И.И. Берил*, М.К. Болога*, С.И. Берил**

К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ СЛАБОПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ В ПОЛЕ ИНЖЕКТИРУЮЩИХ ЭЛЕКТРОДОВ (ЗАВИСИМОСТЬ ПОДВИЖНОСТИ)

*Институт прикладной физики АН РМ,
ул. Академией, 5, г. Кишинев, MD-2028, Республика Молдова, mbologa@phys.asm.md
**Приднестровский госуниверситет им. Т.Г. Шевченко,
ул. 25 Октября, 128, г. Тирасполь, Республика Молдова

Ранее [1] была получена зависимость концентрации свободных электронов слабопроводящей жидкости от напряженности электрического поля и температуры.

Концентрация свободных электронов практически не зависит от напряженности поля вплоть до предпробивных значений.

Функция распределения по энергиям электронов проводимости также не зависит от напряженности поля и при низких концентрациях примесных центров имеет максвелловский вид.

Обоснована [1] применимость методов физики твердого тела для расчета электрофизических характеристик слабопроводящих жидкостей с периодически расположенными атомарными примесями.

Нелинейность вольт-амперной характеристики жидкости можно объяснить зависимостью подвижности носителей тока от напряженности.

Оценка поляронного эффекта дает малое значение константы поляронной связи, определяемая энергией взаимодействия зонного электрона с фононами, вычисляется по теории возмущений и в случае слабой поляронной связи имеет вид [2]:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_1}\right)\frac{e^2\sqrt{m^*}}{\hbar^{\frac{3}{2}}\omega^{\frac{1}{2}}}, \tag{1}$$

где $\varepsilon_\infty, \varepsilon_1$ – диэлектрические проницаемости, определенные при высокой и низких частотах; e – заряд электрона; m^* – эффективная масса электрона, $\hbar$ – постоянная Планка, ω – частота колебаний фононов.

Для рафинированного подсолнечного масла ранее измеренные [3] $\varepsilon_\infty = 3{,}15\cdot\varepsilon_0$; $\varepsilon_1 = 3{,}5\cdot\varepsilon_0$

$$\frac{m^*}{m_e} = 1 + \frac{\alpha}{6}. \tag{2}$$

Из (1) и (2) для акустических фононов, дающих наибольший вклад в α, получим, что $m^* \cong m_e$, $\alpha \sim 5\cdot 10^{-16}$, то есть $\alpha \ll 1$. Столь малое значение α вызвано тем, что для сложных глицеридов жирных кислот, каковым является подсолнечное масло, молекулы имеют большой молекулярный вес, малый дипольный момент, и поляризация электроном такой молекулы ничтожно мала, то есть α практически равно 0. Безразмерная константа α равна отношению разности энергии полярона в поляронной зоне к энергии активации рассеивающих примесных центров $\alpha = \Delta E_n / \Delta E$, отсюда $\Delta E_n = \alpha \Delta E$ – малая величина.

Подвижность свободных электронов

$$\mu = \frac{e}{m_e} < \tau >, \tag{3}$$

где $< \tau >$ – усредненное распределение по энергиям время релаксации состояний электрона [4],

© Берил И.И., Болога М.К., Берил С.И., Электронная обработка материалов, 2008, № 5, С.37–41.

$$\frac{1}{\tau}=\sum_{\theta}(1-\cos\theta)W(\theta), \tag{4}$$

где θ – угол рассеяния на ионах примеси, $W(\theta)$ – вероятность перехода между состояниями электрона.

