УДК 537.311.33

Товстюк К.К.
ДУ “Львівська політехніка”, кафедра напівпровідникової електроніки

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЕЛИЧИНИ СИЛЬНОВИРОДЖЕНОГО ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ У ШАРУВАТИХ НАПІВПРОВІДНИКАХ

Розраховано термодинамічні величини сильновиродженого електронного газу в шаруватих кристалах (ШК) із врахуванням особливостей одночастинкового спектра. Отримано залежності термодинамічного потенціалу, ентропії, рівняння для визначення хімпотенціалу, які порівнюються з аналогічними виразами у кристалах з параболічною дисперсією. Показано, що температурна залежність розрахованих величин у ШК узгоджується із відомими для кристалів із парабоолічною дисперсією, в той час як параметри одночастинкового спектра та хімпотенціал визначаються зовсім іншими функціональними залежностями.

The thermodynamic functions are calculated for the quantum electron gas in layered crystals, using the specification features of a one-partical spectrum there. The dependence of thermodynamic potential, entropy, as well as the equation for Fermi level definition are found out and compared to similar expressions in isotropic crystals. Shown, that the temperature dependence of the designed expressions in LC are in agreement with the same ones for isotropic crystals, while parameters of an one-partical spectrum and Fermi level are defined by other functional dependence.

Вступ

Специфіка одночастинкового спектра шаруватого кристала (ШК) [1] зумовлює ускладненння розрахунку термодинамічних величин. У попередніх роботах [2] наведені аналогічні розрахунки для слабковиродженого газу ферміонів (електронів) та бозонів (фононів) у ШК. Однак проблема сильновиродженого електронного газу (дуже низькі температури) залишалась актуальною через неможливість використання наближень, застосованих в [2] для цього випадку. Окрім того існують як теоретичні [3], так і експериментальні [4] роботи з дослідження теплоємності ШК при низьких температурах, які вказують на особливу залежність від інтеграла міжшарового перемішування (параметр одночастинкового спектра) та положення хімпотемціалу. У роботі продовжені ці дослідження. Окрім того, робота містить аналогічні формули, отримані для параболічної дисперсиї одночастинкового спектра напівпровідника, для порівняння. Показано, що температурна залежність розрахованих величин у ШК узгоджується із відомими для кристалів із параболічною дисперсією, у той час як параметри одночастинкового спектра та хімпотенціал визначаються зовсім іншими функціональними залежностями.

Термодинамічний потенціал сильновиродженого електронного газу в ШК

Так, термодинамічний потенціал у загальному випадку задається [5]

$$-\Omega = -\theta \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \ln\left(1+\exp\left\{\frac{\mu-\varepsilon}{\theta}\right\}\right) dG(\varepsilon) \tag{1}$$

Інтегруючи (1) частинами, отримаємо

$$-\Omega = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\varepsilon) \frac{\exp\left\{\frac{\mu-\varepsilon}{\theta}\right\}}{1+\exp\left\{\frac{\mu-\varepsilon}{\theta}\right\}} d\varepsilon \quad . \tag{2}$$

Для подальших обчислень використаємо теорему про обернення статистичної суми Z(β) (β = 1/θ = 1/(kT) [6]:

$$G(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} Z(\beta) \cdot e^{\beta \cdot E} \frac{d\beta}{\beta} \qquad \left(0<\sigma<1/\theta\right), \tag{3}$$

де G(E) – кількість станів з енергією, меншою E (0 < ε < E)

$$-\Omega = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} Z(\beta) \frac{d\beta}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left\{\beta\varepsilon + \frac{\mu-\varepsilon}{\theta}\right\}}{1+\exp\left\{\frac{\mu-\varepsilon}{\theta}\right\}} d\varepsilon \tag{4}$$

$$(0<\sigma<\frac{1}{\theta}).$$

Вводячи заміну змінної інтегрування $\varepsilon = \pi\theta \cdot x + \mu$, отримаємо

$$-\Omega = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \pi\theta \cdot Z(\beta) \frac{\exp\{\mu\beta\}}{\beta} d\beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\{(\beta\pi\theta-\pi)x\}}{1+\exp\{-\pi x\}} dx \, . \tag{5}$$

