

Л.В. Дехтярук, І.Ю. Проценко

## Термоелектричні ефекти у багатошарових полікристалічних структурах

Сумський державний університет, вул.Р.-Корсакова, 2, м. Суми, 40007, Україна, E-mail: [protsenko@aph.sumdu.edu.ua](mailto:protsenko@aph.sumdu.edu.ua)

У рамках модифікованої моделі Маядаса і Шацкеса теоретично проаналізовано коефіцієнти термо-е.р.с.  $S$  та Пельтьє  $\Pi$  у мультишарі (МШ), який складається з полікристалічних шарів металу різної товщини ( $d_i \neq d_j$ ) та ступеня чистоти ( $l_i \neq l_j$ ). Отримано точні та асимптотичні вирази для граничних значень параметра  $k_i = d_i / l_i$  ( $l_i$  – довжина вільного пробігу носіїв заряду) для термоелектричних коефіцієнтів. Передбачено їх немонотонну залежність від відношення товщин сусідніх шарів металу, чутливу до характеру взаємодії носіїв заряду з інтерфейсами мультишару. Проведений докладний числовий розрахунок для величини термо-е.р.с. при довільних значеннях параметрів, які описують об'ємну та інтерфейсну релаксацію носіїв заряду.

**Ключові слова:** мультишар, термоелектричні коефіцієнти, модель Маядаса та Шацкеса, інтерфейси, ймовірності дзеркального розсіювання та тунелювання носіїв заряду.

Стаття поступила до редакції 16.05.2005; прийнята до друку 15.11.2005.

В останні роки транспортні явища в мультишарах (МШ) – періодичних структурах, які складаються із чергуючихся шарів різних металів, широко вивчаються як експериментально так і теоретично. Інтерес до таких систем обумовлений у значній мірі тим, що прилади, які використовуються у мікроелектроніці досить часто являються багатошаровими структурами. З іншого боку, комбінуючи метали з різними електрофізичними характеристиками можна отримати нові провідники з принципово новими фізичними властивостями, які не можуть бути реалізовані в однорідних провідниках. Із фундаментальної точки зору дослідження розмірних транспортних ефектів у мультишарах дозволяє отримати докладну інформацію щодо взаємодії електронів з межами поділу шарів металу у багатошарових плівкових зразках.

У даній роботі в рамках модифікованої моделі, яка була запропонована Маядасом і Шацкесом [1] теоретично проаналізовано термоелектричні коефіцієнти у багатошаровій системі з полікристалічною структурою. Отримано їх точні та асимптотичні (для товстих і тонких у порівнянні з довжиною вільного пробігу електронів, шарів металу) вирази, при довільному співвідношенні між товщинами сусідніх шарів, довільному ступені чистоти зразка і довільному характері розсіювання носіїв заряду на межах поділу шарів металу і міжкристалічних межах. Проведено докладний числовий розрахунок коефіцієнта термо-е.р.с. для

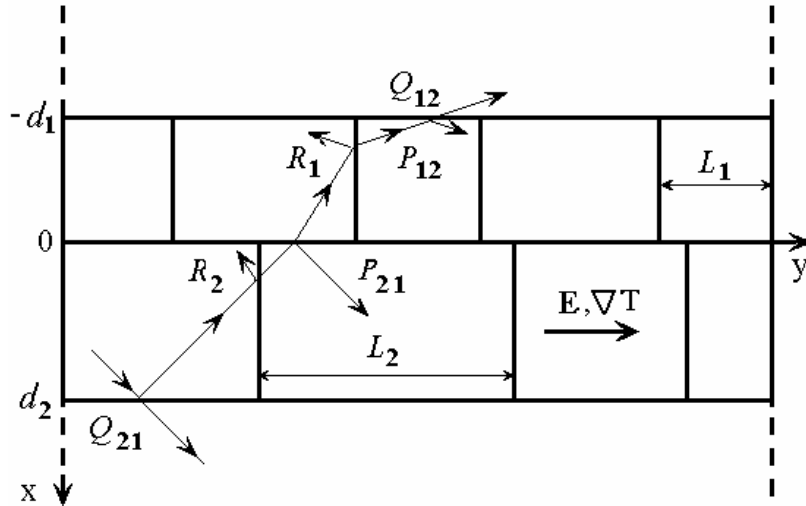
широкого інтервалу товщин шарів при різних значеннях параметрів, які характеризують структуру зразка і взаємодію електронів з інтерфейсами мультишару.

Розглянемо періодичну багатошарову структуру (рис. 1), яка складається з “нескінченної” кількості полікристалічних шарів металу, що чергуються, різної товщини ( $d_i \neq d_j$ ) і ступеня чистоти ( $l_i \neq l_j$ ), елементом періодичності якої являється бішар (подвійний шар) товщиною  $d = d_1 + d_2$ . Будемо вважати, що нормаль до меж поділу шарів металу паралельна до осі  $X$ , а їх розміри у напрямку осей  $Y$  і  $Z$  “нескінченні”, так що рух носіїв заряду в площині  $YZ$  нічим не відрізняється від їх руху у безмежовому металі. Оскільки елементом періодичності МШ являється бішар, то наша задача зводиться до розрахунку поздовжніх термоелектричних коефіцієнтів у двошаровій плівці з періодичними граничними умовами.

