



Fig. 4. Mechanical characteristic of SRM in trolleybus electric drive

The calculations results by known techniques which used for to dynamic characteristics calculation of DC TE and which based on a given mechanical characteristics of drive motor shown, that the electric drive, based on designed SRM provides on a horizontal section trolley's speed till up 90 km / h (85 km / h for trolley with DC TE type KR4389). The power developed by SRM per weight unit, is about 7 kWt / hour, and the angle at which the trolley can move up without acceleration with speed of 25 km / hour is 11.2°. It is meet to modern foreign and domestic trolleybus.

Conclusions.

A switched reluctance motor with capacity storage for the trolley wheel's drive, characteristics of which allow it to compete with collector traction motors, for improved reliability and lower the volume of the active part. The electric drive based on the developed SRM provides high dynamic performance in

comparison with trolley electric substation at the DC TE.

Structurally switched reluctance motor with CBE is similar and reliably as FD AD. The natural mechanical characteristic of the SRM does not require additional formation and electronic components for both drives are almost identical, so SRM with CBE can be recommended for application in electric trolley wheels.

- [1]. Ткачук В.І. Керований вентиляний реактивний двигун з паралельним буфером енергії / В.І. Ткачук, Л.В. Каша, О.В. Грещук // Технічна електродинаміка. Науковий журнал. – 2004. – Ч.3. – С. 37–40.
- [2]. Ткачук В.І. Підсистема комп'ютерного діалогового проектування вентиляних реактивних двигунів / В.І. Ткачук // Електроенергетичні та електромеханічні системи. Вісник Національного університету "Львівська політехніка". – 1997. № 340. – С. 112–120.
- [3]. Ткачук В.І. Підсистема автоматизованого дослідження вентиляних реактивних двигунів / В.І. Ткачук // Технічна електродинаміка. Науковий журнал. – 1998. - С. 180–187.
- [4]. Комплект тягового електропривода ПТ для електро-транспорта [Электронный ресурс]: (совместное производство с ООО НПФ «АРС ТЕРМ»). – Режим доступа : www.npfarsterm.ru. – Название с домашней страницы Интернета.
- [5]. Ткачук В.І. Вентильний реактивний двигун з високою видатністю / В.І. Ткачук, І.С. Біляковський, В.Г. Гайдук // Проблеми автоматизованого електроприводу. Теорія і практика. Збірник наукових праць Дніпродзержинського державного технічного університету. – 2007. – С. 187–188.
- [6]. http://www.privod-news.ru/june_03/26-1.htm.
- [7]. <http://www.orionmotor.narod.ru/trans.htm>.

До питання про природу кінетичних властивостей провідних кристалів та їх діагностика

Д.ф.-м.н., проф. Я. Буджак

Національний університет «Львівська політехніка»

Abstract. In this article the method of the analyses of the experimental data of crystal's kinetic properties is described to find out their nature.

Key words: crystal's kinetic properties.

Вступ

Концентрація носіїв зарядів n , електропровідність кристалів σ , коефіцієнт ефекта Холла R , коефіцієнт ефекта Зеебека α , коефіцієнт ефекта Нернста-Еттінгсгаузена N , дрейфова рухливість U_D носіїв зарядів в кристалі, та холлівська рухливість U_H – це дуже важливі властивості напівпровідникових кристалів, бо практично часто ці властивості безпосередньо визначають практичне значення напівпро-відникового кристала у виробництві низки приладів твердотілої електроніки. Крім того ці властивості часто використовуються в аналізах експериментальних даних різних

кінетичних властивостей кристалів з метою ви-яснення їх природи. Це дуже важлива задача, бо вона пов'язана з проблемою прогнозування напівпровідникових кристалів із заданими властивостями в про-цесах їх техно-логічного синтезу.

