



Горський П.В.

Горський П.В. док. фіз.-мат. наук^{1,2}

¹Інститут термоелектрики НАН і МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна;
e-mail: anatysh@gmail.com;

²Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2,
Чернівці, 58000, Україна

ВПЛИВ НЕПАРАБОЛІЧНОСТІ, ОПИСУВАНОЇ МОДЕЛЛЮ ФІВАЗА НА ЕЛЕКТРИЧНИЙ КОНТАКТНИЙ ОПІР ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИЙ МАТЕРІАЛ – МЕТАЛ

Досліджено температурні залежності електричного контактного опору термоелектричний матеріал – метал у випадку, коли зонний спектр вільних носіїв заряду у матеріалі описується моделлю Фіваза. Розглянуто перехідний контактний шар, утворений відхиленням поверхні напівпровідникового термоелектричного матеріалу з надграткою (НГТЕМ) від ідеальної площини та перехідні контактні шари без кластерів і з кластерами, утворені у процесі стаціонарної дифузії частинок металу у НГТЕМ. Встановлено, що контактний опір різко знижується зі зростанням ступеня непараболічності зонного спектру НГТЕМ, який визначається як відношення енергії Фермі ідеального двовимірного електронного (діркового) газу з квадратичним законом дисперсії до ширини мінізони, яка описує трансляційний рух носіїв заряду у напрямку, перпендикулярному до площини шарів. Таке зниження пояснюється блокуванням розсіювання вільних носіїв заряду у напрямку, перпендикулярному до площини шарів. Показано, що в інтервалі ступенів непараболічності K від 0.1 до 10, товщин перехідного шару від 20 до 150 мкм, безрозмірних інтенсивностей надходження атомів металу в об'єм перехідного шару A від 0 до 1 та температур від 200 до 400 К електричний контактний опір перехідного шару, зумовленого відхиленням поверхні НГТЕМ від ідеальної площини змінюється від $8 \cdot 10^{-9}$ до $1.9 \cdot 10^{-7} \text{ Ом} \cdot \text{см}^2$, перехідного шару, зумовленого стаціонарною дифузією металу у НГТЕМ без утворення кластерів – від $8 \cdot 10^{-9}$ до $4 \cdot 10^{-7} \text{ Ом} \cdot \text{см}^2$, перехідного шару, зумовленого стаціонарною дифузією металу у НГТЕМ з утворенням кластерів – від $8 \cdot 10^{-9}$ до $4.5 \cdot 10^{-7} \text{ Ом} \cdot \text{см}^2$. Бібл. 6, рис. 9.

Ключові слова: модель Фіваза, надгратка, енергія Фермі, мінізона, ступінь непараболічності, контакт термоелектричний матеріал – метал, електричний контактний опір перехідного шару, відхилення поверхні термоелектричного матеріалу від ідеальної площини, стаціонарна дифузія, інтенсивність надходження частинок металу у напівпровідник, кластери.

Вступ

Електричний контактний опір термоелектричний матеріал (ТЕМ) – метал за інших рівних умов істотно залежить від питомих електричних опорів металу та ТЕМ. В свою чергу питомий електричний опір ТЕМ залежить не лише від концентрації та механізмів розсіювання вільних носіїв заряду у ньому, а й від характеру зонної структури ТЕМ, бо від неї не в останню чергу залежить рухливість вільних носіїв заряду.

Шаруваті ТЕМ, до яких, зокрема належить телурид вісмуту та сплави на його основі, тією чи іншою мірою схильні до утворення надграток. В свою чергу термоелектричні перетворювачі з цих

матеріалів, як правило, виготовляються так, щоб площини контактних електродів були перпендикулярні площинам шарів. Тому електричний контактний опір ТЕМ-метал в цьому випадку істотно залежить від питомого опору ТЕМ у площині шарів. Але відомо, що утворення надгратки, тобто поступове перетворення матеріалу з тривимірним параболічним зонним спектром на матеріал з квазідвовимірним істотно непараболічним зонним спектром знижує питомий опір ТЕМ у площині шарів. Дослідження впливу ступеня квазідвовимірності ТЕМ з надграткою (НГТЕМ) на електричний контактний опір ТЕМ-метал за різних умов і є метою даної статті.

Питомий електричний опір ТЕМ, описуваного моделлю Фіваза

Енергетичний спектр носіїв заряду у НГТЕМ досить часто описується моделлю Фіваза [1]. У рамках цієї моделі рух електронів або дірок вздовж шарів описується наближенням ефективної маси, а поперек – методом сильного зв'язку. Його можна подати у наступному вигляді:

$$\varepsilon(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + \Delta(1 - \cos ak_z), \quad (1)$$

де k_x, k_y, k_z – складові квазіімпульсу електрона (дірки), m^* – ефективна маса електрона (дірки) в площині шарів, Δ – напівширина міні-зони, яка описує рух електронів (дірок) у напрямку, перпендикулярному до шарів, a – віддаль між трансляційно еквівалентними шарами.

