ТЕРМОЭДС В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СУБМИКРОННЫХ ПЛЕНКАХ

Логвинов Г. Н.

В полупроводниковом образце субмикронных размеров, включенном в замкнутую электрическую цепь, в приближении электронной температуры рассчитана термоэдс. Проанализированы механизмы ее возникновения, сводящиеся к созданию энергетической неоднородности, вызванной энергетическим баллистическим пролетом электронов в объеме и поверхностными термоэдс в контактах. Рассмотрены режимы холостого хода и короткого замыкания.

Создание электронных приборов на основе многослойных структур с полупроводниковыми субмикронными слоями ставит вопрос об изучении тепловых потоков как между слоями, так и внутри каждого из них. Как известно [1], под субмикронным слоем подразумевается пленка, толщина которой $2d < \tilde{l}$ ($\tilde{l}$ — объемная длина остывания электронов [2]). Если поверхность тонкой пленки контактирует с термостатами и температурами T_1^0 и T_2^0 ($T_1^0 > T_2^0$), то вдоль ее толщины (направление оси $0x$) создается резкая неоднородность носителей тока по энергии, приводящая к возникновению термоэдс. Разность температур может быть создана либо целенаправленно, либо возникнуть в результате неоднородного разогрева контактов пленки с соединительными проводами протекающим электрическим током. В последнем случае появление термоэдс является побочным эффектом и электрическое поле в образце должно находиться самосогласованным образом. Заметим, что рассматриваемая далее задача идеологически близка к теоретическому описанию (см. [3]) появившихся в последнее время экспериментов по термоэлектрическим явлениям в микроконтактах [4, 5].

В отличие от массивных образцов ($\tilde{l} < 2d$) механизм термоэдс в субмикронных слоях обусловливается, во-первых, поверхностными энергетическими релаксационными процессами, во-вторых, условиями протекания потоков заряда и тепла в контактах образца и внешней цепи. Это обстоятельство позволяет в принципе получить информацию о физических процессах, происходящих на поверхности и в контактах, путем экспериментального определения термоэдс и плотности тока в замкнутой цепи.

Цель настоящей работы — построение теории термоэдс в субмикронных пленках, называемых в дальнейшем субмикронными термоэлементами (СТЭ), при условии замкнутости электрического контура вдоль энергетической неоднородности и допущении максвелловости симметричной части функции распределения электронов.

В отличие от массивного образца, в котором условием максвелловского распределения носителей служит неравенство $l_{ee} < \tilde{l}$, где l_{ee} — длина межэлектронного взаимодействия [6], в субмикронных слоях соответствующее условие принимает вид $l_{ee} < \tilde{l}, \tilde{d}$, где $\tilde{d}$ — поверхностная длина остывания, определяемая взаимодействием электронов с поверхностными рассеивателями [7]. Поскольку в субмикронных слоях, как правило, $\tilde{d} < \tilde{l}$, т. е. релаксация энергии происходит через границы, условие максвелловости функции распределения становится более жестким — $l_{ee} < \tilde{d}$. При неизменных геометрических размерах образца данное неравенство будет иметь место при не очень больших скоростях поверхностной релаксации энергии, однако надо помнить, что в субмикронном слое они превышают скорости потерь энергии в объеме. (Последнее подробно обсуждено в [1], [7]). Аналогичная картина имеет место и для акустических фононов.

Электрическая цепь состоит из СТЭ размером $-d \leqslant x \leqslant d$ и металлического проводника длиной $2L \gg 2d$. Равновесную проводимость СТЭ и проводника обозначим через σ и σ_0. Электроны в образце предполагаются невырожденными, находящимися при температуре $T_e(x)$, температуры электронного и фононного газов внешней цепи считаются постоянными, равными средней температуре $T^* = \frac{1}{2}(T_1^0 + T_2^0)$.