Елементи теорії

В кінетичній теорії кристалів [1–5], яка ґрунтується на методах статистичних ансамблів із змінною кількістю частинок і користуючись великим канонічним розподілом Гіббса для нерівноважних ансамблів, показано, що для ізотропних кристалів, в умовах слабого магнітного поля, або його відсутності, їх кінетичні властивості $\sigma, R, \alpha, U_H, U_D$ та концентрація носіїв зарядів n в кристалах описуються такими загальними формулами:

$$n(\mu^*, T) = J(0, 0, \mu^*, T) \quad (1)$$

$$\sigma(\mu^*, T) = en(\mu^*, T) \frac{J(0,1,\mu^*, T)}{J(0,0,\mu^*, T)} \quad (2)$$

$$R(\mu^*, T) = \frac{1}{zen(\mu^*, T)} \times \frac{J(0,0,\mu^*, T)J(0,2,\mu^*, T)}{J(0,1,\mu^*, T)^2} \quad (3)$$

$$\alpha(\mu^*, T) = \left(\frac{k}{ze} \right) \left(\frac{J(1,1,\mu^*, T)}{J(0,1,\mu^*, T)} - \mu^* \right) \quad (4)$$

$$N(\mu^*, T) = \left(\frac{k}{e} \right) U_H(\mu^*, T) \left[\frac{J(1,1,\mu^*, T)}{J(0,1,\mu^*, T)} - \frac{J(1,2,\mu^*, T)}{J(0,2,\mu^*, T)} \right] \quad (5)$$

$$U_D(\mu^*, T) = \frac{J(0,1,\mu^*, T)}{J(0,0,\mu^*, T)} \quad (6)$$

$$U_H(\mu^*, T) = |\sigma R| = \frac{J(0,2,\mu^*, T)}{J(0,1,\mu^*, T)} = U_D(\mu^*, T) \frac{J(0,0,\mu^*, T)J(0,2,\mu^*, T)}{J(0,1,\mu^*, T)^2} \quad (7)$$

В цих формулах k - постійна Больцмана, e - абсолютна величина заряду електрона, ($z = \pm 1$) - знак заряду, крім того для зручності записів кінетичних (інтегралів) функціоналів $J(i, j, \mu^*, T)$ викристане таке позначення:

$$J(i, j, \mu^*, T) = \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^i u(\varepsilon)^j G(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \quad (8)$$

В цьому функціоналі $u(\varepsilon)$ - розмірна функція розсіювання з розмірністю рухливості. Вона описує вплив процесів розсіювання носіїв зарядів в кристали на дефектах кристалічної ґратки на його кінетичні властивості. Функція $G(\varepsilon)$, яка теж є складовою функціонала, описує загальну кількість енергетичних рівнів в дозволений зоні енергії в інтервалі $0 \div \varepsilon$, вона описується такою загальною формулою:

$$G(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon \left(\frac{2}{h^3} \oint_{\varepsilon(\vec{p})} \frac{dS}{|\nabla_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p})|} \right) d\varepsilon \quad (9)$$

В цій формулі h - постійна Планка, а поверхневий інтеграл береться по енергетичній поверхні, яка задається законом дисперсії $\varepsilon_{\vec{p}} = \varepsilon(\vec{p})$ носіїв зарядів. Функціонал також залежить і від відомої функції Фермі-Дірака $f_0 = f_0\left(\frac{\varepsilon}{kT} - \mu^*\right)$, яка має залежність від приведенного хімічного потенціала μ^* та температури кристала.

Аналіз загальних формул властивостей кристала (1)-(7) показує, що всі вони описуються функціоналом (8) з різними показниками i та j . Загальний

математичний аналіз цього функціонала [6] показав, що він відповідає такому відношенню:

$$\left(\frac{J(0,1,\mu^*, T)}{J(0,0,\mu^*, T)} \right)^2 \leq \frac{J(0,2,\mu^*, T)}{J(0,0,\mu^*, T)}$$

Тобто

$$f_R(\mu^*, T) = \frac{J(0,0,\mu^*, T)J(0,2,\mu^*, T)}{J(0,1,\mu^*, T)^2} \geq 1$$

Ця функція входить в склад формули коефіцієнта Холла (2) і називається фактором розсіювання Холла. Цей фактор дорівнює одиниці, коли $u(\varepsilon)$ не залежить від енергії ε , або коли носії заряду сильно вироджені, тобто коли $\mu^* > +4$.