Вычислим матричный элемент перехода между состояниями электрона в зоне проводимости:

$$M_1=\int\psi_1(\xi_1)\hat{V}\psi_2(\xi_2)r^2dr\sin(\theta)d\theta d\varphi\Rightarrow,$$

где $\hat{V}=-eEx$; $\psi_1(\xi_1)=A'\Phi(-\xi_1)$; $\Phi(\xi_1)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^\infty\cos\left(\frac{u^3}{3}+\xi_1\right)du$ – функция Эйри; $\xi_1=\left(x+\frac{\varepsilon_1}{eE}\right)\left(\frac{2m_eeE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}$; $A'=\frac{(2m_e)^{\frac{1}{3}}}{\pi^{\frac{1}{2}}(Ee)^{\frac{1}{6}}\hbar^{\frac{2}{3}}}$; аналогично для $\psi_2(\xi_2)$.

$$\Rightarrow\frac{2A'eE}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^\pi\int\limits_0^{2\pi}r^3\sin^2(\theta)d\theta d\varphi dr\int\limits_0^\infty\cos\left(\frac{u^3}{3}-u\left(r\sin(\theta)\cos(\theta)+\frac{\varepsilon_1}{eE}\right)\left(\frac{2m_eeE}{\hbar^2}\right)\right)du\times$$

$$\times\int\limits_0^\infty\cos\left(\frac{u^3}{3}-u\left(r\sin(\theta)\cos(\theta)+\frac{\varepsilon_2}{eE}\right)\left(\frac{2m_eeE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\right)du.$$

Проинтегрируем по φ:

$$\Rightarrow-2A'eE\int\limits_0^\infty\int\limits_0^\pi r^3\sin^2(\theta)d\theta dr\int\limits_0^\infty J_1(2ubr\sin\theta)\left[-\cos^2\frac{u^3}{3}\sin(uba_1+uba_2)+\right.$$

$$\left.+2\sin\frac{u^3}{3}\cos\frac{u^3}{3}\cos(uba_1+uba_2)+\sin^2\frac{u^3}{3}\sin(uba_1+uba_2)\right]du\Rightarrow,$$

где $b=\left(\frac{2meE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}$; $a_1=\frac{\varepsilon_1}{eE}$; $a_2=\frac{\varepsilon_2}{eE}$; J_1 – функция Бесселя.

Проинтегрируем по θ и по u:

$$\Rightarrow 4A'eE\int\limits_0^\infty\left\{\left[\frac{\pi}{2br}-\frac{3\pi}{br}-\frac{1}{6br}\sum_{k=0}^\infty\frac{\left[(-1)^k+1\right]\beta^{k+1}}{(k+1)!}\left(\frac{1}{3}\right)^{-\frac{k+1}{3}}\Gamma\left(\frac{k+1}{3}\right)\times\cos(-2k+1)\frac{\pi}{6}\right]-\right.$$

$$-\frac{\pi}{2br}-\frac{\pi}{br}-\frac{1}{6(br)^2}\sum_{k=0}^\infty\frac{\left[(-1)^k+1\right]\left\{br+b(a_1+a_2)^{k+1}-\left(b_2-b(a_1+a_2)^{k+1}\right)\right\}}{(k+1)!}\times$$

$$\times\left(\frac{2}{3}\right)^{-\frac{k+1}{3}}\Gamma\left(\frac{k+1}{3}\right)\cos(-2k+1)\frac{\pi}{6}+\frac{\pi}{2br}+\frac{1}{3br}\sum_{k=0}^\infty\frac{\left[(-1)^k+1\right]\beta^{k+1}}{(k+1)!}\left(\frac{2}{3}\right)^{-\frac{k+1}{3}}\Gamma\left(\frac{k+1}{3}\right)\times$$

$$\times\sin(-2k+1)\frac{\pi}{6}\Big]-\frac{1}{12(br)^2}\sum_{k=0}^\infty\frac{\left[(-1)^k+1\right]\left\{br+b(a_1+a_2)^{k+2}-\left(b_2-b(a_1+a_2)^{k+2}\right)\right\}}{(k+2)!}\times$$

$$\left.\times\left(\frac{1}{3}\right)^{-\frac{k+1}{3}}\Gamma\left(\frac{k+1}{3}\right)\cos(-2k+1)\frac{\pi}{6}\right\}r^3dr\Rightarrow,$$

где $\beta=b(a_1+a_2)$.