Враховуючи простий зв'язок між коефіцієнтом термо-е.р.с.  $S$  і коефіцієнтом Пельтьє  $\Pi = ST$ , подалі ми проаналізуємо лише коефіцієнт термо-е.р.с., який може бути визначений наступним чином [2]:

$$S = - \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \left\{ \frac{d \ln \sigma}{d \ln \epsilon} \right\}_{\epsilon=\epsilon_F}, \quad (1)$$

де  $e$  – заряд електрона,  $\epsilon$  і  $\epsilon_F$  – його енергія та енергія носія заряду на поверхні Фермі,  $k_B$  – стала



**Рис. 1.** Модель багатошарової плівки яка складається із полікристалічних шарів металу різної товщини ( $d_i \neq d_j$ ) та ступеня чистоти ( $l_i \neq l_j$ ). Ламаною лінією схематично показано можливу траєкторію руху носія заряду.

Больцмана,  $T$  – температура,  $\sigma$  – коефіцієнт питомої електропровідності багатошарового зразка з полікристалічною структурою. У випадку квадратичного та ізотропного закону дисперсії провідність мультишару може бути визначена наступним чином [3]:

$$\sigma = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^2 d_i \sigma_{0i} \Phi_i, \quad (2)$$

де  $d_i$  – товщина  $i$ -го шару бішару,  $\sigma_{0i}$  – коефіцієнт питомої провідності безмежового монокристалічного зразка, час релаксації електронів в якому  $\tau_{0i}$ . Розмірна функція  $\Phi_i$ , яка визначає вплив розмірів шарів на коефіцієнт термо-е.р.с, має наступний вигляд:

$$\Phi_i = T(\alpha_i) - \langle G_i \rangle, \quad (3)$$

$$T(\alpha_i) = 1 - \frac{3}{2} \alpha_i + 3\alpha_i^2 - 3\alpha_i^3 \ln \left( 1 + \frac{1}{\alpha_i} \right) \cong \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} \alpha_i + 3\alpha_i^2, & \alpha_i \ll 1, \\ \frac{3}{4\alpha_i} - \frac{3}{5\alpha_i^2}, & \alpha_i \gg 1, \end{cases} \quad (4)$$

$$G_i = 1 - \frac{1}{\Delta} \{ (1 + P_{ij} E_i)(1 + P_{ji} E_j) - Q_{ij} Q_{ji} E_i E_j \}. \quad (5)$$

$$\cdot \{ C_i (1 - P_{ji} E_j) + Q_{ji} \tau_{ji} E_j C_j \} \cong 1 - \frac{A}{\Delta} \frac{B_i}{\Delta},$$

$$C_i = P_{ij} (1 - E_i) + Q_{ji} \tau_{ji} (1 - E_j),$$

$$\Delta = 1 - P_{ij}^2 E_i^2 - P_{ji}^2 E_j^2 - 2Q_{ij} Q_{ji} E_i E_j + (Q_{ij} Q_{ji} - P_{ij} P_{ji})^2 E_i^2 E_j^2,$$

$$E_i = \exp \left\{ -\frac{k_i H_i}{x} \right\}, \quad k_i = \frac{d_i}{l_i},$$

$$H_i = 1 + \frac{\alpha_i}{\cos \varphi \sqrt{1 - x^2}}, \quad \tau_{ji} = \frac{\tau_{0j}}{\tau_{0i}} \frac{H_i}{H_j} \equiv \tau_{0ji} H_{i,j}.$$

Кутовими дужками у формулі (3) позначено інтегрування по змінним  $x$  та  $\varphi$ , тобто

$$\langle \dots \rangle = \frac{6}{\pi} \frac{1}{k_i} \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi \int_0^1 dx \frac{(x - x^3)(1 - E_i)}{H_i^2} \left\{ \dots \right\}. \quad (6)$$

Тут  $P_{ij} = \text{const}$  – ймовірність дзеркального розсіювання носія заряду на межі поділу між  $i$ -м та  $j$ -м шарами металу [4,5],  $Q_{ji} = \text{const}$  – ймовірність тунелювання електрона без розсіювання з  $j$ -го шару в  $i$ -й, так що  $P_{ij} + Q_{ji} \leq 1$ , [4,5]. Зерномежовий параметр у теорії Маядаса і Шацкеса  $\alpha_i = \frac{l_i}{L_i} \frac{R_i}{1 - R_i}$  з

одного боку визначає структуру зразка у залежності від знаку нерівності між середнім розміром кристалітів  $L_i$  у площині шару металу і довжиною вільного пробігу електронів  $l_i$ , з іншого – характер взаємодії носіїв заряду з міжкристалічними межами, оскільки  $R_i = \text{const}$  і визначає ймовірність розсіювання носіїв заряду на межі зерна.

Якщо мультишар складається з товстих ( $k_i \gg 1$ ) або тонких ( $k_i \ll 1$ ) шарів металу, то для розмірної функції  $\Phi_i$  можна отримати наступні наближенні вирази [3]:

$$\Phi_i = T(\alpha_i) - \frac{3}{8k_i} \{ (1 - P_{ij}) \Gamma_{1,i} - Q_{ji} \tau_{0ji} \Gamma_{2,i} \}, \quad k_i \gg 1, \quad (7)$$

$$\Phi_i \equiv \frac{3}{4} \frac{(1+P_{ij})(1-P_{ji}) + Q_{ij}Q_{ji} + 2Q_{ji}d_{ji}}{(1-P_{ij})(1-P_{ji}) - Q_{ij}Q_{ji}} k_i \begin{cases} \ln \frac{1}{k_i}, & \alpha_i \leq k_i, \\ \ln \frac{1}{k_i} - \frac{4}{\pi} \alpha_i, & k_i < \alpha_i << 1, \\ \ln \frac{1}{\alpha_i k_i}, & 1 < \alpha_i << \frac{1}{k_i}, \end{cases} \quad (8)$$