Розглянемо другий інтеграл (5)

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\{(\beta\pi\theta-\pi)x\}}{1+\exp\{-\pi x\}} dx \, . \tag{6}$$

Перетворимо його в інтеграл лише по додатній півплощині

$$I = \int_{0}^{\infty} \left[\frac{\exp\{-\beta\pi\theta \cdot x\}}{1+\exp\{-\pi \cdot x\}} + \frac{\exp\{(\beta\pi\theta-\pi)x\}}{1+\exp\{-\pi \cdot x\}}\right] dx \, . \tag{7}$$

Розкладемо знаменники (7) за ступенями експоненти і згрупуємо доданки

$$I = \int_{0}^{\infty} \exp\{-\beta\pi\theta \cdot x\} dx - \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{1}{\pi\beta\theta - \pi k} + \frac{1}{\pi\beta\theta + \pi k}\right] \tag{8}$$

або, після інтегрування в (8)

$$I = \frac{1}{\beta\pi\theta} + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{1}{\beta\pi\theta - \pi k} + \frac{1}{\beta\pi\theta + \pi k}\right]. \tag{9}$$

Але (9) є розкладом в ряд функції $\left(\sin(\beta\pi\theta)\right)^{-1}$.

Отже,

$$I = \frac{1}{\sin(\beta\pi\theta)}. \tag{10}$$

Використовуючи у (4) вираз (10), отримаємо

$$-\Omega = \frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}\frac{\beta\pi\theta}{\sin(\beta\pi\theta)}\cdot\frac{\exp\{\beta\mu\}}{\beta^2}Z(\beta)d\beta. \tag{11}$$

Обчислимо термодинамічний потенціал для сильновиродженого газу електронів шаруватого кристала, для якого, як показано в [2],

$$Z(\beta) = \frac{A}{\beta}\exp\{-\beta\gamma\}I_0(\beta\gamma), \tag{12}$$

де $A = \frac{2Vm}{h^2 d}$, m – ефективна маса у площині шару; d – товщина шару; γ – ширина зони провідности у напрямку, перпендикулярному до Ван дер Ваальсових шарів; I_0 – модифікована функція Бесселя уявного аргументу *0*-порядку. Розрахунок в [2] проведено для непараболічної дисперсії одночастинкового спектра із косинусоїдальною залежністю від k_z.

Оскільки для випадку сильного виродження $\theta << \mu$, розкладемо перший дріб підінтегрального виразу (11) в ряд за малим аргументом, обмежуючись двома доданками

$$\frac{\pi\beta\theta}{\sin(\pi\beta\theta)} = 1 + \frac{1}{6}(\pi\beta\theta)^2. \tag{13}$$

Тоді (11) набуде вигляду

$$-\Omega = \frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}\frac{\exp\{\mu\beta\}}{\beta^2}Z(\beta)d\beta + \frac{\pi^2\theta^2}{6}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}\exp\{\mu\beta\}Z(\beta)d\beta. \tag{14}$$

Або, враховуючи (12),

$$-\Omega = \frac{A}{\pi i}\left\{\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}\frac{\exp\{\beta(\mu-\gamma)\}}{\beta^3}\int_0^{\pi}\exp\{\beta\gamma\cdot\cos x\}dxd\beta + \right.$$

$$\left. + \frac{\pi^2\theta^2}{6}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}\frac{\exp\{\beta(\mu-\gamma)\}}{\beta}\int_0^{\pi}\exp\{\beta\gamma\cdot\cos x\}dxd\beta\right.. \tag{15}$$

Обчислимо спочатку другий інтеграл (15), вводячи комплексну змінну

$$\beta = \sigma + it \tag{16}$$

та замінюючи вираз

$$\frac{1}{\sigma + it} = \int_0^{\infty}\exp\{-i(\sigma + it)y\}dy, \tag{17}$$

отримаємо

$$I_2 = \frac{A}{\pi}\cdot\frac{\pi^2\theta^2}{6}\int_0^{\pi}dx\int_0^{\infty}dy\exp\{\sigma(\mu - y - \gamma(1-\cos x))\}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\{it(\mu - y - \gamma(1-\cos x))\}dt,$$