Фактор розсіювання $f_R(\mu^*, T)$ має також і фізичний зміст. Дійсно маємо

$$f_R(\mu^*, T) = \frac{J(0,0,\mu^*, T)J(0,2,\mu^*, T)}{J(0,1,\mu^*, T)^2} = \frac{J(0,0,\mu^*, T)^2 J(0,2,\mu^*, T)}{J(0,0,\mu^*, T)J(0,1,\mu^*, T)^2} = \frac{J(0,2,\mu^*, T) \left(\frac{J(0,1,\mu^*, T)}{J(0,0,\mu^*, T)} \right)^{-2}}{\langle u; \mu^*, T \rangle^2} = \frac{\langle u^2; \mu^*, T \rangle}{\langle u; \mu^*, T \rangle^2}$$

В цій формулі кутовими дужками позначені середнє статистичне значення дрейфової рухливості носіїв зарядів

$$\langle u; \mu^*, T \rangle = \frac{J(0,1,\mu^*, T)}{J(0,0,\mu^*, T)} = U_D(\mu^*, T)$$

та середнє статистичне значення квадрата рухливості $\langle u^2; \mu^*, T \rangle$. Отже, згідно із правилами алгебри статистичних розрахунків, відношення

$$\frac{\langle u^2; \mu^*, T \rangle}{\langle u; \mu^*, T \rangle^2} \geq 1$$

завжди більше, або дорівнює одиниці.

Якщо у формулі (8) перейти до безрозмірної змінної інтегрування за формулою $x = \frac{\varepsilon}{kT}$, то тоді

згідно з формулою (2) для електропровідності кристала $\sigma(T)$ одержуємо таке рівняння:

$$J(0,1,\mu^*, T) = \int_0^\infty G(xkT, T) \left(-\frac{\partial f_0(xkT)}{\partial x} \right) u(xkT) dx = \frac{\sigma(T)}{e}$$

В цьому рівнянні для зручності записів уведемо таке позначення:

$$G(xkT) \left(-\frac{\partial f_0(xkT)}{\partial x} \right) = \frac{G(xkT, T)}{\left(2 \cosh \left(\frac{x}{2} - \frac{\mu^*(T)}{2} \right) \right)^2} = K(xkT, T)$$

Тоді інтегральне рівняння електропровідності (ІРЕ) набуває такого вигляду:

$$\int_0^\infty K(xkT, T) u(xkT) dx = \frac{\sigma(T)}{e}$$

Для кристалів з відомим законом дисперсії підінтегральна функція $K(xkT)$ відома, її в математиці називають ядром інтегрального інтегрального рівняння, а функція розсіювання $u(xkT)$ – невідома.

В рівнянні ІРЕ функція $\sigma(T)$ – це відома експериментально визначена функція температури. Тому для визначення невідомої функції $u(xkT)$ необхідно використати інтегральне рівняння електропровідності (ІРЕ), яке в математичних аналізах називають інтегральним рівнянням Фредгольма першого роду (ІРФ).

Функціональний аналіз інтегральних рівнянь типу ІРФ показує, що їх розв’язок є дуже нестійким відносно збурень функції $\sigma(T)$. Тому такі рівняння відносяться до класу некоректно поставлених задач. В зв’язку з цим, таке рівняння не має аналітичного розв’язку і створює великі труднощі в практичних використаннях, в яких необхідно використовувати різні громіздкі числові методи для його наближеного розв’язку [7].

Одним із таких методів є метод квадратур. В цьому методі інтеграл рівняння замінюється квадратурною формулою Лапласа [8]:

$$\int_0^{\infty} K(xkT, T) u(xkT) dx \approx \sum_{j=0}^N A_j K(X_j kT, T) u(X_j kT),$$

$$u(X_j kT) = u_j.$$

В цій формулі A_j – вагові множники, X_j – вузли квадратурної формули Лапласа для N членного наближення. Тоді рівняння електропровідності Фредгольма замінюється системою лінійних алгебричних рівнянь (СЛАР)

$$\sum_{j=0}^N A_j K(X_j kT_i, T_i) u_j \approx \frac{\sigma(T_i)}{e}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N$$

Для зручності записів СЛАР уведемо таке скорочене позначення для її коефіцієнтів:

$$M_{j,i} = \frac{A_j \cdot G(X_j \cdot kT_i)}{\left(2 \cdot \cosh\left(\frac{X_j}{2} - \frac{\mu_i}{2}\right)\right)^2}$$

Тоді маємо:

$$M_{0,0} \cdot u_0 + M_{1,0} \cdot u_1 + \dots + M_{N,0} \cdot u_N = \frac{\sigma(T_0)}{e}$$

.....

