

На правах рукописи

СЕРГЕЕВ Григорий Сергеевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ И
ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
АНТИМОНИДА ИНДИЯ**

01.04.02 – Теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва – 2014

Работа выполнена в Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт».

Научный руководитель: Кандидат физико-математических наук, доцент,
Орлов Валерий Георгиевич

Официальные оппоненты: *Зайцев Рогдай Олегович*,
доктор физико-математических наук,
профессор, Московский физико-технический
институт (государственный университет),
кафедра теоретической физики

Успенский Юрий Алексеевич,
доктор физико-математических наук, главный
научный сотрудник, Физический институт им.
П.Н. Лебедева РАН, отделение теоретической
физики

Ведущая организация: *Национальный исследовательский ядерный
университет «МИФИ»*

Защита состоится 17 сентября 2014 г. в 15 ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 520.009.03 на базе НИЦ «Курчатовский институт» по адресу: 123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ «Курчатовский институт» и на сайте www.nrcki.ru.

Автореферат разослан «___» июля 2014 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук



Барабанов А. Л.

Общая характеристика работы

Актуальность. Узкозонные полупроводники – важный класс полупроводниковых материалов, в который входят такие соединения как HgCdTe, PbTe, InAs, InSb, Bi₂Te₃ [1], используемые в качестве рабочего вещества в детекторах инфракрасного излучения и термоэлектрических преобразователях энергии [1; 2]. Одним из типичных представителей данного класса соединений является антимонид индия – узкозонный полупроводник типа A^{III}B^V, обладающий уникальными характеристиками, которые обусловили его широкое применение в различных прикладных областях: оптические свойства InSb используются при изготовлении инфракрасных датчиков высокой чувствительности [3], а рекордные значения электронной подвижности позволяют применять InSb в детекторах магнитного поля (датчиках Холла) [4].

В последние годы InSb рассматривают как материал, перспективный для нанoeлектроники (см., например, [5; 6]). Активно исследуются магнетотранспортные эффекты в p-InSb, допированном Mn [7]. В 2006 году компании US microchip и Intel объявили о создании прототипа транзистора на основе InSb, обладающего рекордной производительностью и энергоэффективностью при азотных температурах [8].

Вследствие активного использования InSb и расширения областей его потенциального применения особый интерес представляет детальное теоретическое исследование транспортных свойств InSb путем расчета температурных и концентрационных зависимостей кинетических коэффициентов. Традиционный подход к изучению транспортных свойств полупроводников основан на использовании кинетического уравнения Больцмана. Аналитическое решение уравнения Больцмана чаще всего находят в приближении времени релаксации или используя вариационный метод. Указанные подходы имеют ряд известных ограничений. Так, приближение времени релаксации [9; 10], позволяет рассматривать задачу только для случаев, в которых анизотропией энергетического спектра и неупругостью рассеяния носителей зарядов можно пренебречь. Вариационный метод [11; 12] лишен вышеуказанных недостатков, однако, результат вычислений вариационным методом зависит от выбора пробной функции.

Альтернативой аналитическому рассмотрению являются численные методы решения уравнения Больцмана, которые лишены указанных выше недостатков. В связи с увеличением вычислительных мощностей численные методы решения кинетического уравнения в последнее время приобрели

особую актуальность. 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.

Детальная информация о температурной и концентрационной зависимостях кинетических коэффициентов позволяет оценить эффективность использования соединения в качестве термоэлектрического материала. Несмотря на то, что антимонид индия не обладает рекордными значениями термоэлектрической добротности ZT [13], численные данные о вкладах различных механизмов рассеяния в кинетические коэффициенты позволяют выявить те факторы, которые наиболее сильно влияют на величину ZT . Актуальность такого анализа обусловлена сохраняющейся потребностью в эффективных термоэлектрических материалах и отсутствием четко обозначенных направлений поиска новых материалов с высокими значениями ZT .

Цели диссертационной работы:

- Разработка теоретической модели, которая на основе численного решения уравнения Больцмана позволяет проводить детальное рассмотрение транспортных свойств антимонида индия n- и p-типа путем расчёта температурных и концентрационных зависимостей кинетических коэффициентов, а также исследование влияния различных механизмов рассеяния на транспортные свойства.
- Поиск на примере InSb физических свойств полупроводниковых соединений, определяющих эффективность использования вещества в качестве термоэлектрического преобразователя энергии.

Для достижения указанных целей были **поставлены следующие задачи:**

- Разработать теоретическую схему расчета кинетических коэффициентов полупроводников на примере антимонида индия и комплекс программ численного решения линеаризованного уравнения Больцмана для носителей заряда в присутствии электрического и магнитного полей, а также градиента температуры без применения упрощений, используемых в τ -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.

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 κ_e в теплопроводность InSb. Надежность найденных значений κ_e 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.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

- Разработана теоретическая схема для моделирования транспортных свойств антимонида индия, основанная на численном решении кинетического уравнения Больцмана итерационным 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.
- 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 [14], смена знака термоэдс образцов *p*-InSb [15].
- Предложен метод анализа влияния вкладов от различных механизмов рассеяния носителей заряда на эффективность термоэлектрического преобразования энергии. Метод основан на последовательном исключении каждого из механизмов рассеяния при расчете

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.

Апробация работы. 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.
5. Конференция по достижениям в физике конденсированного состояния (Conference on Frontiers of Condensed Matter Physics), г. Триест, Италия, 2013 г.
6. Семинар отделения теоретической физики Института общей и ядерной физики (ИОЯФ) Центра фундаментальных исследований НИЦ «Курчатовский институт», апрель 2014 г.