де

$$\Gamma_{1,i} = 1 - \frac{32}{3\pi} \alpha_i + 12\alpha_i^2 + \frac{16}{\pi} \left\{ 5 - (4 - 5\alpha_i^2) I_i \right\} \alpha_i^3 - 40\alpha_i^4, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{2,i} = 1 - \frac{16}{3\pi} \left\{ \alpha_i + \alpha_j - \frac{3\pi}{4} (\alpha_i^2 + \alpha_i \alpha_j + \alpha_j^2) - \right. \\ \left. - 3(\alpha_i^3 + \alpha_i^2 \alpha_j + \alpha_i \alpha_j^2 + \alpha_j^3) + \right. \\ \left. + \frac{3\pi}{2} (\alpha_i^4 + \alpha_i^3 \alpha_j + \alpha_i^2 \alpha_j^2 + \alpha_i \alpha_j^3 + \alpha_j^4) + \right. \\ \left. + \frac{3}{\alpha_i - \alpha_j} [\alpha_i^4 (1 - \alpha_i^2) I_i - \alpha_j^4 (1 - \alpha_j^2) I_j] \right\}, \quad (10) \end{aligned}$$

$$I_i = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{1-\alpha_i^2}} \ln \frac{1+\sqrt{1-\alpha_i^2}}{\alpha_i}, & \alpha_i \leq 1, \\ \frac{\arccos \left( \frac{1}{\alpha_i} \right)}{\sqrt{\alpha_i^2 - 1}}, & \alpha_i > 1, \end{cases} \quad (11)$$

$d_{j,i} = \frac{d_j}{d_i}$  – відношення товщин сусідніх шарів металу.

Добре відомо, що термоелектричні коефіцієнти напівпровідникових зразків досить чутливі до енергетичної залежності часу релаксації носіїв заряду [6]. По цій причині подалі при теоретичному і числовому розрахунках величини  $S$  багатошарової системи будемо використовувати модель, в якій час релаксації електронів залежить від енергії наступним чином [6]:

$$\tau_{0i} = \tau_i^* \left\{ \frac{\epsilon_i}{\epsilon_F} \right\}^{\gamma_i}, \quad (12)$$

де величина  $\tau_i^* = \text{const}$  і не залежить від енергії, а  $\gamma_i$  – деяка стала величина, числове значення якої залежить від переважаючого механізму розсіювання електронів. Так, зокрема, якщо  $\gamma_i = -1/2$  то основним механізмом розсіювання носіїв заряду є їх розсіювання на акустичних фононах,  $\gamma_i = 0$  у випадку розсіювання електронів на незаряджених дефектах кристалічної решітки,  $\gamma_i = 3/2$  якщо носії заряду розсіюються на іонізованих атомах домішків.

Підставляючи співвідношення (2) у формулу (1) отримаємо загальний аналітичний вираз для коефіцієнта термо-е.р.с. багатошарової плівки з полікристалічною структурою:

$$S = - \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i - U_i \left( \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_i} - \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_i} \right) - U_j \left( \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln k_j} - \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \alpha_j} \right) - (\gamma_i - \gamma_j) \frac{\partial \ln \Phi_i}{\partial \ln \tau_{0j,i}} \right\}. \quad (13)$$

Тут  $\tau_{0j,i} = \tau_{0j} / \tau_{0i}$ , а функція  $D_{j,i}$  має наступний вигляд:

$$D_{j,i} = \frac{d_j \sigma_{0j} \Phi_j}{d_i \sigma_{0i} \Phi_i}. \quad (14)$$

Особливості зонної енергетичної структури мультишару характеризуються параметрами  $V$  та  $U_i$ , які дорівнюють [2,7]:

$$V = \left\{ \frac{\partial \ln A}{\partial \ln \epsilon} \right\}_{\epsilon=\mu},$$

$$U_i = \left\{ \frac{\partial \ln l_i}{\partial \ln \epsilon} \right\}_{\epsilon=\epsilon_F} = \left\{ \frac{\partial \ln v_i}{\partial \ln \epsilon} \right\}_{\epsilon=\epsilon_F} + \gamma_i = U_{vi} + \gamma_i, \quad (15)$$

де  $A$  – площа поверхні Фермі.

Підставляючи формулу (3) у співвідношення (13) отримаємо точний аналітичний вираз для коефіцієнта термо-е.р.с. у рамках моделі Маядаса і Шацкеса:

$$S = - \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \{ V + U_i - M_i \}. \quad (16)$$