$$M_{0,N} \cdot u_0 + M_{1,N} \cdot u_1 + \dots + M_{N,N} \cdot u_N = \frac{\sigma(T_N)}{e}$$

Розв’язком цієї СЛАР є N – компонентний вектор u записаний у вигляді одно стовпчикової N – компонентної матриці. Цей розв’язок описується такою загальною формулою:

$$u = M^{-1} \left(\frac{\vec{\sigma}}{e} \right)$$

В цій формулі M^{-1} обернена матриця до матриці M , яка складена із коефіцієнтів СЛАР $M_{j,i}$, а

множина значень електропровідностей $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ від значень температури $T_0, T_1, T_2, \dots, T_N$ записана у вигляді N – компонентного вектора $\vec{\sigma}$.

В кристалах з вузькими забороненими зонами енергії E_G , як правило, закони дисперсії електронів і дірок описуються непараболічною зоною Кейна. Тому в таких кристалах величина $G(XkT)$ має таке значення:

$$G(X_j \cdot kT_i) = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi m m^* kT_i}{h^2} \right)^{3/2} \left(X_j \left(1 + \frac{kT_i}{E_g} X_j \right) \right)^{3/2}$$

де m – маса вільного електрона, а m^* – відносна ефективна маса електрона або дірки в кристалі, h – постійна Планка.

В зв’язку з цим загальний розв’язок СЛАР для таких кристалів описується такою формулою:

$$u = M^{-1} \cdot \vec{S}$$

У цій формулі множина експериментальних величин

$$S_i = \frac{\sigma(T_i)}{\frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi m m^* kT_i}{h^2} \right)^{3/2}}$$

від значень температури T_0, T_1, T, \dots, T_N записана у векторній формі у вигляді одностовпчикової матриці S , а компоненти матриці M мають таке значення:

$$M_{j,i} = \frac{A_j \cdot \left(X_j \cdot \left(1 + \frac{kT_i}{E_g} X_j \right) \right)^{3/2}}{\left(2 \cdot \cosh\left(\frac{X_j}{2} - \frac{\mu_i}{2} \right) \right)^2}.$$

Приведений аналіз показує що, інтегральне рівняння електропровідності (ІРЕ), яке в математичних аналізах називають інтегральним рівнянням Фредгольма першого роду (ІРФ) може бути розв’язане за допомогою СЛАР наближено, але при цьому повинні бути відомі електропровідність кристала $\sigma(T)$, приведений хімічний потенціал носіїв струму в кристалі μ^* , та їх відносна ефективна маса m^* . Крім того, в даному аналізі передбачалось, що функція розсіювання $u(xkT)$ залежить лише від енергії носіїв зарядів і не залежить від температури, а таке припущення не узгоджується із законами кінетичної теорії кристалів.

Розглянемо тепер властивості (1-7) для ізотропних кристалів із заком дисперсії для носіїв зарядів

$$\varepsilon_p = \varepsilon(p), \quad \text{де } p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$$

– модуль квазіімпульса носія заряду, який допускає таке представлення:

$$p = p(\varepsilon) \quad (10a)$$

В цьому випадку відомо, що

$$G(\varepsilon) = \frac{8\pi}{3h^3} p^3(\varepsilon), \quad (11)$$

а квантово-механічні розрахунки засвідчують, що для важливих механізмів розсіювання функція розсіювання $u(\varepsilon)$ описується такою формулою [9,10]:

$$u(\varepsilon) = U^{(r)}(T) p^{(2r-3)} \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right)^2 \quad (12)$$

В цій формулі $U^{(r)}(T)$ – відома для конкретного механізму розсіювання температурна функція, а r називається показником розсіювання і має такі значення:

$r = 0$ для розсіювання носіїв зарядів на акустичних фонах і на точкових дефектах кристалічної ґратки;

$r = 1$ для розсіювання на оптичних фонах при температурі кристала вищій від температури Дебая θ ;

$r = 2$ для розсіювання на іонах домішкових атомів кристалічної ґратки.

Для складного змішаного розсіювання, коли одночасно існують механізми розсіювання з різними показниками розсіювання r_1, r_2, \dots, r_n загальна функція розсіювання визначається такою загальною формулою:

$$\frac{1}{u} = \frac{1}{u(r_1)} + \frac{1}{u(r_2)} + \dots + \frac{1}{u(r_n)} \quad (13)$$

Застосуємо тепер алгоритмічні формули (1-7) для розрахунків кінетичних властивостей ізотропних кристалів з вузькими забороненими зонами енергії E_G .