Публикации. Основные результаты, полученные в диссертации, опубликованы в 2 статьях 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 наименований.

Краткое содержание работы

Во введении дан краткий обзор физических свойств антимонида индия, обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели, указаны научная новизна и практическая значимость полученных результатов, излагается краткое содержание работы.

В первой главе приведен обзор существующих численных методов решения кинетического уравнения Больцмана для носителей заряда в полупроводниках. Рассмотрены детерминистические подходы к решению уравнения Больцмана, различные итерационные методы и метод Монте-Карло. На основе анализа преимуществ и недостатков обсуждаемых подходов для реализации в диссертации был выбран итерационный метод [16], позволяющий учитывать как особенности электронной структуры вещества, так и различные механизмы неупругого рассеяния электронов и дырок в полупроводниках. В рамках метода рассматривались три варианта линеаризованного кинетического уравнения, соответствующие различным постановкам эксперимента, которые позволяют найти основные кинетические коэффициенты и оценить термоэлектрическую эффективность полупроводника [9; 10]:

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

Первый параграф главы посвящен описанию использованного в диссертации метода расчета транспортных свойств антимонида индия для первого и второго из рассмотренных случаев. В предположении малости электрического поля E и градиента температуры ∇T поправка δf к равновесной фермиевской функции распределения f_0 электронов искалась пропорциональной левой части уравнения Больцмана [9; 10]:

$$\delta f = \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos \theta \left(\phi_1(k)(eE - \nabla \eta) + \phi_2(k)(\varepsilon - \eta) \frac{\nabla T}{T} \right) \quad (1.1)$$

где ε – энергия электрона, η – химический потенциал, k – волновой вектор носителя, а $\phi_1(k)$ и $\phi_2(k)$ – неизвестные функции, которые находятся численно из линеаризованного кинетического уравнения.

Для дырок использовались обозначения [9; 10]:

$$\eta_h = -\varepsilon_g - \eta, \quad \varepsilon_h = -\varepsilon_g - \varepsilon, \quad (1.2)$$

с помощью которых равновесная функция распределения дырок принимает стандартный вид распределения Ферми [9], а поправка к равновесной функции распределения имеет вид аналогичный электронной (1.1). В формуле (1.2) величина ε_g – ширина запрещенной зоны.

Используя выражение (1.1) и явный вид левой части кинетического уравнения, для электронов и дырок были получены интегральные уравнения, определяющие функции $\phi_1(k)$ и $\phi_2(k)$:

$$\phi_1^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\sum_j \int \phi_1^{(j)}(\mathbf{k}') \frac{\partial f_0^{(j)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos(\theta') F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos \theta}{\frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta) \sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}'} \quad (1.3)$$

$$\phi_2^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\sum_j \int \phi_2^{(j)}(\mathbf{k}') \frac{\partial f_0^{(j)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos(\theta') [\varepsilon'^{(j)} - \eta] F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta) [\varepsilon^{(i)} - \eta] \sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}'} - \frac{1}{\sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}'} \quad (1.4)$$

В уравнениях (1.3) и (1.4) индекс $i = 1, 2, 3$ подразумевает три сорта носителей (электроны, «легкие» и «тяжелые» дырки, подробнее электронная структура InSb обсуждается во второй главе). Введенная для сокращения записи формул функция $F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon)$, определяется через вероятности перехода $W_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$:

$$F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) = W_{ji}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - f_0^{(i)}(\varepsilon)) + f_0^{(i)}(\varepsilon) W_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (1.5)$$

Для решения уравнений (1.3) и (1.4) использовался метод последовательных подстановок Лиувилля–Неймана [17]. Выполненная проверка показала, что решение данных уравнений указанным методом не зависит от выбора начального приближения. Поэтому в качестве нулевого приближения брались функции тождественно равные нулю.

InSb имеет кубическую кристаллическую решетку [18], вследствие чего при отсутствии магнитного поля кинетические коэффициенты – проводимость, теплопроводность и термоэдс являются скалярами. Проводимость σ с помощью формулы:

$$\sigma = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \sum_i \int v^2 \phi_1^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^2 \theta d\mathbf{k} \quad (1.6)$$

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

$$\nabla\eta = -\nabla\eta_h = \gamma\nabla T/T \quad (1.7)$$

В выражении (1.7) введено обозначение:

$$\gamma = \frac{\sum_i e_i \int \phi_2^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \cos^2 \theta (\varepsilon - \eta) d\mathbf{k}}{\sum_i (\pm) e_i \int \phi_1^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \cos^2 \theta \cdot d\mathbf{k}} \quad (1.8)$$

В (1.8) и далее верхний знак в знаменателе относится к электронам, нижний к дыркам. С учетом (1.7) и (1.8), κ_e определяется следующим образом:

$$\kappa_e = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{T} \sum_i \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^2 \theta \cdot v^2 (\varepsilon - \eta) \left[\phi_2^{(i)}(k) (\varepsilon - \eta) \mp \gamma \phi_1^{(i)}(k) \right] d\mathbf{k} \quad (1.9)$$

При вычислении коэффициента термоэдс s использовался обобщенный закон электропроводности [19] (при отсутствии внешнего электрического поля):

$$\mathbf{J} = \frac{\sigma}{e} \nabla\eta + \sigma s \nabla T. \quad (1.10)$$

Согласно (1.10), слагаемое пропорциональное ∇T – плотность термоэлектрического тока [19]. Исходя из выражения для отклонения функции распределения от равновесной (1.1) и формулы (1.10), для s было получено:

$$s = \frac{1}{\sigma T} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_i e_i \int v^2 (\varepsilon - \eta) \phi_2^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^2 \theta \cdot d\mathbf{k} \quad (1.11)$$