Тут

$$M_i = \frac{1}{\Phi_i} \left[ U_i N_i + U_j N_i^* + (\gamma_i - \gamma_j) \tilde{N}_i \right]. \quad (17)$$

$$N_i = T^*(\alpha_i) +$$

$$+ \left\langle G_i - \frac{k_i E_i}{x} \left\{ G_i (1 - E_i)^{-1} - \Theta_i \right\} - \frac{H_i - 1}{H_i} \left\{ \Lambda_i + 2G_i \right\} \right\rangle, \quad (18)$$

$$N_i^* = \left\langle \frac{H_j - 1}{H_j} \Lambda_i - \frac{k_j E_j}{x} \Theta_i^* \right\rangle, \quad \tilde{N}_i = \langle \Lambda_i \rangle, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} T^*(\alpha_i) &= \frac{3}{2} \alpha_i - \frac{3\alpha_i^2(2+3\alpha_i)}{1+\alpha_i} + 9\alpha_i^3 \ln \left( 1 + \frac{1}{\alpha_i} \right) \equiv \\ &\equiv \begin{cases} \frac{3}{2} \alpha_i - 6\alpha_i^2, & \alpha_i << 1, \\ \frac{3}{4\alpha_i} - \frac{6}{5\alpha_i^2}, & \alpha_i >> 1, \end{cases} \quad (20) \end{aligned}$$

$$\Theta_i = \{P_{ij}(A - B_i) + (Q_{ij}Q_{ji} - P_{ij}P_{ji})(A + B_i)E_j\} \times \Delta^{-1} - B_i \Xi_i, \quad (21)$$

$$\Theta_i^* = \{A((Q_{ij}Q_{ji} - P_{ij}P_{ji})(1 - E_i) - Q_{ji}\tau_{ji}) + B_i(P_{ij} - (Q_{ij}Q_{ji} - P_{ij}P_{ji})E_i)\} \Delta^{-1} + B_i \Xi_j, \quad (22)$$

$$\Xi_i = 2A \{P_{ij}P_{ji}E_i + Q_{ij}Q_{ji}E_j - (Q_{ij}Q_{ji} - P_{ij}P_{ji})^2 E_i E_j\} \Delta^{-2}, \quad (23)$$

$$A_i = Q_{ji}\tau_{ji}(1 - E_j) \quad A \quad \Delta^{-1}.$$

де  $A$  і  $B_i$  у формулах (21)-(23) визначенні співвідношенням (5).

Якщо межі поділу шарів металу дзеркальним чином розсіюють носії заряду ( $P_{ij} + Q_{ji} = 1$ ), то термо-е.р.с. МШ дорівнює

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{ji}} \left\{ V + U_i - U_j \frac{T^*(\alpha_i)}{T(\alpha_i)} \right\} \quad (24)$$

і у випадку виконання рівностей  $d_i = d_j$ ,  $l_i = l_j$ ,  $\alpha_i = \alpha_j$ ,  $\sigma_{0i} = \sigma_{0j}$ ,  $S_{0i} = S_{0j}$ ,  $U_i = U_j$  мультишар формально можна розглядати як масивний полікристалічний зразок, оскільки їхні значення термо-е.р.с. збігаються.

Якщо ж межі поділу шарів МШ абсолютно не прозорі для носіїв заряду ( $Q_{ij} = Q_{ji} = 0$ ), то розмірні функції  $\Phi_i$  у кожному із шарів металу багатошарового зразка не залежать від параметрів, які характеризують сусідній шар, і термо-е.р.с. МШ визначається наступною формулою:

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{ji}} \left\{ V + U_i - U_j \frac{N_i}{\Phi_i} \right\}. \quad (25)$$

Тут  $\Phi_i$  та  $N_i$  визначаються формулами (3) та (18) у яких функції  $G_i$  і  $\Theta_i$  мають наступний вигляд:

$$G_i = \frac{1 - P_{ij}}{1 - P_{ij}E_i}, \quad (26)$$

$$\Theta_i = \frac{P_{ij}(1 - P_{ij})}{(1 - P_{ij}E_i)^2}. \quad (27)$$

При виконанні рівностей  $d_i = d_j$ ,  $l_i = l_j$ ,  $\alpha_i = \alpha_j$ ,  $\sigma_{0i} = \sigma_{0j}$ ,  $S_{0i} = S_{0j}$ ,  $U_i = U_j$ ,  $P_{ij} = P_{ji}$  формула (25) співпадає з відповідною формулою для тонкої плівки товщиною  $d_i = d_j = d$ , відповідно, мультишар формально можна розглядати як одношаровий полікристалічний шар металу, зовнішні межі якого розсіюють електрони із ймовірністю  $P$ .

У випадку, коли носії заряду з однаковою ймовірністю тунелюють у сусідні шари металу ( $Q_{ij} = Q_{ji} = Q$ ) і виконуються рівності  $l_i = l_j$ ,  $\alpha_i = \alpha_j$ ,  $\sigma_{0i} = \sigma_{0j}$ ,  $S_{0i} = S_{0j}$ ,  $U_i = U_j$ ,  $P_{ij} = P_{ji} = P$  мультишар знову формально можна

розглядати як полікристалічний шар металу, однак, у даному випадку його зовнішні межі розсіюють електрони із ймовірністю  $P + Q$  [5].

Таким чином, ми одержали загальний аналітичний вираз для коефіцієнта термо-е.р.с. (16) багатошарового зразка. Інтеграли, що входять у формулу (16) не можуть бути виражені через елементарні функції і тому подальший аналіз термо-е.р.с. можливий лише на основі числових розрахунків. Проте при великих і малих значеннях параметрів  $k_i$  та  $\alpha_i$  для величини  $S$  можна отримати досить прості асимптотичні формули які значно спрощують порівняння теоретичних та експериментальних результатів.