В таких кристалах, як правило, закони дисперсії електронів і дірок описуються непараболічною зоною Кейна

$$\frac{p^2}{2mm^*} = \varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{E_G},$$

тобто

$$p = \sqrt{2mm^* \varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{E_G} \right)} \quad (14)$$

де m – маса вільного електрона, а m^* – відносна ефективна маса електрона або дірки в кристалі.

Для закону дисперсії (14) і актуальних механізмів розсіювання, які визначаються показником розсіювання r , функціонал (8), враховуючи формули (11) і (12), має таке значення:

$$J(i, j, \mu^*, T) = U^{(r)}(T)^j N_C(T) I(i, j, \mu^*, T) \quad (15)$$

де використані такі позначення:

$$N_C(T) = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi m m^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (15a)$$

$U^{(r)}(T)$ – розмірна функція температури з розмірністю рухливості, вона описується такою формулою:

$$U^{(r)}(T) = \left[\frac{1}{T} (U_A \delta(0, r) + U_O \delta(1, r) + U_I \delta(2, r)) \right] \times (\mu^*)^{(r-5/2)} T^{(r-1/2)} \quad (15b)$$

де U_A, U_O, U_I – розмірні константи кристала, які залежать від природи кристала та від природи механізмів розсіювання носіїв струму на дефектах кристалічної ґратки, а $\delta(m, n)$ – це відома функція Кронеккера, вона має такі значення: $\delta(m, n) = 1$, якщо $m = n$, $\delta(m, n) = 0$, якщо $m \neq n$;

безрозмірний функціонал $I(i, j, \mu^*, T)$ має таке значення:

$$I(i, j, \mu^*, T) = \int_0^\infty x^i \frac{(x + \beta(T)x^2)^{(rj-j/2+3/2)}}{(1 + 2\beta(T)x)^{2j}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) dx \quad (15b)$$

В цій формулі $\beta(T) = \frac{kT}{E_G}$ – параметр непараболічності спектру, який в кристалах з широкою забороненою зоною E_G може мати значення дуже близьке до нуля, і тоді непараболічна зона Кейна (14) перетворюється в параболічну зону енергії, а всі розрахунки в цьому випадку будуть відноситись до кристалів з параболічним законом дисперсії.

Підставимо тепер значення функціонала (15) у формули (1)-(7) для відповідних кінетичних коефіцієнтів, тоді маємо:

$$n(\mu^*, T) = N_C(T) I(0, 0, \mu^*, T) \quad (16)$$

$$\sigma(\mu^*, T) = en(\mu^*, T) U^{(r)}(T) \frac{I(0, 1, \mu^*, T)}{I(0, 0, \mu^*, T)} \quad (17)$$

$$R(\mu^*, T) = \frac{1}{zen(\mu^*, T)} \times \frac{I(0, 0, \mu^*, T) I(0, 2, \mu^*, T)}{I(0, 1, \mu^*, T)^2} \quad (18)$$

$$\alpha(\mu^*, T) = \left(\frac{k}{ze} \right) \left(\frac{I(1, 1, \mu^*, T)}{I(0, 1, \mu^*, T)} - \mu^* \right) \quad (19)$$

$$N(\mu^*, T) = \left(\frac{k}{e} \right) U_H(\mu^*, T) \times \left[\frac{I(1, 1, \mu^*, T)}{I(0, 1, \mu^*, T)} - \frac{I(1, 2, \mu^*, T)}{I(0, 2, \mu^*, T)} \right] \quad (20)$$

$$U_D(\mu^*, T) = U^{(r)}(T) \frac{I(0, 1, \mu^*, T)}{I(0, 0, \mu^*, T)} \quad (21)$$

$$U_H(\mu^*, T) = |\sigma R| = U^{(r)}(T) \frac{I(0, 2, \mu^*, T)}{I(0, 1, \mu^*, T)} = U_D(\mu^*, T) \frac{I(0, 0, \mu^*, T) I(0, 2, \mu^*, T)}{I(0, 1, \mu^*, T)^2} \quad (22)$$

За формулами (16–22) кінетичних властивостей кристалів замічаємо, що для їх теоретичних розрахунків необхідно знати: показник розсіювання r , тобто знати механізм розсіювання носіїв зарядів в кристалі, приведений хімічний потенціал μ^* та їх відносну ефективну масу m^* . При наявності таких даних за цими формулами можна зробити їх теоретичні розрахунки і зіставити з експериментальними даними, які в дослідницьких лабораторіях описуються множинами залежностей властивостей кристала (16–22) від значень температури кристала $T_1, T_2, T_3, \dots, T_i$. Такі множини в

комп'ютерному пакеті MathCAD записуються у векторній формі у вигляді прямокутних матриць.