При $\varepsilon_1 \sim \varepsilon_2 \sim \frac{3}{2}kT$, $a_1 \sim a_2 \sim 10^{-8} << 1$, $b \cong 10^8 >> 1$, $m = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг, $\hbar = 10^{-34}$ Дж·с, $E_1 = 3 \cdot 10^5$ В/м, $a_1 b \sim a_2 b \cong 1$, так как под всеми суммами присутствует множитель $b^k \left(a_1 + a_2\right)^{k+1}$ или $b^{k+1}\left(a_1 + a_2\right)^{k+2}$, то есть $\left(a_1 + a_2\right)$ всегда в степени на 1 больше, поэтому $b^k \left(a_1 + a_2\right)^{k+1} << 1$ или $b^{k+1}\left(a_1 + a_2\right)^{k+2} << 1$, значит, в сумме можно ограничиться $k = 0$, кроме того, в подынтегральном выражении отсутствует обрезающий множитель по *r*, поэтому при интегрировании по *r* необходимо ограничиться объемом с единичным радиусом:

$$\Rightarrow 4A'eE\int_0^\infty \left\{ \frac{\pi}{2br} - \frac{1}{3br}\sum_{k=0}^{3}\frac{\left[(-1)^k + 1\right]\beta^{k+1}}{(k+1)!}\left(\frac{1}{3}\right)^{-\frac{k+1}{3}}\Gamma\left(\frac{k+1}{3}\right)\times\right.$$

$$\times\cos(-2k+1)\frac{\pi}{6} - \frac{3\pi}{2b} - \frac{1}{b^3 r}\sum_{k=0}^{3}\frac{\left[(-1)^k + 1\right]\left\{b^{k+1}\left[r + \left(a_1 + a_2\right)\right]^{k+1} - b^{k+1}\left[r - \left(a_1 + a_2\right)^{k+1}\right]\right\}}{(k+1)!}\times$$

$$\times\left(\frac{2}{3}\right)^{-\frac{k+1}{3}}\Gamma\left(\frac{k+1}{3}\right)\cos(-2k+1)\frac{\pi}{6} + \frac{\pi}{2b} + \frac{1}{3b}\sum_{k=0}^{3}\frac{\left[(-1)^k + 1\right]\beta^{k+1}}{(k+1)!}\left(\frac{2}{3}\right)^{-\frac{k+1}{3}}\Gamma\left(\frac{k+1}{3}\right)\times$$

$$\times\sin(-2k+1)\frac{\pi}{6}\Bigg] - \frac{1}{12b^2 r}\sum_{k=0}^{3}\frac{\left[(-1)^k + 1\right]b^{k+2}\left\{\left[r + \left(a_1 + a_2\right)\right]^{k+1} + \left[r - \left(a_1 + a_2\right)\right]^{k+2}\right\}}{(k+2)!}\times$$

$$\left.\times\left(\frac{1}{3}\right)^{-\frac{k+1}{3}}\Gamma\left(\frac{k+1}{3}\right)\cos(-2k+1)\frac{\pi}{6}\right\} r^2 dr \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{4(2m)^{\frac{1}{3}} eE}{\sqrt{\pi}(eE)^{\frac{1}{6}}\hbar^{\frac{2}{3}}}\left[\frac{\pi\hbar^{\frac{2}{3}}}{6(2m)^{\frac{1}{3}}(eE)^{\frac{1}{3}}} - \frac{0{,}42\left(\varepsilon_1 + \varepsilon_2\right)}{eE} - 0{,}75\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{(eE)^3}\right] =$$

$$= a_1 (eE)^{\frac{1}{3}} - \frac{a_2\left(\varepsilon_1 + \varepsilon_1\right)}{(eE)^{\frac{1}{6}}} - \frac{a_3\left(\varepsilon_1 + \varepsilon_1\right)^3}{(eE)^{\frac{3}{2}}} = M_1. \qquad (5)$$

Вероятность перехода

$$W = \frac{2\pi}{\hbar}\left|M_1\right|^2 \delta\left(\varepsilon_k - \varepsilon_н - \Delta\varepsilon\right), \qquad (6)$$