В целях упрощения мы на всех участках цепи полагаем величину радиуса Дебая наименьшей длиной. Импульсная длина пробега l предполагается значительно меньшей всех геометрических размеров рассматриваемой модели, включая контакты. Процессами электрон-фононного увлечения пренебрегаем.

Отличительной особенностью СТЭ является то, что в его объеме электроны не обмениваются энергией с кристаллической решеткой ($\tilde{l} > 2d$). Из этого следует, что в образце имеется два не взаимодействующих между собой газа квазичастиц-электронов и фононов, по которым протекают порознь два независимых потока тепла — электронный Q_e и фононный Q_p.

Для расчета термоэдс необходимо знать пространственное распределение температуры $T_e(x)$ в СТЭ. При заданных температурах внешних термостатов она, очевидно, будет определяться релаксационными процессами электронов и фононов на поверхностях образца. Заметим, что на самой границе и внутри контакта пренебрегать электрон-фононным взаимодействием мы не имеем права. Релаксационные процессы в данном случае определяются не длиной $\tilde{l}$, а поверхностной длиной остывания $\tilde{d}$ [7], которая может быть значительно меньше $\tilde{l}$ (об этом свидетельствуют экспериментальные факты [8, 9]). Поэтому электроны могут отдавать свою энергию в термостаты путем непосредственной поверхностной электронной теплопроводности либо благодаря поверхностному электрон-фононному взаимодействию с последующим выводом тепла через фононную систему, либо же конвекционным способом при наличии электрического тока j. Фононы же релаксировать по энергии могут в процессе поверхностной теплопроводности или в процессе фонон-электронных столкновений с выводом ее в термостат через электронную систему. В общем случае в процессе установления стационарных температурных полей следует учитывать все перечисленные релаксационные механизмы.

Замкнутая система уравнений для решения поставленной задачи состоит из уравнений теплового баланса для электронов и фононов и уравнений Максвелла для квазинейтральной среды [10]. В применении к СТЭ они имеют следующий вид:

$$\frac{dQ_e}{dx} = jE, \quad \frac{dQ_p}{dx} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{dj}{dx} = 0, \quad E = -\frac{d\varphi}{dx}. \tag{2}$$

Здесь

$$Q_e = \varkappa_e \frac{dT_e}{dx} + \left[\Pi(T_e) + \frac{1}{e}\mu(T_e)\right] j, \tag{3}$$

$$Q_p = -\varkappa_p \frac{dT_p}{dx}, \tag{4}$$

$$j = -\sigma\left(\frac{d\widetilde{\varphi}}{dx} + \alpha\frac{dT_e}{dx}\right), \qquad (5)$$

где П, μ — объемные коэффициент Пельтье и химический потенциал электронов в СТЭ; $\varkappa_{e,p}$ — объемные электронный и фононный коэффициенты теплопроводности; φ, $\widetilde{\varphi} = \varphi + \frac{1}{e}\mu$ — электрический и электрохимический потенциалы в полупроводнике; α — коэффициент дифференциальной термоэдс.

Граничными условиями (ГУ) для уравнений (1), (2) служат следующие равенства [10]:

$$Q_e + j\varphi\,|_{\xi=\pm1} = \pm\left(\Pi_s + \frac{\mu+\mu_0}{2e}\right) j \pm \varkappa_{es}(T_e - T^0_{2,1}) \pm \eta_e(T_e - T_p)\,|_{\xi=\pm1}, \qquad (6)$$

$$Q_p\,|_{\xi=\pm1} = \pm\varkappa_{ps}(T_p - T^0_{2,1}) \pm \eta_p(T_p - T_e)\,|_{\xi=\pm1}, \qquad (7)$$

$$j\,|_{\xi=\pm1} = \sigma\,[\widetilde{\varphi} - \widetilde{\varphi}_0 + \alpha_s(T_e - T^0_{2,1})]_{\xi=\pm1}, \qquad (8)$$

где $\xi = x / d$; Π_s, $\varkappa_{e,p,s}$, α_s, σ_s — поверхностные коэффициенты Пельтье, теплопроводности, термоэдс и электропроводности; $\widetilde{\varphi}_0$ — электрохимический потенциал металла; $\eta_{e,p}$ — параметры, характеризующие скорости поверхностной релаксации энергии электронов и фононов.