Так, наприклад, множина експериментальних залежностей властивостей кристала, які описуються формулами (17–19, 22), зручно описувати такою прямокутною матрицею:

$$\begin{aligned}
 & i := 0..n \\
 & T_i := T_0 + \Delta T \cdot i \\
 & Me := \begin{pmatrix} T_0 & \sigma e_0 & Re_0 & UHe_0 & \alpha e_0 \\ T_1 & \sigma e_1 & Re_1 & UHe_1 & \alpha e_1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ T_n & \sigma e_n & Re_n & UHe_n & \alpha e_n \end{pmatrix} \\
 & T := Me^{(0)} \quad \sigma e := Me^{(1)} \quad Re := Me^{(2)} \quad UHe := Me^{(3)} \quad \alpha e := Me^{(4)}
 \end{aligned}$$

T_0 – початкове значення температури кристала,

ΔT – постійний крок зміни температури

від початкового значення T_0 .

В цій формулі буква „e” означає експериментальне значення відповідної кінетичної властивості кристала при певній температурі, яка визначається її нижнім індексом.

Висновки

Для визначення механізмів розсіювання носіїв зарядів в кристалах, як правило, в дослідницьких лабораторіях використовують множину залежностей рухливості Холла від різних значень температури.

Регресивний аналіз цієї множини показує, що для кристалів в домішковій області провідності вона описується такою формулою регресії:

$$U_H r \cong \exp(a) T^b \quad (23)$$

де a і b – це коефіцієнти регресії, які залежать від природи кристала та від механізмів розсіювання.

Якщо коефіцієнт $b < 0$, то це згідно з висновками кінетичної теорії властивостей кристалів (див. формули (15), (15а), (15б), (15в) та (22)), засвідчує велику імовірність розсіювання носіїв струму на теплових коливаннях кристалічної ґратки кристалів. Таке коливання може бути складним: з показником розсіювання $r = 0$, для розсіювання на акустичних фонах кристалічної ґратки, і показником $r = 1$, для розсіювання на оптичних фонах ґратки.

Якщо коефіцієнт $b > 0$, то ці самі формули засвідчують імовірність розсіювання носіїв струму на іонізованих домішках кристалічної ґратки, а таке розсіювання характеризується показником розсіювання $r = 2$.

Отже, за допомогою множини значень залежності холлівської рухливості від різних значень температури кристала можна з досить великою точністю визначити показник розсіювання r , тобто функцію розсіювання $u(\mathcal{E})$.

Для визначеного таким способом показника розсіювання r аналітичне значення залежності коефіцієнта Зеебека від μ^* описується формулою (19). В зв'язку з цим одержуємо тепер для визначення множини зна-

чень $\mu_i^* = \mu^*(T_i)$ нелінійну трансцендентну систему рівнянь

$$f(\mu_i^*, T_i, \alpha e_i) = \alpha(\mu_i^*, T_i) - \alpha e_i = 0 \quad (24)$$

в цій формулі αe_i – експериментальні значення коефіцієнта Зеебека.

Ця система рівнянь в комп'ютерному пакеті MathCAD легко розв'язується за допомогою вписаної в пакет root- функції чотирьох аргументів

$$\begin{aligned}
 \mu^*(T, \alpha e) &= \text{root}(f(\mu^*, T, \alpha e), \mu^*, \mu_a^*, \mu_b^*), \\
 \mu_i^* &:= \mu^*(T_i, \alpha e_i)
 \end{aligned} \quad (25)$$

В цій формулі $\mu_a^* \div \mu_b^*$ – це можливий інтервал значень приведенного хімічного потенціала в якому знаходиться корінь рівняння (24).