в якому останній інтеграл – суть δ-функція Дірака, отже,

$$I_2 = 2A \cdot \frac{\pi^2\theta^2}{6} \int_0^{\pi} dx \exp\{\sigma(\mu - \gamma(1 - \cos x))\ \} \int_0^{\infty} dy \exp\{-\sigma y\} \delta(\mu - y - \gamma(1 - \cos x)).$$

Останній інтеграл – відмінний від нуля для області 0 < x < α. Де

$$\alpha = \arccos\left(\frac{\gamma - \mu}{\gamma}\right), \tag{18}$$

тоді, використовуючи властивість δ-функції Дірака, згорнемо I_2 до

$$I_2 = \frac{\pi^2\theta^2\alpha}{3}. \tag{19}$$

Тепер обчислимо перший інтеграл (15)

$$I_1 = \frac{A}{\pi i} \int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} d\beta \int_0^{\pi} dx \frac{\exp\{\beta(\mu - \gamma(1 - \cos x))\}}{\beta^3}, \tag{20}$$

який після дворазового інтегрування по β частинами перепишемо

$$I_1 = \frac{A}{2\pi i} \int_0^{\pi} dx (\mu - \gamma(1 - \cos x))^2 \int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} \frac{\exp\{\beta(\mu - \gamma(1 - \cos x))\}}{\beta} d\beta \tag{21}$$

Провівши в (21) заміни (16) та (17) і ввівши для спрощення позначення

$$f(x) = \mu - \gamma(1 - \cos x), \tag{22}$$

отримаємо

$$I_1 = \frac{A}{2\pi} \int_0^{\pi} f^2(x) \exp\{\sigma \cdot f(x)\} dx \int_0^{\infty} \exp\{-\sigma \cdot y\} dy \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i \cdot t(f(x) - y)\} dt, \tag{23}$$

де як і в попередньому випадку останній інтеграл, з точністю до постійної – δ-функція Дірака. Використовуючи її властивості, отримаємо обмеження на x, аналогічні до попередніх із граничним значенням кута (18). Згортаючи за допомогою δ-функції Дірака интеграл по y в (23), отримаємо

$$I_1 = A \int_0^{\alpha} f^2(x) dx, \tag{24}$$

або

$$I_1 = A\left\{\left[(\mu - \gamma)^2 + \frac{\gamma^2}{2}\right] \cdot \alpha + 2\gamma(\mu - \gamma)\sin\alpha + \frac{\gamma^2}{4}\sin(2\alpha)\right\}. \tag{25}$$

Підставивши (25), (19), (18) а також значення A у (15), одержимо

$$-\Omega = \frac{2Vm}{h^2 d} \cdot \left\{\left[(\mu - \gamma)^2 + \frac{\pi^2\theta^2}{3} + \frac{\gamma^2}{2}\right] \arccos\left(\frac{\gamma - \mu}{\gamma}\right) + \frac{3}{2}(\mu - \gamma)\sqrt{\mu \cdot (2\gamma - \mu)}\right\}. \tag{26}$$

Рівняння (26) – термічне рівняння стану сильновиродженого газу електронів у шаруватих кристалах. Як бачимо, воно суттєво відрізняється від класичного. Так, для сильновиродженого газу ферміонів у випадку параболічної дисперсії одночастинкового спектра

$$\Omega = -\frac{8\pi}{3} \cdot \frac{V}{h^3} (2m)^{3/2} \left(\frac{2}{5}\mu + \frac{\pi^2\theta^2}{4\mu} \right) \mu^{3/2} . \quad (27)$$

Інші термодинамічні величини

Диференціюванням термодинамічного потенціалу за узагальненими координатами знаходимо відповідні узагальнені сили. Так, використовуючи

$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T} \right)_{V,\mu} \quad (28)$$

знаходимо ентропію сильновиродженого електронного газу шаруватого кристала

$$S = \frac{4Vm}{h^2 d} \cdot \frac{\pi^2\theta}{3} k \cdot \arccos\left(\frac{\gamma - \mu}{\gamma} \right), \quad (29)$$

