэлектрическую добротность. В области  $T < 500$  К допирование допускает возможность увеличения  $ZT$ . Для более высоких температур увеличение концентрации донорных атомов не должно приводить к росту  $ZT$ . Таким образом, проведенный в настоящей работе анализ показал, что имеющиеся в литературе экспериментальные значения термоэлектрической добротности массивного InSb [4,5] являются оптимальными в области высоких температур.

Таблица 1. Параметры модели Кейна в обозначениях работ [36,39]

Параметр	Обозначение	Значение	Лит. ссылка
Ширина запрещенной зоны	$\varepsilon_g$	$(0.258 - 2.9 \cdot 10^{-4}T)$ eV	[40]
Ширина запрещенной зоны без учета вклада электрон-фононного взаимодействия в ее температурное изменение	$\varepsilon_g^*$	$(0.2436 - 0.96 \cdot 10^{-5}T)$ eV	[40]
Эффективная масса электрона в Г-точке при $T = 4.2$ К	$\frac{m_e}{m_e^0}$	0.014	[1,2]
Константы, учитывающие влияние базисных функций $d$ - и $f$ -типа на собственные функции электронов и дырок	$A'$	0	[41]
	$M$	-5.5	
	$L'$	-2.7	
	$L' - N' - M$	7.2	
Эффективная масса тяжелых дырок	$\frac{m_{ph}}{m_e^0}$	0.37	[40]
Спин-орбитальное расщепление валентных зон	$\Delta$	0.81 eV	[1,2]

Таблица 2. Параметры, использованные для вычисления вероятности рассеяния носителей заряда на колебаниях решетки

Параметр	Обозначение	Значение	Лит. ссылка
Плотность кристалла	$\rho$	$5.775 \text{ cm}^3/\text{g}$	[1,2]
Параметр решетки	$a_0$	$0.648 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$	[1,2]
Температура Дебая оптических фононов	$\hbar\omega/k_b$	274 K	[1,2]
Диэлектрические константы	$\kappa_\infty$	15.75	[1]
	$\kappa_0$	17.64	
Оптические деформационные потенциалы	$d_0$	34.8 eV	[44]
	$d_1$	5.0 eV	
Акустические деформационные потенциалы	$C$	-9.5 eV	[10,45]
	$l$	-14.1 eV	
	$m$	-4.73 eV	
	$n$	-3.9 eV	
Скорость звука	$v_{\parallel}$	$3.7 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$	[1,2]
	$v_{\perp}$	$2.3 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$	
Пьезоэлектрическая константа	$e_{14}$	$2.38 \cdot 10^4 \text{ dyn}^{1/2}/\text{cm}$	[11]

## Приложение 1. Описание модели зонной структуры InSb

Для расчета зонной структуры InSb использовалась модель Кейна [26,27,35], учитывающая спин-орбитальное взаимодействие, которое играет существенную роль в соединениях с кристаллической структурой типа цинковой обманки. При этом в модели зонной структуры возникают четыре вида носителей заряда: электроны проводимости, „легкие“ и „тяжелые“ дырки, а также зона отщепленных дырок. Законы дисперсии электронов проводимости и дырок находились из формул работы [36], в которой модель Кейна [26] рассматривалась в сферическом приближении.

Следует отметить, что в InSb ширина запрещенной зоны  $\varepsilon_g$  зависит от температуры. В общем случае температурное изменение  $\varepsilon_g$  обусловлено двумя механизмами: взаимодействием электронов с фононами и объемным температурным расширением [37]. В [38] было показано, что электрон-фононное взаимодействие в InSb практи-

чески не оказывает влияния на величины эффективных масс носителей заряда. Поэтому при расчете законов дисперсии в модели Кейна была использована  $\varepsilon_g$  без учета электрон-фононного взаимодействия [39].

Поскольку заселенность отщепленной зоны дырок много меньше заселенностей других зон, при расчете транспортных свойств InSb вклад указанной зоны не учитывался.

В табл. 1 приведены параметры модели Кейна в обозначениях работ [36,39], использованные при расчете дисперсионных кривых носителей заряда. Значения этих параметров брались из работ, указанных в последнем столбце табл. 1.

## Приложение 2. Описание механизмов рассеяния носителей заряда в InSb

В настоящей работе в уравнении Больцмана учитывались следующие механизмы рассеяния электронов про-

водимости: электрон-фононное взаимодействие, включающее рассеяние на акустическом (DA) [42,43] и оптическом (DO) [44] деформационных потенциалах, рассеяние на пьезоакустическом потенциале (PA) [42,43] и на полярных оптических фононах (PO) [42,43]; рассеяние на „тяжелых“ дырках (CC) [37]. Формулы для матричных элементов, входящих в интеграл столкновений, приведены в указанных выше источниках. В допированном InSb также учитывалось рассеяние на ионизованных атомах примесей [43]. Ввиду схожести матричных элементов рассеяния электронов на тяжелых дырках и ионизованных атомах примесей данные механизмы рассеяния на заряженных центрах в допированном InSb рассматривались совместно и сокращенно обозначались CC.

Рассмотрение этих механизмов применительно к дыркам было проведено по аналогии с рассеянием электронов. В работе не приводятся выражения для вероятностей переходов  $W(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  ввиду их громоздкости. Электрон-электронное рассеяние и рассеяние дырок друг на друге считалось несущественным [36].

В табл. 2 приведены параметры, использованные для вычисления вероятностей рассеяния носителей заряда в обозначениях [43,44]. Значения этих параметров брались из работ, указанных в последнем столбце табл. 2.