Визначивши в досліджуваному інтервалі температури множину значень приведенного хімічного потенціала $\mu_i^* = \mu^*(T_i)$, за формулою (25), і маючи множину експериментальних значень коефіцієнта Холла Re_i , тоді відносну ефективну масу носіїв зарядів можна розрахувати за таким відношенням:

$$m_i^* = \left(\frac{h^2}{2\pi m k T_i} \right) \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{1}{e Re_i} \frac{I(0,2, \mu_i^*, T_i)}{I(0,1, \mu_i^*, T_i)^2} \right)^{2/3} \quad (26)$$

Визначена за холлівською рухливістю функція розсіювання $u(\mathcal{E})$, яка визначається за допомогою показника розсіювання r , дає можливість за алгоритмами (24)-(26) розрахувати приведенний хімічний потенціал μ_i^* та відносну ефективну масу носіїв зарядів m_i^* , яка може залежати від температури. При наявності цих величин можна за допомогою функціонала (15) розрахувати кінетичні властивості кристалів (16)-(22). Такі розрахунки зручно виконувати в комп'ютерному пакеті MathCAD, в якому множину теоретичних розрахунків вигідно описати такою прямокутною матрицею:

$$\begin{aligned}
 & T := Mt^{(0)} \quad \sigma t := Mt^{(1)} \quad Rt := Mt^{(2)} \quad UHt := Me^{(3)} \quad \alpha t := Mt^{(4)} \\
 & Mt := \begin{pmatrix} T_0 & \sigma t_0 & Rt_0 & UHt_0 & \alpha t_0 \\ T_1 & \sigma t_1 & Rt_1 & UHt_1 & \alpha t_1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ T_n & \sigma t_n & Rt_n & UHt_n & \alpha t_n \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

У цій матриці буква „t” означає, що фізична кінетична характеристика кристала розрахована за формулами (16–22).

Дані матриці Mt можна зіставляти з упорядкованими файлами множин експериментальних даних, які описуються матрицею Me . В комп'ютерному пакеті MathCAD збіжність розрахованих і експериментальних значень різних кінетичних властивостей кристала зручно оцінювати за допомогою вписаного в пакет коефіцієнта кореляції Пірсона $\text{corr}(K_e, K_i) \leq 1$. В цьому кореляторі K_e – вектор експериментальних значень кінетичної властивості K , а

K_i – вектор теоретичних значень цієї властивості, які розраховувались за формулами (16-22).

При добрій кореляції експериментальних і розрахованих значень, тобто при добрій збіжності цих значень, коефіцієнт кореляції Пірсона дуже близький до одиниці, а при слабкій збіжності цей коефіцієнт досить помітно менший від одиниці.

З допомогою матриць Me і Mt можна розрахувати такі коефіцієнти кореляції Пірсона:

$$\text{corr}(\sigma_e, \sigma_t) = \leq 1, \text{corr}(Re, Rt) \leq 1, \\ \text{corr}(UHe, UHt) \leq 1, \text{corr}(ae, at) \leq 1.$$

Значення цих коефіцієнтів при добрій збіжності експериментальних і теоретичних даних дуже близьке до одиниці, а при слабкій збіжності їхні значення буде завжди помітно меншим від одиниці.

Збіжність розрахованих і експериментальних значень різних кінетичних властивостей кристала також можна оцінювати за допомогою відносних відхилень для різних експериментальних і теоретичних множин, які описуються матрицею ΔM . Ця матриця має таку структуру як матриці Me і Mt . Але елементами цієї матриці є такі відносні величини відхилень:

$$\frac{|Ke_i - Kt_i|}{Ke_i} = \frac{\Delta Ki}{Ke_i}$$

В цій формулі Ke_i, Kt_i – це експериментальні та теоретичні значення відповідних кінетичних коефіцієнтів, які визначають відповідні елементи матриць Me та Mt . Отже формула визначає відносне значення відхилення коефіцієнта Ke_i від свого теоретичного Kt_i , розрахованого за формулами (16–22).