Якщо товщина шарів  $d_i$  з яких складається багатошарова структура значно більша довжини вільного пробігу електронів  $l_i$  в них ( $k_i \gg 1$ ), то термо-е.р.с. для довільних значень  $P_{ij}$ ,  $Q_{ij}$  і  $\alpha_i$  визначається формулою (16), в якій функції  $N_i$ ,  $N_i^*$ ,  $\tilde{N}_i$  можуть бути записані у вигляді:

$$N_i = T^*(\alpha_i) + \frac{3\alpha_i}{8\pi k_i} \left\{ (1 - P_{ij}) \Gamma_{3,i} - Q_{ji} \tau_{0ji} \Gamma_{4,i} \right\}, \quad (28)$$

$$N_i^* = \frac{\alpha_j}{\pi k_i} Q_{ji} \tau_{0ji} \Gamma_{5,i}, \quad \tilde{N}_i = \frac{3\alpha_j}{8 k_i} Q_{ji} \tau_{0ji} \Gamma_{2,i}. \quad (29)$$

Тут

$$\Gamma_{3,i} = 1 - \frac{64}{3\pi} \alpha_i + 36\alpha_i^2 + \frac{16}{\pi} \left( 25 - (16 - 25\alpha_i^2) I_i - \frac{1 - \alpha_i^2 I_i}{1 - \alpha_i^2} \right) \alpha_i^3 - 200\alpha_i^4, \quad (30)$$

$$\Gamma_{4,i} = 1 - \frac{16}{\pi} \alpha_i + 24\alpha_i^2 + \frac{8}{\pi} \left( 30 - 10(2 - 3\alpha_i^2) I_i - \frac{1 - \alpha_i^2 I_i}{1 - \alpha_i^2} \right) \alpha_i^3 - 120\alpha_i^4, \quad (31)$$

$$\Gamma_{5,i} = 1 - \frac{3\pi}{4} (2\alpha_i + \alpha_j) + \frac{3\pi}{2} \{ 4\alpha_i^3 + 3\alpha_i^2 \alpha_j + 2\alpha_i \alpha_j^2 + \alpha_j^3 \} \cdot \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \frac{1 - (1 - \alpha_i^2) I_i}{\alpha_i} \right\} - \frac{3\alpha_i^4}{\alpha_i(\alpha_i - \alpha_j)} \times \left\{ 1 + \frac{\alpha_j(1 - \alpha_i^2) I_i - \alpha_i(1 - \alpha_j^2) I_j}{\alpha_i - \alpha_j} \right\} - \frac{3\alpha_j^3 I_i}{\alpha_j - \alpha_i}. \quad (32)$$

Якщо полікристалічні шари металу складаються з кристалітів шириною  $L_i$ , розміри яких значно більші за довжину вільного пробігу електронів  $l_i$  ( $L_i \gg l_i$ ) або міжкристалічні межі майже прозорі для носіїв заряду ( $R_i \ll 1$ ), то параметр  $\alpha_i \ll 1$  і мультишар має крупнозернисту структуру. У випадку, коли шари МШ мають дрібнозернисту структуру ( $L_i \ll l_i$ ) або межі зерен майже не прозорі для

електронів ( $1 - R_i \ll 1$ ), то  $\alpha_i \gg 1$ . Для цих граничних випадків параметра  $\alpha_i$ , коефіцієнт термо-е.р.с. мультишару при довільному співвідношенні

між товщинами шарів металу може бути записаний у вигляді:

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i \left( 1 - \frac{3}{2} \alpha_i \right) - \frac{3}{8 k_i} \left[ U_i (1 - P_{i,j}) \left( 1 - \frac{12}{\pi} \alpha_i \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - Q_{j,i} \tau_{0,j} \left( U_i \left( 1 - \frac{16}{3\pi} \left( \alpha_j + \frac{\alpha_i}{4} \right) \right) + U_j \frac{16}{3\pi} \alpha_j + (\gamma_i - \gamma_j) \left( 1 - \frac{16}{3\pi} \left( \alpha_j + \frac{\alpha_i}{8} \right) \right) \right] \right\} \alpha_i \ll 1, \quad (33)$$

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i \left[ \frac{4}{5\alpha_i} - \frac{3}{4k_i \alpha_i^2} (1 - P_{i,j}) \left( 1 - \frac{5}{\pi \alpha_i} \right) \right] + \frac{Q_{j,i} \tau_{0,i,j}}{2k_i \alpha_j} \left[ U_i \left( 1 + \frac{6}{5\alpha_i} - \frac{256}{105\pi} \frac{\alpha_i + \alpha_j}{\alpha_i \alpha_j} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - U_j \left( 1 + \frac{4}{5\alpha_i} - \frac{256}{105\pi} \frac{2\alpha_i + \alpha_j}{\alpha_i \alpha_j} \right) \right] - (\gamma_i - \gamma_j) \left( 1 + \frac{4}{5\alpha_i} - \frac{256}{105\pi} \frac{\alpha_i + \alpha_j}{\alpha_i \alpha_j} \right) \right\}, \quad \alpha_i \gg 1. \quad (34)$$

Якщо шари металу МШ мають однакову структуру ( $\alpha_i = \alpha_j$ ) і у кожному з них виконується

рівність ( $U_i = U_j$ ), то формули (33) та (34) значно спрощуються і набувають вигляду:

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i \left( 1 - \frac{3}{2} \alpha_i - \frac{3(1 - P_{i,j} - Q_{j,i} \tau_{0,i,j})}{8 k_i} \left( 1 - \frac{12}{\pi} \alpha_i \right) \right) \right\} \alpha_i \ll 1. \quad (35)$$