где $\varepsilon_k, \varepsilon_н$ – конечная и начальная энергии электрона, $\Delta\varepsilon$ – разность энергий электрона:

$$\varepsilon_k - \varepsilon_н = \frac{p_1^2}{2m} - \frac{p_2^2\cos^2\nu}{2m} = \frac{p_1^2}{2m}\left(1 - \cos^2\nu\right),$$

где ν – угол рассеяния.

$$\frac{1}{\tau} = \int_\nu\int_p (1 - \cos\nu) W(p,\nu)\,\delta\left[\frac{p_1^2}{2}\left(1 - \cos^2\nu\right) - \Delta\varepsilon\right] d\nu dp \Rightarrow .$$

После интегрирования по ν получим:

$$\Rightarrow \frac{2\pi}{\hbar}\int_\nu \left(A_1\varepsilon + A_2\varepsilon^2 + A_3\varepsilon^3 + A_4\varepsilon^4 + A_5\varepsilon^6\right)\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}d\varepsilon \Rightarrow ,$$

где $A_1 = -8{,}21 a_1 a_2 (eE)^{\frac{1}{3}}$; $A_2 = \frac{0{,}587 a_2^2}{(2m)^2 (eE)^{\frac{1}{3}}}$; $A_3 = \frac{28{,}5 a_1 a_2}{eE}$; $A_4 = -6{,}42 a_2 a_3$;

$$A_5 = \frac{48,5a_3^2}{(eE)^3}.$$

$$\Rightarrow \frac{\pi(2m)^{\frac{1}{2}}}{\hbar}\left(\frac{2}{3}A_1\varepsilon^{\frac{3}{2}} + \frac{2}{5}A_2\varepsilon^{\frac{5}{2}} + \frac{2}{7}A_3\varepsilon^{\frac{7}{2}} + \frac{2}{9}A_4\varepsilon^{\frac{9}{2}} + \frac{2}{13}A_5\varepsilon^{\frac{13}{2}}\right) \Rightarrow,$$

так как $\varepsilon \sim 0,04$ эВ, то оценка $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6$ дает

$$A_1\varepsilon^{\frac{3}{2}} >> A_2\varepsilon^{\frac{5}{2}} >> A_3\varepsilon^{\frac{7}{2}} >> A_4\varepsilon^{\frac{9}{2}} >> A_5\varepsilon^{\frac{13}{2}}.$$

$$\Rightarrow \frac{2\pi m^{\frac{1}{2}}}{3\hbar}A_1\varepsilon^{\frac{3}{2}} = \frac{8\pi m^{\frac{5}{6}}(eE)^{\frac{1}{3}}\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{\hbar^{\frac{5}{3}}}.$$

$$\tau = \frac{\hbar^{\frac{5}{3}}}{8\pi m^{\frac{5}{6}}(eE)^{\frac{1}{3}}\varepsilon^{\frac{3}{2}}}. \qquad (7)$$

Усредним τ по распределению Максвелла:

$$<\tau> = \frac{\hbar^{\frac{5}{3}}}{8\pi m^{\frac{5}{6}}(eE)^{\frac{1}{3}}} \frac{\int\limits_{\varepsilon} \varepsilon^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon}{\int\limits_{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon};$$

$$\frac{\varepsilon}{kT} = x;\;\; d\varepsilon = kTdx;$$

$$\int\limits_{\varepsilon} \varepsilon^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon = \frac{1}{(kT)^{\frac{1}{2}}}\int\limits_{\varepsilon}\frac{e^{-x}}{x^{\frac{3}{2}}}dx = \left[-\frac{2}{\sqrt{x}}e^{-x} - 2\sqrt{\pi}erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)\right]\frac{1}{(kT)^{\frac{1}{2}}} =$$

$$= \frac{1}{(kT)^{\frac{1}{2}}}\left[-\frac{2(kT)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\varepsilon}}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} - 2\sqrt{\pi}erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)\right] =$$

$$= -\frac{2}{\sqrt{\varepsilon}}e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} - 2\sqrt{\frac{\pi}{kT}}erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right), \qquad (8)$$

$$\int\limits_{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon = -kTe^{-\frac{\varepsilon}{kT}};\;\; \frac{\int\limits_{\varepsilon} \varepsilon^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon}{\int\limits_{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon} = \frac{2}{\sqrt{\varepsilon}kT} + \frac{2\sqrt{\pi}}{(kT)^{\frac{3}{2}}}e^{\frac{\varepsilon}{kT}}erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right).$$