Во втором параграфе развит метод, позволяющий находить решение кинетического уравнения в присутствии магнитного поля. Отклонение функции распределения от равновесной характеризуется неизвестной трехмерной функцией $\chi^{(i)}(\mathbf{k})$ [12; 20]:

$$\delta f^{(i)} = f^{(i)} - f_0^{(i)} = \chi^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \mathbf{E} \quad (1.12)$$

В выражении (1.12) и далее для определенности магнитное поле направлено по оси z . Согласно [20], вместо функции $\chi^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B})$ были введены функции $P_1^{(i)}, P_2^{(i)}, P_3^{(i)}$:

$$\chi^{(i)}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \chi_1^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \\ \chi_2^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \\ \chi_3^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \end{pmatrix} = \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \begin{pmatrix} P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \theta \cos \varphi - P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \theta \sin \varphi \\ P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \theta \sin \varphi + P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \theta \cos \varphi \\ P_3^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \theta \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

Приведенное выше переобозначение существенно упрощает решение кинетического уравнения: вместо неизвестной трехмерной вектор-функции $\chi^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B})$ рассматриваются три одномерные скалярные функции $P_j^{(i)}$. После

ряда упрощений была получена система уравнений, определяющая неизвестные функции:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \left[\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) - P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' \right] = \\ & = - \sum_j \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_2^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}', \end{aligned} \quad (1.14)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \left[\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) + \frac{e}{\hbar} + P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' \right] = \\ & = \sum_j \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_1^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}', \end{aligned} \quad (1.15)$$

$$P_3^{(i)}(\mathbf{k}, B) = \frac{\sum_j \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_3^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v}{\frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \sum_j \int F_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}'}. \quad (1.16)$$

Для численного решения приведенных выше уравнений, аналогично случаю с $\mathbf{B} = 0$, использовался метод последовательных подстановок Лиувилля-Неймана [17].

Решение системы (1.14) – (1.16) позволяет вычислить кинетические коэффициенты в присутствии магнитного поля. В этом случае проводимость является тензором, компоненты которого определяются выражением [20]:

$$\sigma_{ij} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \sum_k \int v_i \cdot \chi_j^{(k)} d\mathbf{k} \quad (1.17)$$

Для каждой из компонент тензора σ_{ij} :

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \sum_k \int P_1^{(k)}(k) \frac{\partial f_0^{(k)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi dk \quad (1.18)$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \sum_k \int P_2^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi dk \quad (1.19)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \sum_k \int P_3^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \cos^2 \theta dk \quad (1.20)$$

Для вычисления постоянной Холла R_H , множителя Холла r_H и холловской подвижности μ_H , согласно [10; 20], справедливы соотношения:

$$R = \frac{\sigma_{xy}}{B(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2)} = \frac{r_H}{nec} \quad (1.21)$$

$$\mu_H = R\sigma_{zz} \quad (1.22)$$

$$r_H = \frac{\mu_H}{\mu} = necR \quad (1.23)$$

В третьем параграфе описан разработанный комплекс программ «CCTS Solver» (Charge Carriers Transport in Semiconductors Solver) [21], который на основе рассмотренных методов решения уравнения Больцмана позволяет моделировать кинетические явления 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 являются большие времена вычисления. Для решения данной проблемы было использовано распараллеливание программного кода, позволяющее запускать разработанную программу в многопроцессорном режиме, что позволяет существенным образом уменьшить время, необходимое для вычислений.

Проведенная проверка показала, что реализованный в «CCTS Solver» итерационный метод, является сходящимся. При расчете кинетических коэффициентов мы ограничились точностью 10^{-5} для поправки к равновесной функции распределения, что приводит к погрешности в вычислении кинетических коэффициентов менее 0.01%.

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

Вторая глава посвящена обсуждению физических параметров модели, используемых при расчете температурной и концентрационной зависимостей кинетических коэффициентов антимонида индия. Рассмотрены зонная структура InSb и механизмы рассеяния носителей заряда. Приводятся экспериментальные данные для констант, входящих в формулы матричных элементов рассеяния носителей, а также для параметров зонной структуры.

В первом параграфе главы подробно обсуждается зонная структура антимонида индия. Для ее описания было выбрано изотропное приближение модели Кейна [22]. Модель Кейна учитывает спин-орбитальное взаимодействие, играющее существенную роль в InSb. Кейн учел четыре вида свободных носителей заряда: электроны проводимости, «легкие» и «тяжелые» дырки, дырки «отщепленной» зоны [23]. При расчете кинетических коэффициентов с помощью «CCTS Solver» последний из перечисленных типов носителей в расчет включен не был ввиду малой заселенности соответствующей зоны [9].

Второй параграф второй главы посвящен используемым механизмам рассеяния носителей заряда, корректное описание которых крайне важно при моделировании электронного транспорта [9; 10]. Антимонид индия относится к классу узкозонных полупроводников, в которых непараболичность законов дисперсии 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 [22], использовались волновые функции с блоховскими множителями, полученные в модели Кейна. 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 [9]: 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 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 $T < 5$ К, которые в настоящей работе не рассматривались.