Для дальнейшего важно отметить, что, как следует из (8), при отличной от нуля плотности электрического тока на границе двух сред электрохимический потенциал непрерывный лишь при $\sigma_s \to \infty$.[1] В общем случае он претерпевает разрыв, и этот факт необходимо учитывать при расчетах термоэлектрических эффектов в ограниченных полупроводниках.

В целях упрощения расчетов мы предполагаем, что разность приложенных извне температур мала, так что имеет место следующее неравенство:

$$t = \frac{\Delta T^0}{T^*} \ll 1, \qquad (9)$$

где

$$\Delta T^0 = T^0_1 - T^0_2. \qquad (10)$$

Так как единственной причиной неоднородности по энергии является пространственная неоднородность температуры в СТЭ, обусловленная разностью ΔT^0, все потоки электрического заряда и тепла являются линейными откликами на величину t. Это позволяет в данном приближении в уравнениях баланса и ГУ пренебречь джоулевым разогревом.

Решая уравнения (1) совместно с (6), (7), можно легко получить следующие выражения для температур:

---

[1] В температурном приближении при сделанных ранее предположениях в контакте справедлив закон Видемана—Франца, из которого следует, что при $\sigma_s \to \infty$ и $\varkappa_{e,s} \to \infty$, а значит, $T_e|\xrightarrow[\xi=\pm1]{} T^0_{2,1}$.

$$T_p(\xi) = -\frac{\beta_p^0}{\beta_p^0 + \beta_p + 1}\left(\frac{T_1^0 - T_2^0}{2} + \frac{\beta_p}{\beta_p^0}\frac{T_{e1} - T_{e2}}{2}\right) + \\ + \frac{\beta_p^0}{\beta_p^0 + \beta_p}\left(T^* + \frac{\beta_p}{\beta_p^0}\frac{T_{e1} + T_{e2}}{2}\right), \tag{11}$$

$$T_e(\xi) = \left[-\frac{\beta_e^0}{\beta_e^0 + \beta_e + 1}\left(\frac{T_1^0 - T_2^0}{2} + \frac{\beta_e}{\beta_e^0}\frac{T_{p1} - T_{p2}}{2}\right) + \right. \\ \left. + \frac{\Phi d}{\varkappa_e} j\right]\xi + \frac{\beta_e^0}{\beta_e^0 + \beta_e}\left(T^* + \frac{\beta_e}{\beta_e^0}\frac{T_{p1} + T_{p2}}{2}\right) - \frac{d}{\varkappa_e}\left[\Lambda + (\beta_e^0 + \beta_e)\Phi\right] j. \tag{12}$$

В равенствах (11), (12) $\Phi = \Pi + \frac{1}{e}\mu$; $\Lambda = \Pi_s + \frac{\mu_0 + \mu_1}{2e}$; T_{ei}, T_{pi} $(i = 1, 2)$ — электронная и фононная температуры на границах СТЭ;

$$\beta_e^0 = \frac{\varkappa_{es} d}{\varkappa_e} = \frac{d^2}{\tilde{d}_{e0}^2}; \quad \beta_e = \frac{\eta_e d}{\varkappa_e} = \frac{d^2}{\tilde{d}_e^2}, \tag{13}$$

где $\tilde{d}_{e0}$, $\tilde{d}_e$ — поверхностные длины остывания электронов, определяемые диссипацией энергии в результате поверхностной теплопроводности и квазиупругого рассеяния на поверхностных акустических фононах [1, 7],

$$\beta_p^0 = \frac{\varkappa_{ps} d}{\varkappa_p} = \frac{d^2}{\tilde{d}_{p0}^2}; \quad \beta_p = \frac{\eta_p d}{\varkappa_p} = \frac{d^2}{\tilde{d}_p^2}. \tag{14}$$

Здесь $\tilde{d}_{p0}$, $\tilde{d}_p$ — введенные аналогично электронам поверхностные длины остывания фононов. В настоящей работе все поверхностные длины играют роль феноменологических параметров теории.