Второй член при комнатной температуре >> первого.
Ограничиваясь вторым членом, получим

$$<\tau> = \frac{\hbar^{\frac{5}{3}}\sqrt{\pi}e^{\frac{\varepsilon}{kT}}erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)}{4\pi m^{\frac{5}{6}}(eE)^{\frac{1}{3}}(kT)^{\frac{3}{2}}}. \qquad (9)$$

Подвижность электрона

$$\mu = \frac{e\hbar^{\frac{5}{3}}\sqrt{\pi}e^{\frac{\varepsilon}{kT}}erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)}{4\pi m^{\frac{11}{6}}(eE)^{\frac{1}{3}}(kT)^{\frac{3}{2}}}. \qquad (10)$$

С учетом первого члена

$$\mu = \frac{e\hbar^{\frac{5}{3}}}{4\pi m^{\frac{11}{6}}\left(eE\right)^{\frac{1}{3}}}\left[\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}\left(kT\right)^{\frac{1}{2}}} + \frac{\sqrt{\pi}e^{\frac{\varepsilon}{kT}}}{\left(kT\right)^{\frac{3}{2}}} erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)\right]. \quad (11)$$

Используя формулу для концентрации электронов из [1] и подвижность (11) для плотности тока, получаем

$$j = \frac{N_{п.ц.}N_c\left(e\hbar\right)^{\frac{5}{3}}\varepsilon^{\frac{2}{3}}}{4\pi\left(N_{п.ц.} - N_{з.п.ц.}\right)m^{\frac{11}{6}}}\left[e^{-\frac{\Delta E}{kT}} + \frac{8\hbar^{\frac{4}{3}}\left(e\varepsilon\right)^{\frac{7}{3}}}{3m^{\frac{7}{16}}\Delta E^{\frac{5}{2}}}\right]\times$$

$$\times\left[\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}\left(kT\right)^{\frac{1}{2}}} + \frac{\sqrt{\pi}e^{\frac{\varepsilon}{kT}}}{\left(kT\right)^{\frac{3}{2}}} erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)\right]. \quad (12)$$

С учетом малости 2-го члена в 1-х квадратных скобках и 1-го во 2-х квадратных скобках

$$j = \frac{N_{п.ц.}N_c\left(e\hbar\right)^{\frac{5}{3}}\xi^{\frac{2}{3}}e^{-\frac{\Delta E}{kT}}\cdot e^{\frac{\varepsilon}{kT}} erf\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}\right)}{4\sqrt{\pi}\left(N_{п.ц.} - N_{з.п.ц.}\right)m^{\frac{11}{6}}\left(kT\right)^{\frac{3}{2}}}\ . \quad (13)$$

Для сравнения с экспериментом необходимо аналитически определить ионную электропроводность с определенными константами и учесть ее в плотности тока.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Берил И.И., Болога М.К., Берил С.И.* К теории электропроводности слабопроводящей жидкости в поле инжектирующих электродов (концентрационная зависимость) // Электронная обработка материалов. 2008. № 4. С. 55–59.
2. *Фейнтман Р.* Статистическая механика. М.: Мир, 1978.
3. *Болога М.К., Берил И.И.* Рафинация подсолнечного масла в электрическом поле. Кишинев: Штиинца, 1984.
4. *Стильбанс Л.С.* Физика полупроводников. М.: Советское радио, 1967.

Поступила 06.02.08

Summary

Calculation of free electrons mobility at injection of electrons from high voltage needle electrodes on the surface of liquid using the methods of solid state physics is conducted. Applicability of the methods of solid state physics is substantiated. The dependence of mobility on electric field intensity ~ $E^{-1/3}$ is achieved on account of the dependence of the wave function of electron on electric field intensity. It is substantiated that the energy distribution function of electron does not depend on electric field intensity.