В третьей главе приводятся результаты расчетов температурных и концентрационных зависимостей подвижности μ , проводимости σ , коэффициента Холла R , термоэдс s и электронного вклада κ_e в теплопроводность κ для InSb n- и p-типа. В основу расчетов была положена физическая модель, которая обсуждалась выше. Вычисления проводились на Многоцелевом вычислительном комплексе НИЦ «Курчатовский институт» [24] с помощью разработанного программного комплекса CCTS Solver.

В первом параграфе уточняется выбор физической модели, описывающей механизмы рассеяния электронов и дырок. Ранее, во второй главе рассматривались несколько подходов для описания рассеяния носителей заряда на атомах ионизованных примесей: модели Брукса-Херринга [25] и Конуэлла-Вайскопфа [26], основанные на борновском приближении, и метод фазовых сдвигов [27]. В большинстве работ по расчету кинетических коэффициентов полупроводников примесное

рассеяние учитывается в борновском приближении. В ряде случаев такой подход неприменим. Для определения областей температур и концентраций примесных атомов, в которых более простые с вычислительной точки зрения модели, основанные на борновском приближении, обеспечивают ту же точность, что и метод фазовых сдвигов в параграфе было проведено их сравнение на примере вычисления подвижности.

С учетом проведенного анализа рассеяние на ионизованных атомах 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 р-типа также использовался метод фазовых сдвигов, а для образцов n-типа использовалась модель Брукса-Херринга.

Во втором параграфе приведены результаты расчетов подвижности электронов и дырок в широкой области температур и концентраций. Проведен анализ влияния вкладов различных механизмов рассеяния на величину подвижности электронов и дырок и выявлены доминирующие механизмы (см. рис. 1).

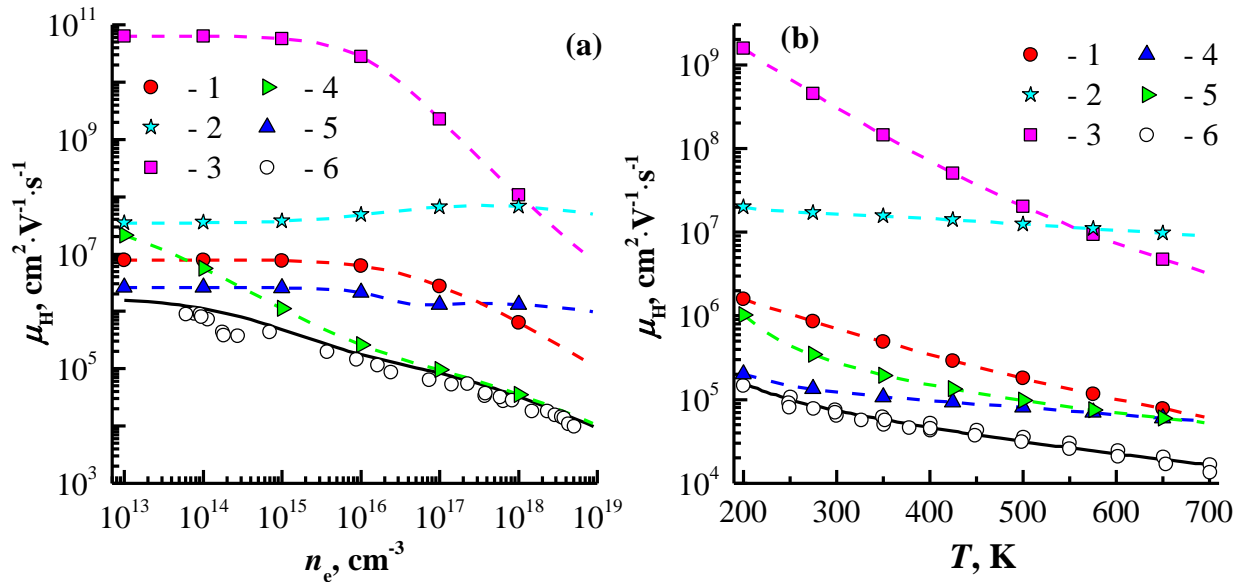


Рис. 1. Температурная (a) и концентрационная (b) зависимости холловской подвижности электронов μ_H образцов n-InSb. (a) – зависимость μ_H от концентрации носителей заряда n_e при $T = 77$ К, (b) – зависимость μ_H от температуры. Сплошная линия на рис. 1 (a) и (b) – расчет с учетом вкладов всех механизмов 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 [28; 29; 30; 31; 32; 33].

При низких температурах в образцах n- и p-типа подвижность определяется рассеянием на примесных атомах. В области высоких температур в n-InSb подвижность обусловлена рассеянием на полярных оптических фононах и в меньшей степени рассеянием электронов на «тяжелых» дырках и акустических фононах (см. рис. 1 (b)). Вклад в подвижность от рассеяния на пьезоакустическом и деформационном оптическом потенциалах в n-InSb пренебрежимо мал. В p-InSb основным механизмом является рассеяние на акустическом деформационном потенциале, также следует учитывать рассеяние на полярном и деформационном оптических потенциалах.

Полученные в диссертации результаты расчетов подвижности электронов и дырок образцов n- и p-InSb хорошо согласуются с экспериментальными данными во всем рассматриваемом диапазоне температур и концентраций примесей (см. рис. 1 (a) и (b)).

Третий параграф посвящен обсуждению результатов расчетов проводимости σ и коэффициента Холла R InSb n- и p-типа. Выявлена причина появления минимума на температурной кривой проводимости образцов n-InSb. Ранее подобное низкотемпературное поведение было численно получено в [34], но природа указанной особенности авторами не обсуждалась.