Из выражений (11), (12) следует, что температурные распределения электронов и фононов в субмикронном образце обусловлены главным образом состоянием поверхностных тепловых контактов (соотношениями между поверхностными длинами остывания). Если, например, поверхностное фонон-электронное взаимодействие слабое ($\tilde{d}_p >> \tilde{d}_{p0}$), то температура $T_p(\xi)$ имеет следующий вид:

$$T_p(\xi) = T^* - \frac{\beta_p^0}{\beta_p^0 + 1}\frac{T_1^0 - T_2^0}{2}\xi. \tag{15}$$

Температура фононов «подстраивается» к температуре термостатов.

В случае же, когда поверхностная теплопроводность является основным каналом релаксации энергии фононов ($\tilde{d}_p << \tilde{d}_{p0}$), выражение для температуры $T_p(\xi)$ видоизменяется:

$$T_p(\xi) = \frac{T_{e1} + T_{e2}}{2} - \frac{\beta_p}{\beta_p + 1}\frac{T_{e1} - T_{e2}}{2}\xi, \tag{16}$$

т. е. определяется граничными электронными температурами, отличными, вообще говоря, от температур термостатов. Аналогичная картина имеет место и для электронного газа.

Исключая в (11), (12) граничные фононные температуры, получаем окончательное выражение для температуры $T_e(\xi)$:

$$T_e(\xi) = T^* - \frac{d}{\varkappa_e}(\Phi + B\Lambda)\, j + \frac{d}{\varkappa_e}\left(j_0\Phi - A\frac{\varkappa_e}{d}\right)\frac{T_1^0 - T_2^0}{2}\xi, \tag{17}$$

где

$$A = \frac{\beta_e\beta_p^0 + \beta_e^0(\beta_p^0 + \beta_p + 1)}{(\beta_e^0 + 1)\beta_p + (\beta_p^0 + 1)\beta_e + (\beta_e^0 + 1)(\beta_p^0 + 1)}; \tag{18}$$

$$B = \frac{\beta_p^0 + \beta_p}{\beta_e^0\beta_p^0 + \beta_e^0\beta_p + \beta_p^0\beta_e}; \quad j_0 = \frac{j}{\Delta T^0}. \tag{19}$$

Из выражения (17) следует, что градиент T_e отличен от нуля при наличии электрического тока и условии $A=0$. Из равенства (18) следует, что $A=0$ при $\beta_e = \beta_e^0 = 0$ или же $\beta_p^0 = \beta_p = 0$. Это означает, что на границах СТЭ отсутствует теплообмен с фононным газом и термостатами либо же при имеющемся электрон-фононном взаимодействии ($\beta_e \neq 0$) тепловые контакты электронного и фононного газов с термостатами адиабатические.

Во втором предельном случае изотермических граничных условий ($\tilde{d}_{p0} \to 0$, $\tilde{d}_{e0} \to 0$) коэффициент $A = 1$.[2]

Для вычисления плотности тока j воспользуемся законом Кирхгофа для замкнутой электрической цепи:

$$\oint \frac{j d\mathbf{l}}{\sigma} = \oint \mathbf{E}^* d\mathbf{l} = jR, \tag{20}$$

где $\mathbf{E}^*$ — напряженность термоэлектрического поля, R — полное сопротивление замкнутого контура. Полагая его во всех точках однородным, а сечение единичным, можно записать

$$R = \frac{2d}{\sigma} + \frac{2L}{\sigma_0} + \frac{2}{\sigma_s}. \tag{21}$$

Интегрирование по замкнутому контуру должно включать в себя ГУ (8) [11] и схематически выглядит следующим образом:

$$\oint \ldots = \int_{-\infty}^{\infty} \ldots = \int_{-\infty}^{-1} \ldots + \lim_{\delta \to 0} \int_{-1-\delta}^{1+\delta} \ldots + \int_{-1}^{1} \ldots + \lim_{\delta \to 0} \int_{1-\delta}^{1+\delta} \ldots + \int_{1}^{\infty} \ldots \tag{22}$$