Тому питома електропровідність «надграткового» термоелектричного матеріалу (НГТЕМ) у площині шарів визначається таким чином [2]:

$$\sigma_s = \sigma_{0l} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{y \exp\left\{y + K^{-1}(1 - \cos x) - \gamma^*\right\}/t_{2D}}{\left\{\exp\left\{y + K^{-1}(1 - \cos x) - \gamma^*\right\}/t_{2D} + 1\right\}^2 \sqrt{2y + 4\pi K^{-2} n_0 a^3 \sin^2 x}} dx dy, \quad (2)$$

де $\sigma_{0l} = 8\pi^{5/2} e^2 l \sqrt{n_0 a} / (a \hbar t_{2D})$, l – довжина вільного пробігу електронів (дірок), n_0 – концентрація електронів (дірок), $t_{2D} = kT / \zeta_{02D}$, $\zeta_{02D} = \hbar^2 n_0 a / 4\pi m^*$ – енергія Фермі ідеального двовимірного Фермі-газу з квадратичним законом дисперсії за абсолютного нуля температури, $K = \zeta_{02D} / \Delta$, $\gamma^* = \zeta / \zeta_{02D}$, ζ – хімічний потенціал електронного (діркового) газу у СРТЕМ. Параметр K характеризує ступінь квазідвовимірності НГТЕМ, або, інакше кажучи, ступінь відкритості його електронної (діркової) поверхні Фермі.

Хімічний потенціал визначається з такого рівняння:

$$\frac{t_{2D}}{\pi} \int_0^\pi \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\gamma^* - K^{-1}(1 - \cos x)}{t_{2D}} \right) \right] dx - 1 = 0. \quad (3)$$

При цьому вважається, що розсіювання носіїв заряду в основному відбувається на деформаційному потенціалі акустичних фононів, і, отже, довжина вільного пробігу носіїв заряду обернено пропорційна до температури і не залежить від енергії носіїв заряду. Для розрахунку температурних залежностей питомого опору НГТЕМ за різних значень ступеня непараболічності K взято наступні параметри СРТЕМ: $n_0 = 3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $a = 3 \text{ нм}$, $m^* = m_0$, $T_0 = 300 \text{ К}$, $l_0 = 20 \text{ нм}$.

На основі цих залежностей виконано розрахунки температурних залежностей електричного контактного опору НГТЕМ-метал для двох випадків: коли перехідний контактний шар зумовлений відхиленням поверхні НГТЕМ від ідеальної площини та коли він зумовлений стаціонарною дифузією металу у НГТЕМ без утворення інтерметалідів.

Електричний контактний опір НГТЕМ-метал, зумовлений відхиленням поверхні НГТЕМ від ідеальної площини

Розрахунки виконувались у припущенні, що «западини» і «горби», зумовлені відхиленням поверхні НГТЕМ від ідеальної площини, розподілені по ній рівномірно. Тому за товщини h порушеного шару, яка визнається як віддаль по вертикалі між найглибшою «западиною» та найвищим «горбом», електричний контактний опір ТЕМ – метал, зумовлений цим відхиленням, визначався через питомі опори напівпровідника ρ_s та металу ρ_m так [3]:

$$r_{ce} \equiv r_c = \frac{h(\rho_s - \rho_m)}{\ln(\rho_s / \rho_m)}, \quad (4)$$

причому питомий металу вважався прямо пропорційним до температури. У якості металу брався нікель, питомий опір якого за 300 К складає $8 \cdot 10^{-6}$ Ом·см.

Результати розрахунків температурних залежностей контактного опору термоелектричний матеріал-метал, зумовленого відхиленням поверхні ТЕМ від ідеальної площини наведено на рис. 1 та 2.

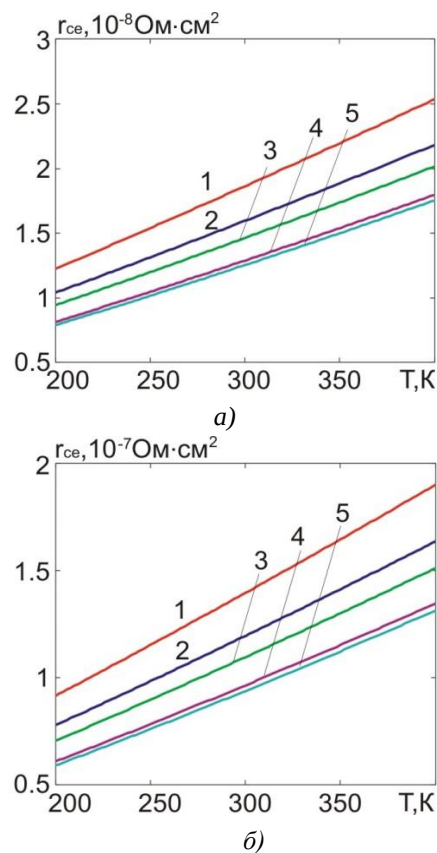


Рис. 1. Температурні залежності електричного контактного опору ТЕМ – метал за товщини порушеного шару: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм. 1 – $K=0.1$; 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