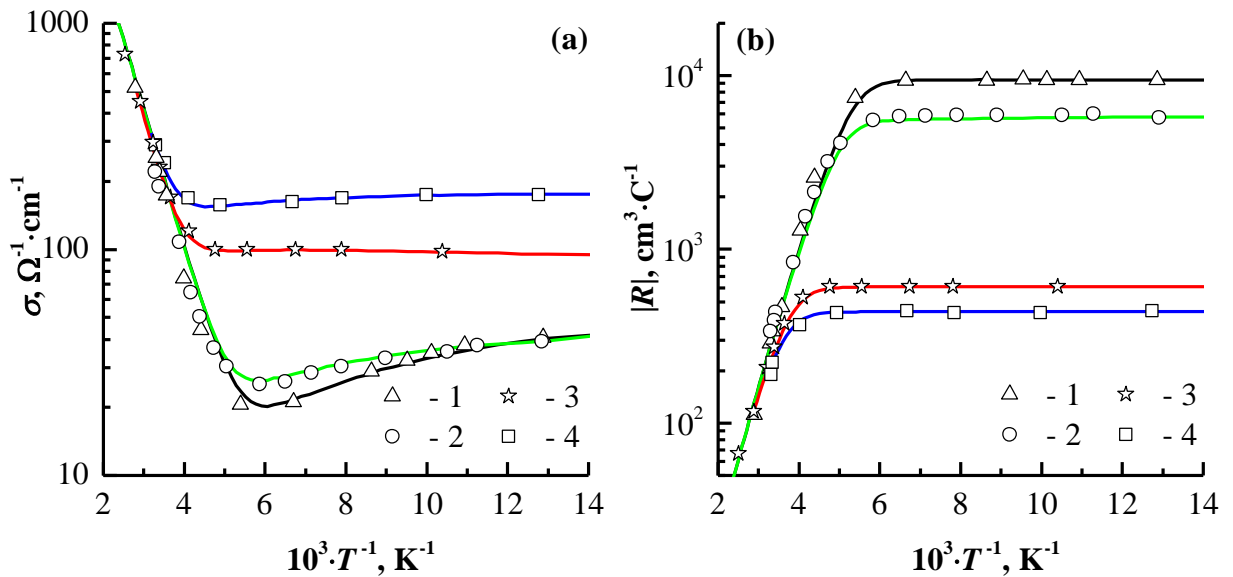


Рис. 2. Температурная зависимость проводимости (a) и коэффициента Холла (b) образцов n-InSb для различных значений $N_d - N_a$ и компенсации $K = N_a / N_d$. Точки – экспериментальные данные [14; 31; 35] для $N_d - N_a = 6,7 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ и $K = 0,34$ (1), $1,16 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 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.

Расчеты σ и R для образцов p-InSb, полученные в диссертации, как и результаты для образцов n-InSb близки к экспериментальным данным при всех рассматриваемых температурах и концентрациях допирующих донорных N_d и акцепторных N_a атомов (см. рис. 2).

В четвертом параграфе главы обсуждаются результаты расчетов коэффициента термоэдс s образцов InSb n- и p-типа (см. рис. 3).

Поскольку для термоэдс аналога правила Матиссена об аддитивности удельного сопротивления не существует, с целью оценки степени влияния различных механизмов рассеяния носителей заряда на величину s были проведены расчеты с исключением одного из механизмов рассеяния. Проведенный анализ выявил в образцах n-типа определяющую роль рассеяния на полярных оптических фононах и ионизованных примесных атомах.