После подстановки выражения (5) в интеграл (20) и учета ГУ (8) получаем следующее выражение:

$$\oint = \frac{j d\mathbf{l}}{\sigma} = \alpha_s (1 - A)\Delta T^0 - 2\left(\frac{1}{e}\frac{d\mu}{d\Theta} + \alpha T^*\right)\frac{d\Theta}{d\xi}, \tag{23}$$

где $\Theta = \dfrac{T_e}{T^*}$.

При интегрировании выпали первый и последний интегралы в (22), так как они относятся к интегрированию по металлическим участкам цепи, в которых температура постоянная.

Объединяя формулы (20), (21), (23) и (17), получаем выражение для плотности тока j

[2] Данный случай в рамках предлагаемой теории естественно может иметь место только при условии $l_{ee} \ll \tilde{d}_e, \tilde{d}_{e0}$.

$$j = \sigma \frac{\alpha_s (1 - A) + 2A \left(\frac{1}{e}\frac{d\mu}{d\Theta} + \alpha T^*\right)}{1 + \frac{\sigma L}{\sigma_0 d} + \frac{\sigma}{\sigma_s d} + \frac{\sigma}{\varkappa_e T} + \left(\frac{1}{e}\frac{d\mu}{d\Theta} + \alpha T^*\right)\Phi} \frac{t}{2d}. \tag{24}$$

В невырожденных полупроводниках $\frac{1}{e}\frac{d\mu}{d\Theta} + \alpha T^* = \frac{1}{e}(1 - q)\, T^*$,

$$\frac{\sigma}{\varkappa_e} = \frac{e^2}{\left(\frac{5}{2} - q\right) T^*};$$
$$\frac{e\Phi}{T^*} = \frac{e}{T^*}\left(\Pi + \frac{1}{e}M\right) = \frac{e}{T^*}\left(\alpha T^* + \frac{1}{e}\mu\right) = \frac{5}{2} - q. \tag{25}$$

Здесь q — параметр рассеяния импульса в объеме СТЭ.

После подстановки (25) в (24) получаем

$$j = \sigma \frac{\alpha_s (1 - A) + \frac{2}{e} A (1 - q)}{2 + \frac{\sigma L}{\sigma_0 d} + \frac{\sigma}{\sigma_s d} - q} \frac{\Delta T^0}{2a}. \tag{26}$$

Согласно общему определению ЭДС, термоэдс в замкнутом контуре представляется в виде [12]

$$\varepsilon = \oint \mathbf{E}^* d\mathbf{l} = jR. \tag{27}$$

Отсюда и из формул (21), (26) получаем окончательное выражение для измеряемой термоэдс в СТЭ

$$\varepsilon = \widetilde{\alpha} \Delta T^0, \tag{28}$$

где коэффициент термоэдс имеет следующий вид:

$$\widetilde{\alpha} = \frac{\left[\alpha_s (1 - A) + \frac{2k}{e} A (1 - q)\right] \left(1 + \frac{\sigma L}{\sigma_0 d} + \frac{\sigma}{\sigma_s d}\right)}{2 + \frac{\sigma L}{\sigma_0 d} + \frac{\sigma}{\sigma_s d} - q}, \tag{29}$$

где k — постоянная Больцмана.