З рисунків видно, що зі зростанням ступеня непараболічності зонного спектру вільних носіїв заряду, і, отже, ступеня відкритості поверхні Фермі (ПФ) ТЕМ, електричний контактний опір ТЕМ-метал, зумовлений відхиленням поверхні ТЕМ від ідеальної площини, істотно знижується, а зі зростанням температури у відповідності зростає у відповідності з температурними залежностями питомих опорів як металу так і НГТЕМ. В цілому інтервалі температур 200 – 400 К за ступеня відкритості $0.1 \leq K \leq 10$ питомий електричний контактний опір ТЕМ – метал змінюється в межах від $8 \cdot 10^{-9}$ до $2.5 \cdot 10^{-8}$ Ом·см² за товщини порушеного шару 20 мкм, та від $6 \cdot 10^{-8}$ до $1.9 \cdot 10^{-7}$ Ом·см² за товщини порушеного шару 150 мкм, що перебуває не лише у якісній, а й у кількісній згоді з експериментальними даними. Більші контактні опори, які спостерігались авторами праць можна пояснити, у тому числі, меншим ступенем непараболічності зонного спектру сплавів на основі телуриду вісмуту, які використовувались для виготовлення термоелектричних гілок.

Електричний контактний опір НГТЕМ-метал, зумовлений стаціонарною дифузією металу у НГТЕМ без утворення кластерів

Якщо перехідний контактний шар утворюється у процесі стаціонарної дифузії металу у НГТЕМ, то розподіл атомів металу по глибині цього шару визначається так [4]:

$$n(x) = n_0 [1 - (1 - A)x - Ax^2], \quad (5)$$

де x – глибина, нормована на товщину шару, n_0 – концентрація атомів металу поблизу межі метал-перехідний шар, A – безрозмірний параметр, який характеризує режим створення контакту і визначається так:

$$A = Qh^2 / 2Dn_0, \quad (6)$$

де Q – інтенсивність надходження металу у ТЕМ, D – коефіцієнт дифузії металу у ТЕМ. З формули (5) випливає такий розподіл відносної об'ємної частки металу у перехідному шарі:

$$v(x) = \frac{(A_m/\gamma_m)[1 - (1 - A)x - Ax^2]}{(A_m/\gamma_m)[1 - (1 - A)x - Ax^2] + (A_s/\gamma_s)[(1 - A)x + Ax^2]}, \quad (7)$$

де A_m , A_s , γ_m , γ_s – атомні (молекулярні) маси та густини металу та ТЕМ відповідно. Тому, якщо у перехідному шарі відсутні кластери, то залежність його питомої електропровідності від глибини визначається так:

$$\sigma_l(x) = \sigma_s + (\sigma_m - \sigma_s)v(x), \quad (8)$$

і, отже, електричний контактний опір НГТЕМ-метал за нерівномірного розподілу атомів металу у перехідному шарі визначається так:

$$r_{ce} = h \int_0^1 \frac{dx}{\sigma_l(x)}. \quad (9)$$

Якщо ж розподіл атомів металу у перехідному шарі стає рівномірним внаслідок, наприклад, відпаду контактної структури, то його питома електропровідність визначається так:

$$\sigma_0 = \sigma_s + (\sigma_m - \sigma_s) \nu_0, \quad (10)$$

де

$$\nu_0 = \int_0^1 \frac{(A_m/\gamma_m)[1 - (1-A)x - Ax^2]}{(A_m/\gamma_m)[1 - (1-A)x - Ax^2] + (A_s/\gamma_s)[(1-A)x + Ax^2]} dx. \quad (11)$$

Отже, в цьому випадку

$$r_{ce} = h/\sigma_0. \quad (12)$$

Результати розрахунку електричного контактного опору перехідного шару без кластерів наведено на рис. 2 – 5.

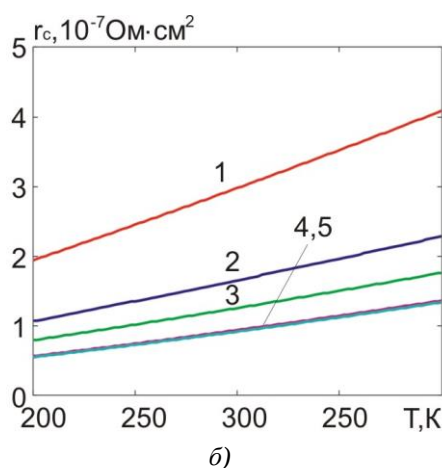
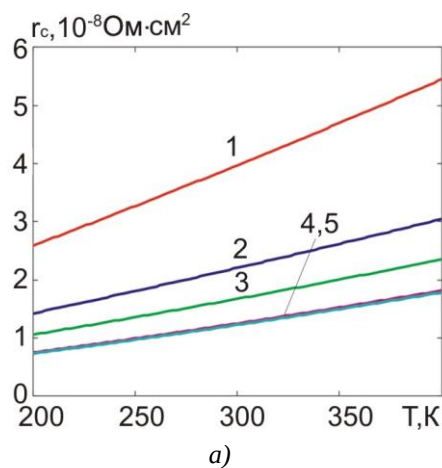