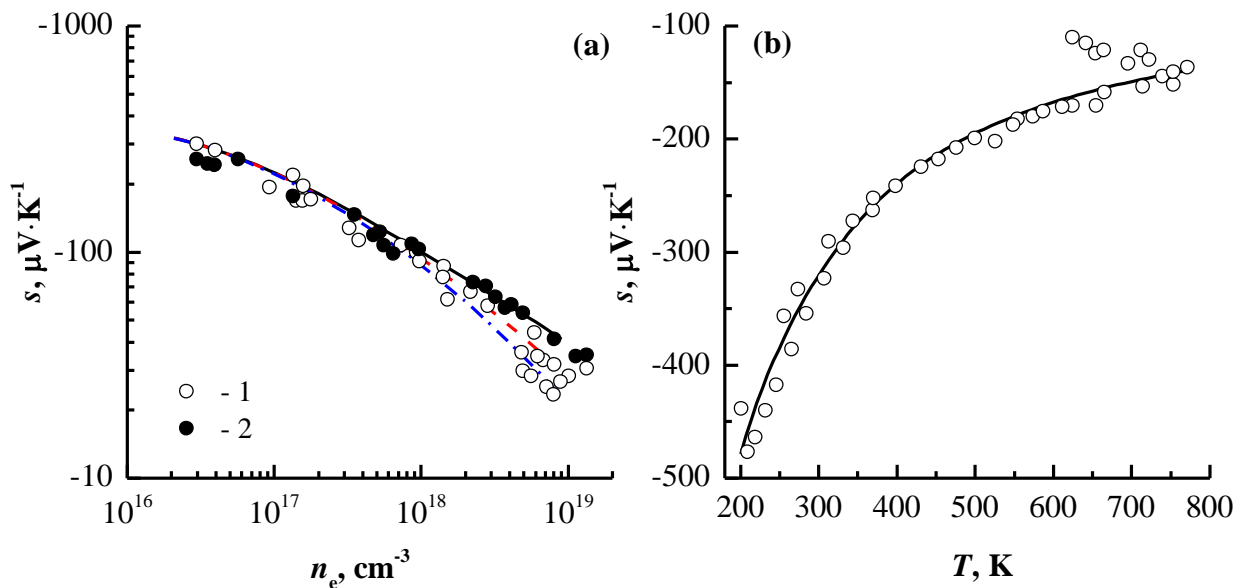


Рис. 3. Концентрационная и температурная зависимость термоэдс s образцов n-InSb. (a) - концентрационная зависимость s образцов легированных Te, Se, S при $T = 300\text{ K}$. Точки – экспериментальные данные: 1 - образцы, легированные Te [36], 2 – образцы легированные Se, S [15; 37; 38]. Сплошная, штриховая и штрихпунктирная линии – расчетные кривые для n-InSb, легированного атомами Te, Se, S. (b) - Температурная зависимость термоэдс образцов InSb в области собственной проводимости. Сплошная линия – расчетная кривая; точки – экспериментальные данные [31; 39; 40].

В образцах p-типа в области слабого легирования, определяющим является рассеяние на полярных оптических фононах и ионизованных примесных атомах. В области сильного легирования в p-InSb наиболее существенное влияние на величину s оказывает рассеяние на акустическом деформационном потенциале и на атомах ионизованных примесей.

В пятом параграфе представлены результаты расчетов электронного вклада в теплопроводность антимонида индия в области высоких температур. При рассмотрении κ выделяют два основных вклада в перенос тепла: от колебаний решетки и от свободных носителей заряда. Моделирование динамики решетки выходит за рамки диссертации, поэтому рассмотрение κ ограничивалось областью температур $T > 250$ К, в которой наравне с фоновым существенен и электронный вклад [31].

В указанной области температур решеточная компонента с хорошей точностью описывается с помощью эмпирической формулы [41]:

$$\kappa_{\text{ph}} = C \cdot T^{-n} \quad (1.24)$$

где $C = 120$ Вт/см и $n = 1.15$. Константы в формуле (1.24) были получены с помощью подгонки кривой по точкам, которые находились путем вычитания рассчитанного электронного вклада из экспериментальных точек полной измеренной теплопроводности (вычисления проводились для образца с концентрацией $N_d = 1.2 \cdot 10^{16}$ см⁻³). Возможными объяснениями отклонения показателя степени n в формуле (1.24) от единицы (степени характерной при доминировании трех-фононных процессов), согласно [41], являются возрастание влияния вклада в κ четырех-фононных процессов с температурой и особенности фононного спектра InSb.

Анализ влияния различных вкладов на величину электронной составляющей теплопроводности InSb n- и p-типа показал, что в образцах n-типа определяющими для κ_e являются вклады от рассеяния на полярных оптических фононах и атомах ионизованных примесей, меньший вклад в величину κ_e дает рассеяние на акустическом деформационном потенциале; в образцах p-типа наибольшее влияние на величину κ_e оказывает рассеяние на акустическом деформационном потенциале и на атомах ионизованных примесей.

Четвертая глава посвящена обсуждению термоэлектрических свойств InSb. Антимонид индия не обладает высокими значениями коэффициента термоэлектрической добротности и не находит значимого применения в качестве рабочего материала в устройствах для термоэлектрического преобразования энергии [42], так как его характеристики уступают параметрам таких материалов как соединения Bi_2Te_3 , PbTe или сплавы Ge-Si. Тем не менее, данные о температурных и концентрационных зависимостях кинетических коэффициентов InSb, рассчитанных в третьей главе диссертации, позволили проанализировать вклад различных механизмов рассеяния носителей заряда в термоэлектрическую добротность и выявить те

факторы, которые наиболее сильно влияют на эффективность термоэлектрического преобразования энергии.

Интегральной характеристикой кинетических свойств полупроводника является термоэлектрическая добротность [13]:

$$Z = \frac{\sigma s^2}{\kappa} = \frac{P}{\kappa} \quad (1.25)$$

где $P = s^2\sigma$ - так называемый «Power factor». Безразмерная величина ZT определяет эффективность термоэлектрического преобразования энергии и чувствительна к физическим характеристикам образца [19].

Как было отмечено выше, теплопроводность κ в формуле (1.25) определяется, главным образом, вкладом фононной подсистемы. Поэтому для анализа влияния механизмов рассеяния на эффективность термоэлектрического преобразования энергии рассматривался числитель P формулы (1.25), который определяется электронными свойствами.

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 К, проведенные в третьей главе. Для оценки степени влияния различных механизмов рассеяния носителей заряда на величину P , аналогично случаю с термоэдс, были также проведены расчеты с исключением одного из механизмов рассеяния. На рис. 4 (а) 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.

Согласно рис. 4 (а) в области концентраций донорных атомов $N_d < 10^{17}$ см⁻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. 4 (b) представлены экспериментальные данные [31] 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 указанной. 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. 4 (b) следует, что, в соответствии с результатами расчетов P , допирование InSb в области концентраций $N_d > 10^{18}$ см⁻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.