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i \left[ \frac{4}{5\alpha_i} - \frac{3(1 - P_{i,j} - Q_{j,i} \tau_{0,i,j})}{8 k_i \alpha_i^2} \left( 1 - \frac{5}{\pi \alpha_i} \right) \right] \right\}, \quad \alpha_i \gg 1. \quad (36)$$

У випадку, коли мультишар складається з тонких шарів металу ( $k_i \ll 1$ ), то для коефіцієнта термо-е.р.с. можуть бути отримані наступні наближені вирази при довільному співвідношенні між товщинами шарів МШ:

$$S \cong -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i \ln^{-1} \frac{1}{k_i} \right\}, \quad \alpha_i \leq k_i, \quad (37)$$

$$S \cong -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V + U_i \frac{1 - (4/\pi) \alpha_i}{\ln(1/k_i) - (4/\pi) \alpha_i} \right\}, \\ k_i < \alpha_i \ll 1, \quad (38)$$

$$S \cong -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e\epsilon_F} \sum_{i \neq j} \frac{1}{1 + D_{j,i}} \left\{ V - U_i \frac{3}{4\alpha_i^2} \ln^{-1} \left( \frac{1}{\alpha_i k_i} \right) \right\}, \\ 1 < \alpha_i \ll \frac{1}{k_i}. \quad (39)$$

Для проведення числового розрахунку коефіцієнт термо-е.р.с.  $S$  зручно записати у наступному вигляді:

$$\frac{S}{S_{0,1}} = \frac{1}{1 + D_{2,1}} \sum_{i \neq j} \left( \frac{V + U_i}{V + U_j} D_{i,j} \right)^{i-1} \left\{ 1 - \frac{M_i}{V + U_i} \right\}. \quad (40)$$

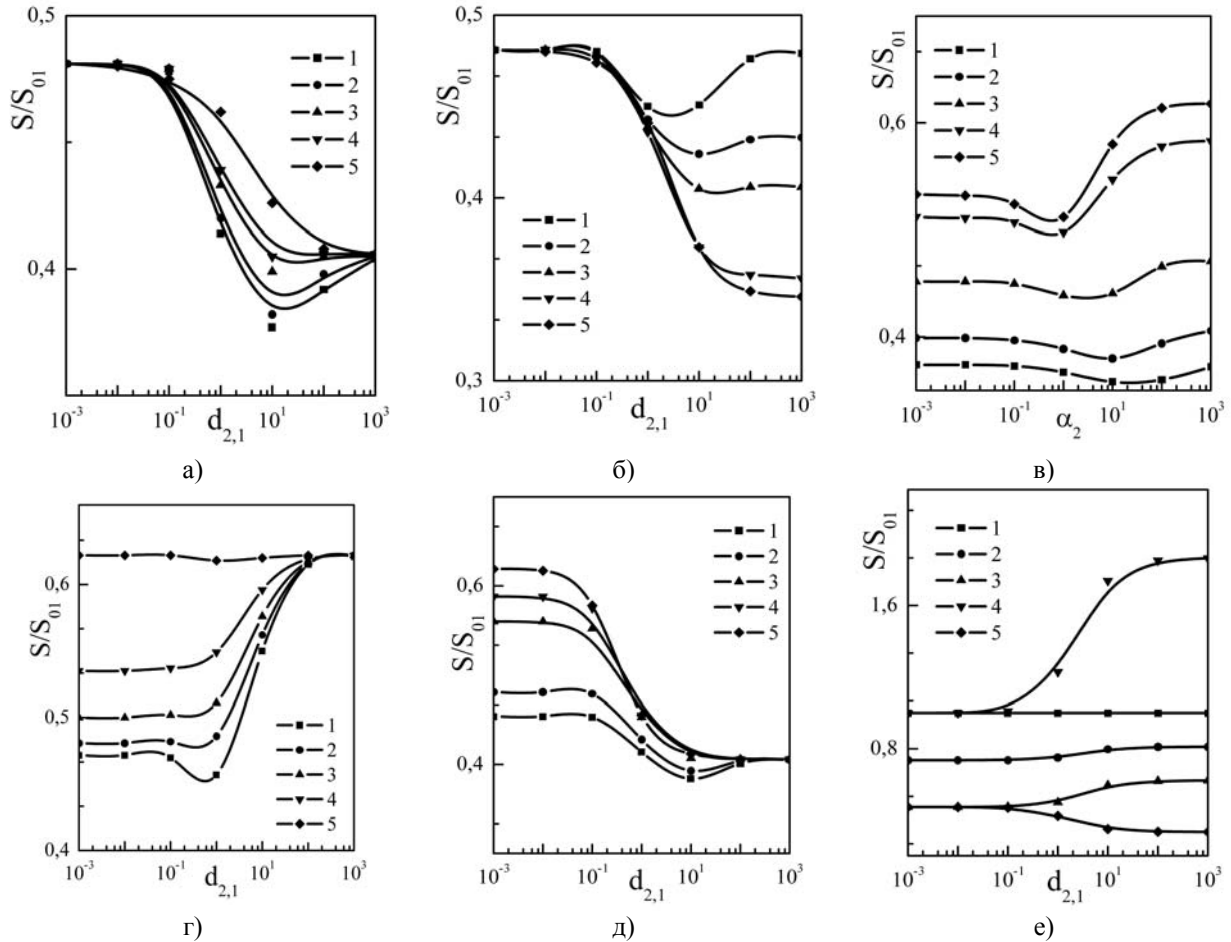
При виконанні нерівності  $d_{j,i} \ll 1$  формулу (40) наближено можна представити у вигляді:

$$S = S_{0,i} \left\{ 1 - \frac{M_i}{V + U_i} \right\} - \\ - D_{j,i} \left\{ S_{0,i} \left[ 1 - \frac{M_i}{V + U_i} \right] - S_{0,j} \left[ 1 - \frac{M_j}{V + U_j} \right] \right\}. \quad (41)$$