## Список литературы

- [1] Group IV elements, IV–IV and III–V compounds. Pt b. Electronic, transport, optical and other properties. In: Landolt-Börnstein. Group III. Condensed matter. Vol. 41A1b / Eds O. Madelung, U. Rössler, M. Schulz. Springer-Verlag, Germany (2002). 347 p.
- [2] Electronic archive. New semiconductor materials. Characteristics and properties; [www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InSb/index.html](http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InSb/index.html)
- [3] R.A. Isaacson, Phys. Rev. **169**, 312 (1968).
- [4] R. Bowers, R.W. Ure, J.E. Bauerle, A.J. Cornish. J. Appl. Phys. **30**, 930 (1959).
- [5] G. Busch, E. Steigmeier. Helv. Phys. Acta **34**, 1 (1961).
- [6] H.A. Nilsson, P. Caroff, C. Thelander, M. Larsson, J.B. Wagner, L.-E. Wernersson, L. Samuelson, H.Q. Xu. Nano Lett. **9**, 3151 (2009).
- [7] H. Yao, H.Y. Günel, C. Blömers, K. Weis, J. Chi, J.G. Lu, J. Liu, D. Grützmacher, T. Schäpers. Appl. Phys. Lett. **101**, 082103 (2012).
- [8] N. Mingo. Appl. Phys. Lett. **84**, 2652 (2004).
- [9] N. Mingo. Appl. Phys. Lett. **88**, 149902 (2006).
- [10] D.L. Rode. Phys. Rev. B **3**, 3287 (1971).
- [11] E. Litwin-Staszewska, W. Szymanska, R. Piotrkowski. Phys. Status Solidi B **106**, 551 (1981).
- [12] Y.J. Jung, M.K. Park, S.I. Tae, K.H. Lee, H.J. Lee. J. Appl. Phys. **69**, 3109 (1991).
- [13] S. Yamaguchi, T. Matsumoto, J. Yamazaki, N. Kaiwa, A. Yamamoto. Appl. Phys. Lett. **87**, 201902 (2005).
- [14] Г. Бете, А. Зоммерфельд. Электронная теория металлов. Гостехиздат, М. (1938). 316 с.
- [15] Дж. Займан. Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах / Под ред. В.Л. Бонч-Бруевича. ИИЛ, М. (1962). 488 с.
- [16] M. Kohler. Z. Physik **124**, 772 (1948).
- [17] M.V. Fischetti. IEEE Trans. Electron. Devices **38**, 634 (1991).
- [18] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, C. Hamaguchi. J. Appl. Phys. **75**, 297 (1994).
- [19] C. Ertler, F. Schurrer, W. Koller. J. Phys. A **35**, 8673 (2002).
- [20] E. Fatemi, F. Odeh. J. Comput. Phys. **108**, 209 (1993).
- [21] A. Majorana, R.M. Pidanella. J. Comput. Phys. **174**, 649 (2001).
- [22] M.A. Alam, M.A. Stettler, M.S. Lundstrom. Solid-State Electron. **36**, 263 (1993).
- [23] J.P. Aubert, J.C. Vaissiere, J.P. Nougier. J. Appl. Phys. **56**, 1128 (1984).
- [24] K. Fletcher, P.N. Butcher. J. Phys. C **5**, 212 (1972).
- [25] J.P. Nougier, M. Rolland. Phys. Rev. B **8**, 5728 (1973).
- [26] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. Наука, М. (1978). 616 с.
- [27] Б.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. Наука, М. (1985). 320 с.
- [28] H.D. Rees. J. Phys. Chem. Solids **30**, 643 (1969).
- [29] А.Г. Самойлович. Термоэлектрические и термомагнитные методы превращения энергии. ЛКИ, М. (2007). 224 с.
- [30] <http://computing.kiae.ru/>
- [31] H.J. Hrostowski, F.J. Morin, T.H. Geballe, G.H. Wheatley. Phys. Rev. **100**, 1672 (1955).
- [32] E. Litwin-Staszewska, S. Porowski, A. Filipchenko. Phys. Status Solidi B **48**, 519 (1971).
- [33] A.S. Filipchenko, D.N. Nasledov. Phys. Status Solidi B **19**, 435 (1967).
- [34] A.F. Ioffe. Semiconductor thermoelements and thermoelectric cooling. Infosearch Limited, London (1957). 184 p.
- [35] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).
- [36] W. Szymanska, T. Dietl. J. Phys. Chem. Solids **39**, 1025 (1978).
- [37] H.Y. Fun. Phys. Rev. **82**, 900 (1951).
- [38] H. Frohlich, H. Pelzer, S. Zienau. Phil. Mag. **41**, 221 (1950).
- [39] H. Ehrenreich. J. Phys. Chem. Solids **2**, 131 (1957).
- [40] M. Oszwaldowski, M. Zimpel. J. Phys. Chem. **49**, 1179 (1988).
- [41] C.R. Pidgeon, S.H. Groves. Phys. Rev. **186**, 824 (1969).
- [42] W. Zawadzki, W. Szymanska. Phys. Status Solidi B **45**, 415 (1971).
- [43] W. Szymanska, P. Boguslawski, W. Zawadzki. Phys. Status Solidi B **65**, 641 (1974).
- [44] P. Boguslawski. Phys. Status Solidi B **70**, 53 (1975).
- [45] J.L. Ivey. Phys. Rev. B **9**, 4281 (1974).