Рис. . Температурні залежності електричного контактного опору
 ТЕМ – метал за нерівномірного розподілу частинок металу у перехідному
 шарі без кластерів за значення $A=0$: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм. 1 – $K=0.1$;
 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

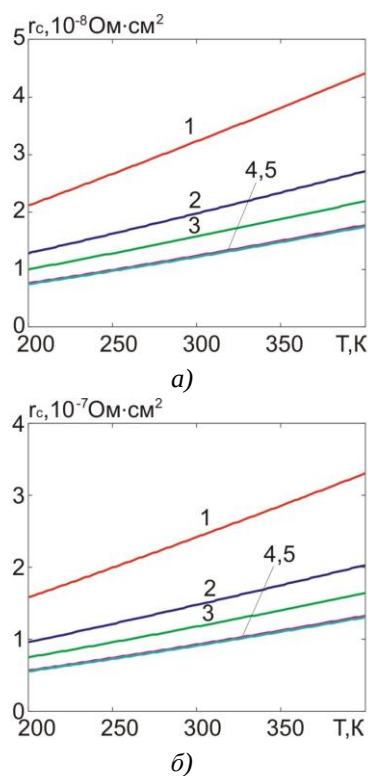


Рис. 3. Температурні залежності електричного контактного опору ТЕМ – метал за нерівномірного розподілу частинок металу у перехідному шарі без кластерів за значення $A=1$: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм. 1 – $K=0.1$; 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

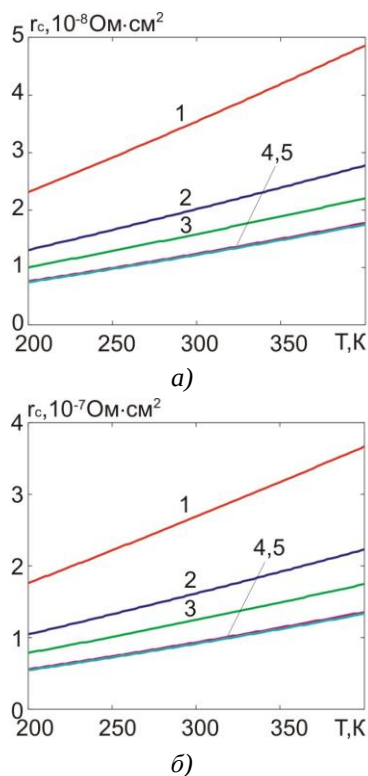


Рис. 4. Температурні залежності електричного контактного опору ТЕМ – метал після вирівнювання розподілу частинок металу у перехідному шарі без кластерів за значення $A=0$: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм. 1 – $K=0.1$; 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

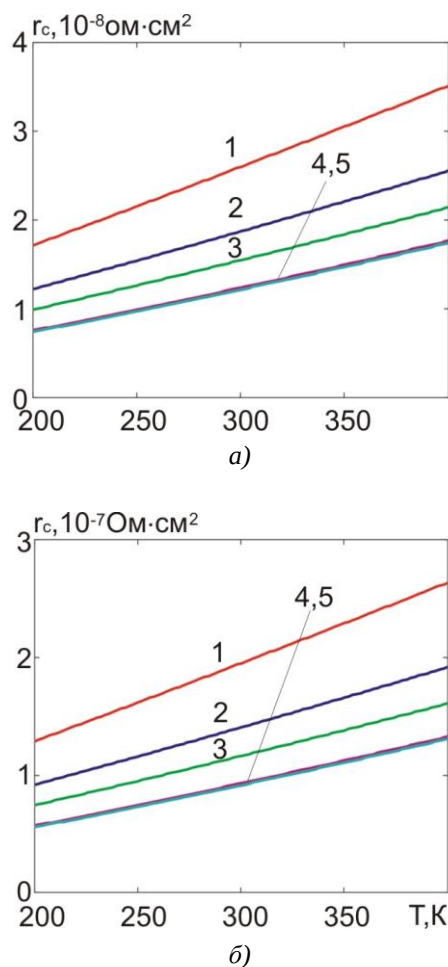


Рис.5. Температурні залежності електричного контактного опору ТЕМ – метал після вирівнювання розподілу частинок металу у перехідному шарі без кластерів за значення $A=1$: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм.
1 – $K=0.1$; 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