Звідси випливає, що

$$\frac{S}{S_{0,1}} \approx \begin{cases} 1 - \frac{M_1}{V + U_1}, & d_{2,1} \rightarrow 0, \\ \frac{S_{0,2}}{S_{0,1}} \left[ 1 - \frac{M_2}{V + U_2} \right], & d_{2,1} \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (42)$$

Криві наведені на рис. 2а-е, отримані числовим розрахунком за точною формулою (40) та ілюструють залежність коефіцієнта термо-е.р.с. МШ  $S/S_{0,1}$  від відношення товщин сусідніх шарів  $d_{2,1}$  при різних значеннях параметрів, які характеризують багатшарову плівку з полікристалічною структурою ( $k_2 = k_1 d_{2,1} l_{1,2}$ ,  $l_{1,2} = l_1 / l_2$ ). Отримані залежності показують, що коефіцієнт термо-е.р.с. в області малих значень  $d_{2,1} \ll 1$  практично не змінюється із зростанням відношення товщин сусідніх шарів МШ (рис. 2 а-д), із збільшенням відношення довжин вільного пробігу носіїв заряду  $l_{1,2}$  (рис. 2а) та зерномежового параметра  $\alpha_2$  (рис. 2 б, в). У цій



**Рис. 2.** Залежність коефіцієнта термо – е.р.с.  $S/S_{01}$  багатошарової полікристалічної плівки від відношення товщин шарів металу  $d_{2,1}$  та зерномежового параметра  $\alpha_2$  при таких значеннях параметрів:

- а)  $k_1 = 0.1$ ,  $Q_{ij} = Q_{ji} = 0.3$ ,  $P_{ij} = P_{ji} = 0.1$ ,  $\alpha_i = 1$ ,  $V = 1$   $U_{vi} = 0.5$ ,  $\gamma_1 = 1.5$   $\gamma_2 = 0.0$ ,  $1 - l_{1,2} = 0.05$ ,  $2 - l_{1,2} = 0.1$ ,  $3 - l_{1,2} = 0.5$ ,  $4 - l_{1,2} = 1$ ,  $5 - l_{1,2} = 10$ ;
- б)  $Q_{ij} = Q_{ji} = 0.3$ ,  $P_{ij} = P_{ji} = 0.1$ ,  $k_1 = 0.1$ ,  $\alpha_1 = 1$ ,  $l_{1,2} = 1$ ,  $V = 1$   $U_{vi} = 0.5$ ,  $\gamma_1 = 1.5$ ,  $\gamma_2 = 0.0$ ,  $1 - \alpha_2 = 0.1$ ,  $2 - \alpha_2 = 0.5$ ,  $3 - \alpha_2 = 1$ ,  $4 - \alpha_2 = 5$ ,  $5 - \alpha_2 = 10$ ;
- в)  $Q_{ij} = Q_{ji} = 0.3$ ,  $P_{ij} = P_{ji} = 0.1$ ,  $\alpha_1 = 1$ ,  $l_{1,2} = 1$ ,  $V = 1$   $U_{vi} = 0.5$ ,  $d_{2,1} = 1.0$ ,  $\gamma_1 = 1.5$ ,  $\gamma_2 = 0.0$ ,  $1 - k_1 = 0.001$ ,  $2 - k_1 = 0.01$ ,  $3 - k_1 = 0.1$ ,  $4 - k_1 = 1$ ,  $5 - k_1 = 10$ .
- г)  $k_1 = 0.1$ ,  $P_{ij} = P_{ji} = 0.1$ ,  $\alpha_i = 1$ ,  $l_{1,2} = 0.5$ ,  $V = 1$   $U_{vi} = 0.5$ ,  $\gamma_i = 1.5$   $1 - Q_{ij} = Q_{ji} = 0.0$ ,  $2 - Q_{ij} = Q_{ji} = 0.3$ ,  $3 - Q_{ij} = Q_{ji} = 0.5$ ,  $4 - Q_{ij} = P_{ji} = 0.7$ ;  $5 - Q_{ij} = Q_{ji} = 0.9$ ;
- д)  $Q_{ij} = Q_{ji} = 0.3$ ,  $P_{ij} = P_{ji} = 0.1$ ,  $\alpha_i = 1$ ,  $l_{1,2} = 0.3$ ,  $V = 1$   $U_{vi} = 0.5$ ,  $\gamma_1 = 1.5$ ,  $\gamma_2 = 0.0$ ,  $1 - k_1 = 0.05$ ,  $2 - k_1 = 0.1$ ,  $3 - k_1 = 0.5$ ,  $4 - k_1 = 1$ ,  $5 - k_1 = 10$ ;
- е)  $Q_{ij} = Q_{ji} = 0.1$ ,  $P_{ij} = P_{ji} = 0.1$ ,  $k_1 = 0.1$ ,  $\alpha_i = 1$ ,  $l_{1,2} = 3$ ,  $V = 1$   $U_{vi} = 0.5$ ,  $1 - \gamma_i = -1/2$ ,  $2 - \gamma_i = 0.0$ ,  $3 - \gamma_i = 3/2$ ,  $4 - \gamma_i = -1/2$ ,  $\gamma_2 = 3/2$ ,  $5 - \gamma_i = 3/2$ ,  $\gamma_2 = -1/2$ .