Середні значення відносних відхилень експериментальних значень відповідних величин від теоретично розрахованих в пакеті MathCAD описуються такими операторами усереднення:

$$\text{mean}\left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma_e}\right) = a \cdot (100\%), \text{mean}\left(\frac{\Delta R}{Re}\right) = b \cdot (100\%), \\ \text{mean}\left(\frac{\Delta UH}{UHe}\right) = c \cdot (100\%), \text{mean}\left(\frac{\Delta\alpha}{ae}\right) = d \cdot (100\%),$$

Числові значення цих операторів безпосередньо характеризують характер збіжності між експериментальними та теоретично розрахованими даними. При добрій збіжності цих даних оператори усереднення a, b, c, d мають малі числові значення порядку ($10^{-1} \div 10^{-2}$).

Підсумки

Отже, в підсумку маємо, що механізм розсіювання носіїв зарядів на дефектах кристалічної ґратки, їх приведений хімічний потенціал μ та їх відносна ефективна маса m дають можливість розрахувати кінетичні властивості кристала, які описуються формулами (16)- (22) і матрицею Mt , а після цього зіставити їх з експериментальними даними, які описуються матрицею Me . Таке зіставлення дає можливість

робити висновки про природу досліджуваних кінетичних властивостей кристала.

Описані методи вимірювань і розрахунків детально описані в роботах [10-13] для селенистого свинцю з ізотропним законом дисперсії для носіїв зарядів, який описується формулою (14).

Такі дослідження показали, що носії струму в селенистому свинці розсіюються на акустичних фонах; в досліджуваному інтервалі температури носії струму перебувають у виродженому, або слабковиродженому стані; відносна ефективна маса носіїв струму лінійно зростає з підвищенням температури.

[1]. Буджак Я.С. Исследование явлений переноса в полупроводниках со сложным зонным спектром. Автореферат докторской диссертации физико-математических наук. Ленинград . 1985.

[2]. Я.С. Буджак. Термодинамические методы в исследовании кинетических свойств полупроводников.// Термодинамика и материаловедение полупроводников. Четвертая всесоюзная конференция. (Тезисы докладов). Часть 1. С. 56-57, июнь 1989 г. Москва 1989 г.

[3]. Я.С. Буджак, Е.Н. Каретникова. Исследование кинетических свойств полупроводников с элементами программирования на алгоритмическом языке «Бейсик». Киев УМК ВО 1988

[4]. Я.С. Буджак. Элементы теории кинетических свойств кристаллов. Львів.Львівська політехніка 1996. 66.С.

[5]. Б.М. Аскеров. Кинетические эффекты в полупроводниках. Изд. «Наука» Лнеинград 1970. 303. С.

[6]. Г. Пелиа, Г. Сеге. Задачи и теоремы из анализа. Ч.1. Изд. «Наука». Главная редакция физико-математической литературы. Москва. 1978.391.С. (стр.77.п.77)

[7]. А.Б. Васильева, Н.А. Тихонов. «Интегральные уравнения». Издательство Московского университета. 1989. С.158.

[8]. В.И. Крылов. «Приближенное вычисление интегралов». Государственное издательство физико-математической литературы. Москва 1959. С. 328.

[9]. Б.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. Москва «Наука» Главная редакция физико-математической литературы 1985. 318.С.

[10]. Я.С. Буджак, М.М. Ваків. Элементы статистической теории тепловых и кинетических свойств кристаллов. Львів. Ліга-Прес 2010. С.180.

[11]. Я.С. Буджак, О.В. Зуб. До питання про транспорт носіїв струму в кристалах селенистого свинцю.// Вісник Національного університету «Львівська політехніка», Електроніка, №681,2010, С.173–177.

[12]. Я.С. Буджак, О.В. Зуб. Кінетичні властивості селенистого свинцю та їх аналіз в кмп'ютерному середовищі MathCAD. // Східно-Європейський журнал передових технологій 3 / 7 (45) 2010 . С. 4–7.

[13]. Я.С. Буджак, О.В. Зуб. Властивості PbSe зумовлені електронним транспортом та їх аналіз в середовищі MathCAD// VII міжнародна школа-конференція «Актуальні проблеми фізики напівпровідників». Тези доповідей. Прикарпаття, Дрогобич, Україна 28 вересня – 1 жовтня 2010 року. С. 91 – 92.

[14]. Я.С. Буджак, О.В. Зуб. До питання про домішкові атоми та деякі технологічні комплекси в селенистому свинці.// VII міжнародна школа-конференція «Актуальні проблеми фізики напівпровідників». Тези доповідей. Прикарпаття, Дрогобич, Україна 28 вересня – 1 жовтня 2010 року. С. 93–94