З рисунків видно, що електричний контактний опір зменшується зі зростанням ступеня непараболічності зонного спектру НГТЕМ та інтенсивності надходження металу у перехідний шар у процесі його створення та зростає зі зростанням температури. При цьому він зменшується також після вирівнювання розподілу частинок металу у перехідному шарі. В цілому у розглянутому інтервалі ступенів непараболічності (відкритості ПФ СРТЕМ), інтенсивностей надходження частинок металу у перехідний шар, товщин контактних шарів та температур електричний контактний опір, зумовлений стаціонарною дифузією частинок металу без утворення кластерів змінюється в інтервалі від $8 \cdot 10^{-9}$ до $4 \cdot 10^{-7}$ Ом·см². Цей інтервал ширший ніж у випадку, коли перехідний контактний шар утворено за рахунок відхилень поверхні НГТЕМ від ідеальної площини.

Електричний контактний опір НГТЕМ-метал, зумовлений стаціонарною дифузією металу у НГТЕМ з утворенням кластерів

У шаруватих НГТЕМ внаслідок великої кількості дефектів в них у міжшаровому просторі можуть утворюватись скупчення атомів, тобто кластери. У цьому випадку розрахунок електропровідності слід виконувати з використанням теорії протікання. У відповідності з цією

теорією при врахуванні залежності концентрації атомів металу у перехідному шарі від глибини питомо електропровідність перехідного шару визначається так [5]:

$$\sigma_l(x) = 0.25 \left\{ \sigma_s [2 - 3v(x)] + \sigma_m [3v(x) - 1] + \sqrt{\{\sigma_s [2 - 3v(x)] + \sigma_m [3v(x) - 1]\}^2 + 8\sigma_m \sigma_s} \right\}, \quad (13)$$

а у випадку, коли розподіл атомів по глибині перехідного шару стає рівномірним – так:

$$\sigma_0 = 0.25 \left\{ \sigma_s (2 - 3v_0) + \sigma_m (3v_0 - 1) + \sqrt{[\sigma_s (2 - 3v_0) + \sigma_m (3v_0 - 1)]^2 + 8\sigma_m \sigma_s} \right\}. \quad (14)$$

Далі розрахунок електричного контактного опору виконується в тому ж порядку, як і у випадку перехідного шару без кластерів. Результати розрахунку температурних залежностей електричного контактного опору НГТЕМ-метал у випадку перехідного контактного шару з кластерами наведено на рис.6 – 9.

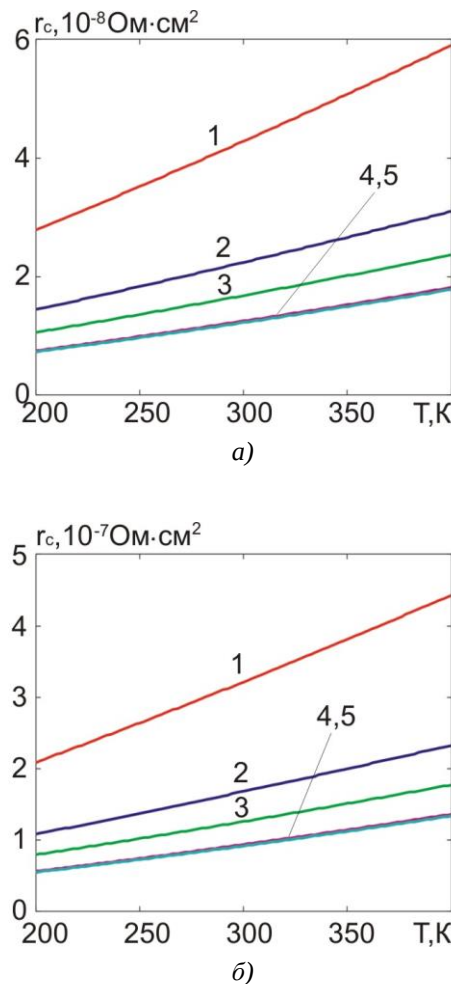


Рис. 6. Температурні залежності електричного контактного опору ТЕМ – метал за нерівномірного розподілу частинок металу у перехідному шарі з кластерами за значення $A=0$: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм. 1 – $K=0.1$; 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

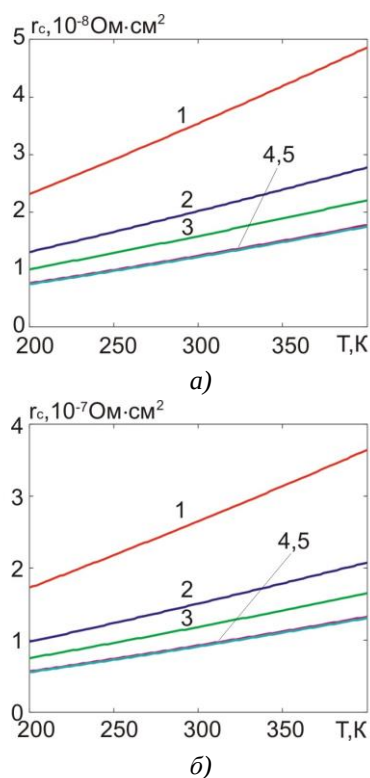


Рис. 7. Температурні залежності електричного контактного опору ТЕМ – метал за нерівномірного розподілу частинок металу у перехідному шарі з кластерами за значення $A=1$: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм. 1 – $K=0.1$; 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