у той час як для звичайного, наприклад, кубічного кристала

$$S = \frac{4V\pi^3}{3h^3} (2m)^{3/2} \theta \cdot k\sqrt{\mu} . \quad (30)$$

Рівняння для визначення хімпотенціалу

$$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} \right)_{V,T} \quad (31)$$

Отже, згідно з (31) рівняння для визначення хімічного потенціалу сильновиродженого електронного газу шаруватого кристала:

$$N = \frac{2Vm}{h^2 d} \left\{ 2(\mu - \gamma) \arccos\frac{\gamma - \mu}{\gamma} + \frac{1}{\sqrt{\mu(2\mu - \gamma)}} \left(\frac{\pi^2\theta^2}{3} - 2\mu^2 + 5\gamma\mu \right) \right\}. \quad (32)$$

У той час як для газу из параболічною дисперсією

$$N = \frac{8\pi}{3} \cdot \frac{V}{h^3} (2m)^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2\theta^2}{8\mu^2} \right) \mu^{3/2} . \quad (33)$$

Висновки

Порівнюючи між собою (32) і (33) та (29), (30); (26), (27) зазначимо їх аналогічні залежності від температур. Тобто, електронний газ ШК поводиться із зміною температури аналогічно до електронного газу звичайного ізотропного кристала. Тоді для залежності одночастинкового спектра (m – для ізотропного кристала та m, γ для ШК, особливо в залежності від γ) мають місце зовсім інші функціональні залежності. Істотно відмінною є також залежність від хімпотенціалу. Зазначимо, що саме за допомогою цих параметрів ми переходимо від замкнених до відкритих ізоенергетичних поверхонь, або, інакше кажучи, дещо змінюємо ступені вільності системи.

[1] Товстюк К.Д., Данилевич–Товстюк К.К., Лукиянець Б.А.// Вісн. АН УРСР. 1983. С.5–13.

[2] Товстюк К.К.// Вісн. ДУ "Львівська політехніка". 1998. № 238. С.85–88.

[3] Лукиянец Б.А.// Материаловедение узкощелевых и слоистых полупроводников. К.,1982.

[4] Dahn D.C., Caroline J.F., Haerling R.R. // Phys.Rev. b. 1986. P.5214–5220.

[5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Т.5. М., 1964.

[6] Самойлович А.Г. Термодинамика и статистическая физика. М.,1955.

УДК 621.373.43:537.523

Чигінь В.І.

ДУ "Львівська політехніка", кафедра теплогазопостачання та вентиляції

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ І МОДЕЛЮВАННЯ СТРУМОВИХ ІМПУЛЬСІВ ВІД'ЄМНОЇ КОРОНИ У ПОТОЦІ АРГОНУ ТА АЗОТУ ІЗ ЕЛЕКТРОВІД'ЄМНИМИ ДОМІШКАМИ

Експериментально досліджені особливості пульсуючої від'ємної корони в потоках аргону та азоту із домішкою кисню в області об'ємних концентрацій від $2 \cdot 10^{-3}$ до 21 %. Виміряно залежності основних параметрів імпульсів від концентрації і швидкості газу при атмосферному тиску. Проведено детальне моделювання нерівноважних процесів у розряді на основі розв'язання рівнянь неперервності для зарядів і рівняння Пуассона для електричного поля. Вперше отримано числово вторинні осциляції струму корони, пояснено їх природу і двоякий характер залежностей частоти основних імпульсів від концентрації електровід'ємних домішок.

Experimental investigation and modeling of negative corona current pulses in flow of argon and nytrogen with electronegative admixtures, by Chyhin V. **The experimental investigations of the negative pulsing corona features in flow of argon and nitrogen with oxygen admixture ($2 \cdot 10^{-3}$…21 %) have been carried out. There were measured the dependences of the main pulse parameters on the concentration and gas velocity at an ambient pressure. The detailed simulations of the unequilibrium processes in the corona discharge using the solutions of continuity equations for charges and the Poisson's equation for electric field have been performed. For the first time the numerical model of the current pulse secondary oscillations has been obtained, their nature and the double character of main corona pulse frequence dependences on the electronegative admixture concentration has been explained.**