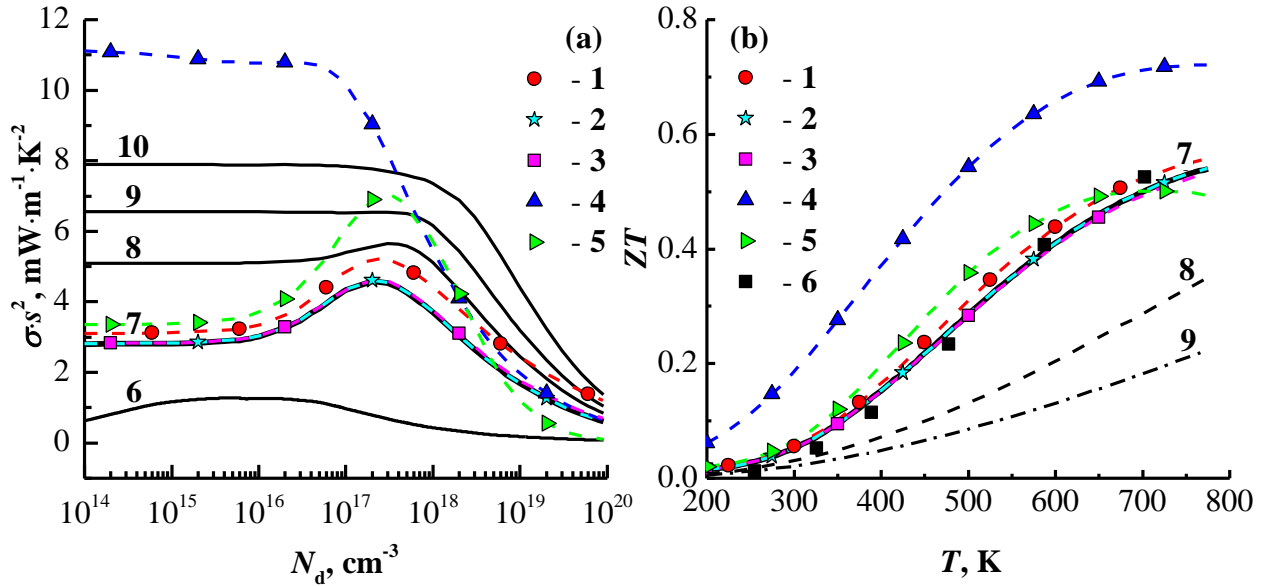


Рис. 4. (а) – Концентрационная зависимость $P = \sigma_s^2 n$ -InSb. Точки, соединенные штриховыми линиями, – расчет для $T = 300$ К без учета одного из механизмов рассеяния носителей заряда: 1 – без рассеяния на акустическом деформационном потенциале, 2 – без рассеяния на пьезоакустическом потенциале, 3 – без рассеяния на оптическом деформационном потенциале, 4 – без рассеяния на полярных оптических фононах, 5 – без рассеяния на ионизованных атомах примесей и «тяжелых» дырках. 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). (б) – Температурная зависимость ZT n -InSb. Точки, соединенные штриховыми линиями – расчет для $N_d = 1,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ без учета одного из механизмов рассеяния носителей заряда: 1–5 – то же, что на рис. 4 (а). 6 – экспериментальные данные [31] ($N_d = 1,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$), линии 7–9 – расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния для концентраций $1,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, соответственно.

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 κ^* кристалла и описывается формулой [22]:

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{4\pi^2 e^2 \omega}{Vq^2} \frac{1}{\kappa^*} \sum_{j', j} |I_{jj'}^{(v)}|^2 \left[N_q^{(v)} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega) + (N_q^{(v)} + 1) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega) \right] \quad (1.26)$$

где $|I_{jj'}^{(v)}|$ определяется через блоховские множители $u_{k,j}$, приведенные во второй главе диссертации:

$$I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum \frac{1}{V} \int u_{k',j}^* u_{k,j} \mathbf{dr}. \quad (1.27)$$

κ^* выражается через высокочастотную κ_∞ и статическую κ_0 диэлектрические проницаемости следующим образом:

$$1/\kappa^* = 1/\kappa_\infty - 1/\kappa_0 \quad (1.28)$$

Для InSb значения высокочастотной и статической диэлектрической проницаемостей относительно невелики: $\kappa_\infty = 15,68$ и $\kappa_0 = 18,0$ [43].

В полупроводниковых соединениях элементов V группы Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$, Bi-Sb, обладающих достаточно высокими значениями коэффициента термоэлектрической добротности в области комнатных температур, рассмотренный выше механизм рассеяния носителей заряда не является основным. Формула (1.27) для количественного анализа кинетических свойств данных веществ не применима в силу анизотропии их кристаллических решеток. Тем не менее, качественно, на основе (1.27), 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. Так, например, для Bi_2Te_3 $\kappa_\infty = 84$ и $\kappa_0 = 100$ [44; 45].

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

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

В заключении сформулированы основные результаты и положения, выносимые на защиту.

Публикации автора по теме диссертации

1. Орлов В.Г., Сергеев Г.С. Численное моделирование кинетических свойств антимонида индия // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. № 11. — С. 2105-2111.
2. 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. Т. 174. — С. 34-37.
3. Сергеев Г.С. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2014612277. CCTS Solver., 2013.