області товщин, поведінка  $S(d_{2,1})$  визначається характером взаємодії електронів з межами поділу шарів металу. При зростанні періоду мультишару, коли товщини шарів бiшару стають співмірними  $d_2 \sim d_1$ , на залежності  $S(d_{2,1})$  появляється мінімум, який пов'язаний з конкуренцією внесків у величину коефіцієнта термо-е.р.с. об'ємного та інтерфейсного розсіювання носіїв заряду, оскільки із збільшенням

ймовірності дзеркального тунелювання електронів у сусідній шар металу мінімум вироджується і  $S(d_{2,1})$  монотонно змінюється зі зміною  $d_{2,1}$  (рис. 2 г).

При подальшому зростанні відношення товщин сусідніх шарів металу  $d_{2,1} \gg 1$ , коефіцієнт термо-е.р.с.  $S(d_{2,1})$  асимптотично прямує до об'ємного значення термо-е.р.с. шару металу з індексом „2”

(рис. 2 д). Зауважимо, оскільки величину  $S$  МШ ми нормуємо на об'ємне значення  $S_{01}$ , то у цьому випадку, як витікає із формули (42), при  $d_{2,1} \rightarrow \infty$ ,  $\frac{S}{S_{01}} \rightarrow \frac{S_{02}}{S_{01}} \left( 1 - \frac{U_2}{V + U_2} \frac{T^*(\alpha_2)}{T(\alpha_2)} \right)$ . Тут ми врахували, що при  $d_{2,1} \rightarrow \infty$  нормована товщина  $k_2 \rightarrow \infty$ .

Рис. 2 - е ілюструє поведінку коефіцієнта термо-е.р.с. МШ зі зміною  $d_{2,1}$  при різних значеннях параметра  $\gamma_i$ , який визначає переважаючий механізм розсіювання носіїв заряду в об'ємі МШ. Так, зокрема, при  $\gamma_i = -1/2$  величина термо-е.р.с. співпадає зі своїм об'ємним значенням на всьому інтервалі зміни  $d_{2,1}$ . Це обумовлено тим, що у цьому випадку основним об'ємним механізмом розсіювання електронів являється їх розсіювання на акустичних фононах і довжина вільного пробігу носіїв заряду є сталою величиною [8].

Таким чином, ми проаналізували залежність

термоелектричних коефіцієнтів багат шарового полікристалічного зразка від відношення товщин шарів металу елемента періодичності МШ. При малих значеннях  $d_{2,1} \ll 1$  абсолютна величина термоелектричних коефіцієнтів визначається характером взаємодії носіїв заряду з інтерфейсами зразка. Із зростанням товщини шару  $d_2$ , так що  $d_2 \sim d_1$ , внаслідок дифузного характеру розсіювання електронів на межах поділу шарів металу, значення коефіцієнтів зменшується і при подальшому зростанні  $d_{2,1}$  асимптотично прямує до свого об'ємного значення.

Експериментальне дослідження розмірної залежності термоелектричних коефіцієнтів в мультишарі дозволяє отримати докладну інформацію не лише щодо взаємодії носіїв заряду з межами поділу шарів металу, а й інформацію про основний механізм розсіювання електронів в об'ємі МШ.

- [1] A.F. Mayadas, M. Shatzkes. Electrical-resistivity model for polycrystalline films: the case of arbitrary reflection at external surfaces // *Phys. Rev. B*, **1**(4), pp.1382-1389 (1970).
- [2] C.R. Tellier, A.J. Tosser. *Size effects in thin films*. Elsevir Scientific, Amsterdam – Oxford – New York, 310 p. (1982).
- [3] Л.В. Дехтярук, М. Маршалек, И.Е. Проценко, А.Н. Черноус. Температурный коэффициент сопротивления многослойных с поликристаллической структурой // *ФИП*, **2**(1), сс.55 – 63 (2004).
- [4] М.И. Каганов, В.Б. Фикс. К теории электромеханических сил в металлах // *ЖЭТФ*, **73**(2), сс.753-760 (1977).
- [5] В.В. Устинов. Вклад плоских дефектов в электросопротивление металла // *ФММ*, **49**(1), сс.31-38 (1980).
- [6] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников*. Наука, М. 688 с. (1990).
- [7] З.В. Стасюк, А.І. Лопатинський. Розмірні кінетичні явища в тонких плівках: класичні ефекти // *ФХТТ*, **2**(4), сс.521-542 (2001).
- [8] F. Khater, A. Seoud. Some transport coefficients of multilayer metallic film // *J.Appl.Phys.*, **64**(5), pp. 2495-2501 (1988).

L.V. Dekhtyaruk, I.Yu. Protsenko

## Thermoelectric Coefficient Multilayer Polycrystalline Films

2, Rymskogo-Korsakova Str., Sumy, 40007, Ukraine, E-mail: [protsenko@aph.sumdu.edu.ua](mailto:protsenko@aph.sumdu.edu.ua)

Exact and asymptotic expressions are derived for thermoelectric coefficient (TC) a multilayer polycrystalline films. TC non – monotonous dependence upon the thickness ratio of the layers is predicted, which is sensitive to the character of the electron – interlayer boundary interaction. A detailed numerical analysis of the TC is performed in a wide range of layer thicknesses with varying parameters describing the bulk and surface relaxation of the charge carriers.