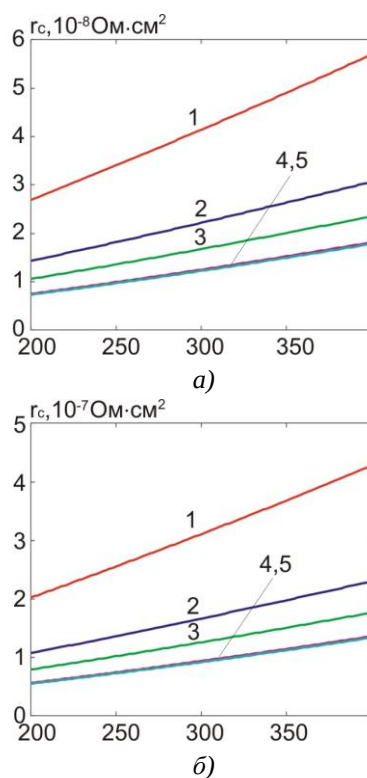


Рис. 8. Температурні залежності питомого електричного контактного опору ТЕМ – метал після вирівнювання розподілу частинок металу у перехідному шарі з кластерами за значення $A=0$: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм. 1 – $K=0.1$; 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

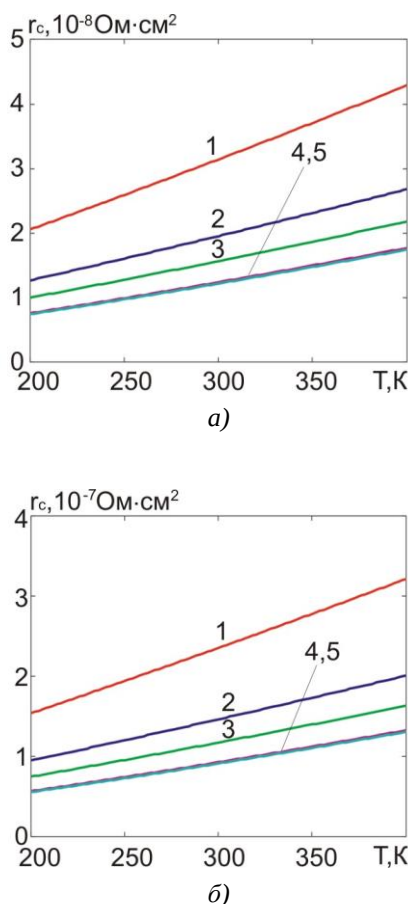


Рис. 9. Температурні залежності питомого контактного опору ТЕМ – метал після вирівнювання розподілу частинок металу у перехідному шарі з кластерами за значення $A=1$: а) $h=20$ мкм, б) $h=150$ мкм. 1 – $K=0.1$; 2 – $K=0.5$; 3 – $K=1$; 4 – $K=5$; 5 – $K=10$.

З рисунків видно, що, так само, як і у випадку перехідного контактного шару без кластерів, електричний контактний опір зменшується зі зростанням ступеня непараболічності зонного спектру НГТЕМ та інтенсивності надходження металу у перехідний шар у процесі його створення та зростає зі зростанням температури. При цьому він зменшується також після вирівнювання розподілу частинок металу у перехідному шарі. В цілому у розглянутому інтервалі ступенів непараболічності (відкритості ПФ СРТЕМ), інтенсивностей надходження частинок металу у перехідний шар, товщин контактних шарів та температур електричний контактний опір, зумовлений стаціонарною дифузією частинок металу з утворенням кластерів змінюється в інтервалі від $8 \cdot 10^{-9}$ до $4.5 \cdot 10^{-7}$ Ом·см². Цей інтервал дещо ширший ніж у випадку, коли перехідний контактний шар, утворений у процесі стаціонарної дифузії атомів металу у НГТЕМ, не містить кластерів.

Висновки

1. Встановлено, що як у випадку утворення перехідного контактного шару НГТЕМ-метал за рахунок відхилення поверхні НГТЕМ від ідеальної площини, так і у випадках утворення вказаного перехідного контактного шару за рахунок стаціонарної дифузії металу у НГТЕМ без утворення або з утворенням кластерів електричний контактний опір НГТЕМ-метал істотно

знижується зі зростанням ступеня непараболічності зонного спектру НГТЕМ, або, що те ж саме, ступенем відкритості ПФ НГТЕМ.