Цитированная литература

1. Chu J., Sher A. Physics and Properties of Narrow Gap Semiconductors. — New York : Springer, 2008.
2. Rowe D.M., ed. CRC Handbook of Thermoelectrics. 1994, CRC Press : Boca Raton. 657.
3. Rogalski A., Piotrowski J. Intrinsic infrared detectors // Progress in Quantum Electronics. 1988. Т. 12. № 2–3. — С. 87-289.
4. Hulme K.F., Mullin J.B. Indium antimonide - A review of its preparation, properties and device applications // Solid-State Electronics. 1962. Т. 5. № 4. — С. 211-IN10.
5. Kulkarni J.P., Roy K. Technology Circuit Co-Design for Ultra Fast InSb Quantum Well Transistors // Electron Devices, IEEE Transactions on. 2008. Т. 55. № 10. — С. 2537-2545.
6. 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. Т. 101. № 8. — С. 082103.
7. Obukhov S.A. A new type of low temperature conductivity in InSb doped with Mn // AIP Advances. 2012. Т. 2. № 2. — С. 022116.
8. Intel and QinetiQ Collaborate On Transistor Research, 2005. URL: <http://www.intel.com/pressroom/archive/releases/2005/20050208corp.htm> (дата обращения: 23.05.2014).
9. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. — М. : ИЛЛ, 1978.
10. Аскеров Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках. — М. : Наука, 1985.
11. Kohler M. Behandlung von Nichtgleichgewichtsvorgängen mit Hilfe eines Extremalprinzips // Zeitschrift für Physik. 1948. Т. 124. № 7-12. — С. 772-789.
12. Займан Д. Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах. — М. : ИИЛ, 1962.
13. Иоффе А.Ф. Полупроводниковые термоэлементы. — М. - Л. : АН СССР, 1960.

14. Hrostowski H.J., Morin F.J., Geballe T.H., Wheatley G.H. Hall Effect and Conductivity of InSb // *Physical Review*. 1955. Т. 100. № 6. — С. 1672-1676.
15. Ginter J., Szymańska W. The Measurements of Galvanomagnetic and Thermoelectric Properties of InSb-p // *physica status solidi (b)*. 1963. Т. 3. № 8. — С. 1398-1407.
16. Rees H.D. Calculation of distribution functions by exploiting the stability of the steady state // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1969. Т. 30. № 3. — С. 643-655.
17. Уиттекер Э.Т., Ватсон Д.Н. Курс современного анализа. — М. : URSS, 2002.
18. Маделунг О. Физика полупроводниковых соединений элементов III и V групп. — М : Мир, 1967. — 480.
19. Самойлович А.Г. Термоэлектрические и термомагнитные методы превращения энергии. — М. : ЛКИ, 2007.
20. 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. Т. 5. № 2. — С. 212.
21. Сергеев Г.С. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2014612277. CCTS Solver., 2013.
22. Szymańska W., Bogusławski P., Zawadzki W. Elastic Electron Scattering in Symmetry-Induced Zero-Gap Semiconductors // *physica status solidi (b)*. 1974. Т. 65. № 2. — С. 641-654.
23. Kane E.O. Band structure of indium antimonide // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1957. Т. 1. № 4. — С. 249-261.
24. Многоцелевой вычислительный комплекс НИЦ «Курчатовский институт». URL: <http://computing.kiae.ru/> (дата обращения: 21.01.2014).
25. Falicov L.M., Cuevas M. Mobility of Electrons in Compensated Semiconductors. II. Theory // *Physical Review*. 1967. Т. 164. № 3. — С. 1025-1032.
26. Conwell E., Weisskopf V.F. Theory of Impurity Scattering in Semiconductors // *Physical Review*. 1950. Т. 77. № 3. — С. 388-390.
27. Шифф Л. Квантовая механика. — М. : ИИЛ, 1959.
28. 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. Т. 48. № 2. — С. 519-524.
29. Litwin-Staszewska E., Szymańska W., Piotrkowski R. The Electron Mobility and Thermoelectric Power in InSb at Atmospheric and Hydrostatic Pressures // *physica status solidi (b)*. 1981. Т. 106. № 2. — С. 551-559.
30. 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.

31. Busch G., Steigmeier E. Wärmeleitfähigkeit, elektrische Leitfähigkeit, Hall-Effekt und Thermospannung von InSb // *Helvetica Physica Acta*. 1961. Т. 34. № 1. — С. 1-28.
32. Cunningham R.W., Gruber J.B. Intrinsic Concentration and Heavy - Hole Mass in InSb // *Journal of Applied Physics*. 1970. Т. 41. № 4. — С. 1804-1809.
33. 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.
34. 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. Т. 69. № 5. — С. 3109-3114.
35. Tanenbaum M., Maita J.P. Hall Effect and Conductivity of InSb Single Crystals // *Physical Review*. 1953. Т. 91. — С. 1009-1010.
36. Миргаловская М.С., Раухман М.Р., Ильченко Л.Н., Сорокина Н.Г. Термо-э.д.с. антимонида индия р- и n- типа проводимости при комнатной температуре // *Неорганические материалы*. 1972. Т. 8. № 10. — С. 1751-1754.
37. Filipchenko A.S., Nasledov D.N. On the Mixed Mechanism of Electron Scattering in InSb Crystals // *physica status solidi (b)*. 1967. Т. 19. № 1. — С. 435-439.
38. 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.
39. Weiss H. Bestimmung der effektiven Massen in InSb und InAs aus Messungen der differentiellen Thermospannung // *Z. Naturforsch.* 1956. Т. 11a. — С. 131-138.
40. 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.
41. Могилевский Б.М., Чудновский А.Ф. Теплопроводность полупроводников. — М. : Наука, 1972.
42. Bowers R., Ure R.W., Bauerle J.E., Cornish A.J. InAs and InSb as Thermoelectric Materials // *Journal of Applied Physics*. 1959. Т. 30. № 6. — С. 930-934.
43. *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.
44. Ure R.W. High Nobility n-Type Bismuth Telluride. — Exeter : Inst. of Phys. and the Phys. Soc., 1962. — 659-665.
45. Austin I.G. The Optical Properties of Bismuth Telluride // *Proceedings of the Physical Society*. 1958. Т. 72. № 4. — С. 545.