Проанализируем выражение (29). Ясно, что в СТЭ механизм термоэдс иной, чем в массивном полупроводнике. В общем случае он определяется, во-первых, баллистическим переносом энергии в объеме образца, получаемой электронами у термостата с температурой T_1^0, и последующей ее отдачей термостату с температурой T_2^0 (при $A \neq 0$), во-вторых, термоэдс возникает непосредственно в самом контакте полупроводника и металла (при $\alpha_s \neq 0$). При адиабатических тепловых контактах ($A = 0$) термоэдс генерируется только на границах, при изотермических — в объеме СТЭ. Это понятно, так как в первом случае в субмикронном образце в электронной системе отсутствует поток тепла, во втором — температуры электронов на «внутренней» и «внешней» сторонах контакта одинаковы.

Из (29) видно, что величина $\tilde{\alpha}$ существенно зависит от соотношений между проводимостью σ и проводимостями σ_0, σ_s. Рассмотрим два предельных случая: холостого хода $\left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \gg 1,\ \frac{\sigma}{\sigma_s} \gg 1\right)$ и короткого замыкания $\left(\frac{\sigma}{\sigma_0} = \frac{\sigma}{\sigma_s} = 0\right)$.

В первом из них

$$\tilde{\alpha} = \alpha_s (1 - A) + \frac{2k}{e} (1 - q). \tag{30}$$

При изотермических контактах $\tilde{\alpha} = \frac{2k}{e} (1 - q)$ и определяется исключительно механизмом рассеяния импульса. Максимальная термоэдс имеет место при рассеянии на ионизированных примесях ($q = -3/2$). Величина $\tilde{\alpha}$ при этом составляет 532 мкВ/град. При адиабатической изоляции $\tilde{\alpha} = \alpha_s$. К сожалению, экспериментальные данные о поверхностных характеристиках, используемых в данной работе, отсутствуют, поэтому привести численный сравнительный анализ не представляется возможным.[3]

В случае короткого замыкания бесконечность величины σ_s автоматически приводит к изотермическим ГУ [см. ссылку [1] и формулу (18)]. Коэффициент $\tilde{\alpha}$ при этом определяется следующим выражением:

$$\tilde{\alpha} = \frac{2k}{e} \frac{1 - q}{2 - q}. \tag{31}$$

И в этом предельном случае величина термоэдс задается лишь механизмом рассеяния импульса. Она максимальна при $q = -3/2$ и равна 104 мкВ/град.

В заключение выражаю благодарность Ю. Г. Гуревичу за постоянное внимание к работе и обсуждение полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Гуревич Ю. Г., Логвинов Г. Н. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 10. С. 1715—1720.
[2] Грибников З. С., Мельников В. И., Сорокина Т. С. // ФТТ. 1966. Т. 8. В. 11. С. 3379—3382.
[3] Богачек Э. Н., Шкорбатов А. Г. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 12. С. 2234—2237.
[4] Gerlach-Meyer U., Queisser H. J. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. N 20. P. 1904—1906.
[5] Trzcinski R., Gmelin E., Queisser H. J. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. N 10. P. 1086—1089; Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 12. P. 6373—6378.
[6] Рашба Э. И., Грибников З. С., Кравченко В. Я. // УФН. 1976. Т. 119. В. 1. С. 3—46.
[7] Логвинов Г. Н. // Изв. вузов СССР. Физика. 1991. № 1. С. 59—64.
[8] Климовская А. И., Кириллова С. И., Снитко О. В. // ФТП. 1974. Т. 8. В. 4. С. 702—710.
[9] Зотьев Б. П., Кравченко А. Ф., Скок Э. М. // ФТП. 1972. Т. 6. В. 7. С. 1377—1379.
[10] Басс Ф. Г., Бочков В. С., Гуревич Ю. Г. Электроны и фононы в ограниченных полупроводниках. М., 1984. 288 с.
[11] Ваксер А. И., Гуревич Ю. Г. // ФТП. 1978. Т. 12. В. 1. С. 82—86.
[12] Анатычук Л. И. Термоэлементы и термоэлектрические устройства. Киев, 1979. 766 с.

Тернопольский государственный педагогический институт
им. Я. О. Галана

Получена 19.06.1991
Принята к печати 22.10.1991

---

[3] Исключение составляет η_e, экспериментально определенное в [8, 9].