2. Як і у випадку ТЕМ з параболическим зонним спектром, електричний контактний опір ТЕМ-метал знижується зі зростанням інтенсивності надходження металу у перехідний шар та в результаті подальшого вирівнювання розподілу атомів металу у перехідному шарі за рахунок, наприклад, відпалу.
3. За товщини перехідного шару 20 мкм та ступеня непараболічності зонного спектру НГТЕМ $K=10$, який відповідає сильно відкритій ПФ НГТЕМ електричний контактний опір за температури 200 К прямує до асимптотичного значення, яке дорівнює $8 \cdot 10^{-9}$ Ом·см². Це значення можна розглядати як мінімальне для даної температури. Хоча характер температурної залежності електричного контактного опору навіть за такого ступеня непараболічності залежить від умов створення контакту, за 400 К цей контактний опір не перевищує $2 \cdot 10^{-8}$ Ом·см².
4. В цілому в інтервалі ступенів непараболічності K від 0.1 до 10, товщин контактних шарів від 20 до 150 мкм та температур від 200 до 400 К електричний контактний опір перехідного контактного шару, зумовленого відхиленням поверхні НГТЕМ від ідеальної площини змінюється від $8 \cdot 10^{-9}$ до $1.9 \cdot 10^{-7}$ Ом·см², електричний контактний опір перехідного контактного шару, зумовленого стаціонарною дифузією металу в НГТЕМ без утворення кластерів – від $8 \cdot 10^{-9}$ до $4 \cdot 10^{-7}$ Ом·см², електричний контактний опір перехідного контактного шару, зумовленого стаціонарною дифузією металу в НГТЕМ з утворенням кластерів – від $8 \cdot 10^{-9}$ до $4.5 \cdot 10^{-7}$ Ом·см². Отже у випадку НГТЕМ утворення кластерів впливає на електричний контактний опір НГТЕМ-метал істотно слабше, ніж у випадку НГТЕМ з параболическим зонним спектром.

Література

1. Fivaz R.F. Theory of layered structures/ R.F. Fivaz// J. Phys. Chem. Sol. – 1967. – Vol.28. – No 5. – P.839-845.
2. Gorskyi P.V. The effect of nonparabolicity described by Fivaz model on the electrical contact resistance “thermoelectric material - metal”/ P.V. Gorskyi // In book: Physics and technology of thin films and nanosystems. XVII Freik International Conference. Abstract book. – May 20 – 25, 2019. –Ivano-Frankivsk, Ukraine. – P.46-47.
3. Горський П.В. Оцінка електричного та теплового контактних опорів та термоерс перехідного контактного шару термоелектричний матеріал-метал, зумовлених неплоскостійкістю поверхні напівпровідника/ П.В. Горський // Термоелектрика – 2018, №4 – С.5-13.
4. Vikhor L. N., Anatychuk L.I., Gorskyi P.V. Electrical resistance of metal contact to Bi_2Te_3 based thermoelectric legs. – J. Appl. Phys. – 2019. – vol.126. – P.164503-1 – 164503-8. Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.5117183>.
5. Займан Дж. Модели беспорядка / Займан Дж. – М.:Мир,1982. – 592с.
6. Снарський А.О. Про закон Відемана-Франца в термоелектричних композитах / А.О. Снарський, М.І. Женіровський, І.В. Безсуднов // Термоелектрика – 2006. – №3. – С.59-65.

Надійшла до редакції 13.08.2019

Горский П.В.^{1,2}, док. физ.-мат. наук^{1,2}

¹Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины

ул. Науки, 1, Черновцы, 58029, Украина;

e - mail: anatysh@gmail.com;

²Черновицкий национальный университет

имени Юрия Федьковича, ул. Коцюбинського 2

Черновцы, 58012, Украина

ВЛИЯНИЕ НЕПАРАБОЛИЧНОСТИ, ОПИСЫВАЕМОЙ МОДЕЛЬЮ ФИВАЗА НА ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ КОНТАКТНОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ МАТЕРИАЛ - МЕТАЛЛ

Исследованы температурные зависимости электрического контактного сопротивления термоэлектрический материал - металл в случае, когда зонный спектр свободных носителей заряда в материале описывается моделью Фиваза. Рассмотрены переходный контактный слой, образованный отклонением поверхности полупроводникового термоэлектрического материала со сверхрешеткой (СРТЭМ) от идеальной плоскости и переходные контактные слои без кластеров и с кластерами, образованные в процессе стационарной диффузии частиц металла в СРТЭМ. Установлено, что контактное сопротивление резко снижается с ростом степени непараболічності зонного спектра СРТЭМ, которая определяется как отношение энергии Ферми идеального двумерного электронного (дырочного) газа с квадратичным законом дисперсии к ширине минизоны, описывающей трансляционное движение носителей заряда в направлении, перпендикулярном плоскости слоев. Такое снижение объясняется блокированием рассеяния свободных носителей заряда в направлении, перпендикулярном плоскости слоев. Показано, что в интервале степеней непараболічності K от 0.1 до 10, толщин переходного слоя от 20 до 150 мкм, безразмерных интенсивностей поступления атомов металла в объем переходного слоя A от 0 до 1 и температур от 200 до 400 К электрическое контактное сопротивление переходного слоя, обусловленного отклонением поверхности СРТЭМ от идеальной плоскости меняется от $8 \cdot 10^{-9}$ до $1.9 \cdot 10^{-7}$ Ом·см², переходного слоя, обусловленного стационарной диффузией металла в СРТЭМ без образования кластеров - от $8 \cdot 10^{-9}$ до $4 \cdot 10^{-7}$ Ом·см², переходного слоя, обусловленного стационарной диффузией металла в СРТЭМ с образованием кластеров - от $8 \cdot 10^{-9}$ до $4.5 \cdot 10^{-7}$ Ом·см². Библ. 6, рис. 9.

Ключевые слова: модель Фиваза, сверхрешетки, энергия Ферми, минизоны, степень непараболічності, контакт термоэлектрический материал - металл, электрическое контактное сопротивление переходного слоя, отклонения поверхности термоэлектрического материала от идеальной плоскости, стационарная диффузия, интенсивность поступления частиц металла в полупроводник, кластеры.

Gorskyi P.V. dok. phys.-mat. sciences^{1,2}

¹Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,

1, Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine;

²Yu.Fedkovych Chernivtsi National University,

2, Kotsiubynskyi str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

EFFECT OF NONPARABOLICITY DESCRIBED BY THE FIVAZ MODEL ON THE ELECTRICAL RESISTANCE OF THERMOELECTRIC MATERIAL-METAL CONTACT

The temperature dependences of thermoelectric material-metal electrical contact resistance were investigated in the case when a band spectrum of free charge carriers in material is described by the Fivaz model. A transient contact layer formed by the deviation of the surface of superlattice semiconductor thermoelectric material (SL TEM) from the ideal plane and transient contact layers with and without clusters formed in the process of steady-state diffusion of metal particles in SL TEM were considered. It was established that contact resistance drastically decreases with increase in the degree of nonparabolicity of SL TEM band spectrum, which is determined as the ratio of the Fermi energy of ideal two-dimensional electron (hole) gas with a quadratic dispersion law to the miniband width describing translation motion of charge carriers in the direction perpendicular to the plane of layers. This decrease is explained by blocking of free carrier scattering in the direction perpendicular to the plane of layers. It is shown that in the range of degrees of nonparabolicity K from 0.1 to 10, transient layer thicknesses from 20 to 150 μm , dimensionless intensities of metal atoms entering the volume of transient layer A from 0 to 1 and temperatures from 200 to 400 K, the electrical contact resistance of transient layer due to the deviation of SL TEM surface from the ideal plane varies from $8 \cdot 10^{-9}$ to $1.9 \cdot 10^{-7} \text{ Ohm} \cdot \text{cm}^2$, transient layer due to steady-state diffusion of metal into SL TEM without formation of clusters – from $8 \cdot 10^{-9}$ to $4 \cdot 10^{-7} \text{ Ohm} \cdot \text{cm}^2$, transient layer due to steady-state diffusion of metal in SL TEM with formation of clusters – from $8 \cdot 10^{-9}$ to $4.5 \cdot 10^{-7} \text{ Ohm} \cdot \text{cm}^2$. Bibl. 6, Fig 9.

Key words: Fivaz model, superlattice, Fermi energy, miniband, degree of nonparabolicity, thermoelectric material-metal contact, electrical contact resistance of transient layer, deviation of thermoelectric material surface from the ideal plane, steady-state diffusion, intensity of metal particles entering semiconductor, clusters.

References

1. Fivaz R.F. (1967). Theory of layered structures. *J. Phys. Chem. Sol.*, 28 (5), 839-845.
2. Gorskyi P.V. (2019). The effect of nonparabolicity described by Fivaz model on the “thermoelectric material - metal” electrical contact resistance. In: *Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems. XVII Freik International Conference. Abstract book (Ivano-Frankivsk, Ukraine, May 20 – 25, 2019)*.
3. Gorskyi P.V. (2018). Estimation of the electrical and thermal contact resistances and thermoEMF of “thermoelectric material-metal” transient contact layer due to semiconductor surface roughness. *J. Thermoelectricity*, 4, 5-13.
4. Vikhor L. N., Anatychuk L.I., Gorskyi P.V. (2019). Electrical resistance of metal contact to Bi_2Te_3 based thermoelectric legs. *J. Appl. Phys.*, 126, 64503-1 – 164503-8. Available at: <https://doi.org/10.1063/1.5117183>.
5. Zaiman G. (1982). *Models of disorder*. Moscow: Mir.
6. Snarskii A.O., Zhenirovskii M.I., Bezsudnov I.V. (2006). The law of Wiedemann-Franz in thermoelectric composites. *J. Thermoelectricity*, 3, 59-65.

Submitted 13.08.2019