

## ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СУБМИКРОННЫХ ПЛЕНКАХ В ТЕОРИИ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСТВА

Логвинов Г. Н.

Показано, что при исследовании термоэлектрических явлений в субмикронных слоях введение термодинамического понятия температуры в общем случае может быть некорректным. В данных средах неравновесные распределения электронов по энергиям задаются немаксвелловскими симметричными функциями распределения. Для них и для плотности электрического тока сформулированы граничные условия; введены поверхностные кинетические коэффициенты.

Практически во всех работах по термоэлектричеству содержится представление о том, что при контакте полупроводникового образца с внешними термостатами с разными температурами в электронном газе возникает неоднородное температурное поле, характеризующееся электронной температурой  $T_e(x)$ , приводящее к возникновению ЭДС в цепи. Хорошо известно [1, 2], что в отсутствие равновесия корректное введение понятия температуры возможно в том случае, когда частота электрон-электронных столкновений существенно превышает частоты релаксации энергии носителей как в объеме, так и на границах полупроводника. При квазиупругих актах взаимодействия с рассеивающими центрами симметричная часть функции распределения (ФР) невырожденных электронов максвеллизируется и имеет следующий вид:

$$f_0^s(\epsilon, x) = \exp\left[(\mu - \epsilon) / T_e(x)\right], \quad (1)$$

где  $\mu$ ,  $\epsilon$  — химический потенциал и энергия носителей тока.

Как неоднократно указывалось (см. [1, 3]), в массивных полупроводниках даже в пренебрежении электрон-электронным взаимодействием (когда понятия температуры не существует) температурное приближение приводит к достаточно точным результатам. Иная ситуация может иметь место в образцах, геометрические размеры которых меньше или порядка объемной длины релаксации энергии  $l$ , составляющей величину порядка 1—10 мкм.

Пусть, например, полупроводниковая пленка, имеющая в направлении оси  $Ox$  толщину  $2d$  такую, что  $l \ll 2d \ll l$ , где  $l$  — импульсная длина пробега, замкнута внешней металлической проволокой длиной  $L \gg 2d$ . Предположим, что боковые поверхности пленки в точках  $x = \mp$  контактируют с термостатами с температурами  $T_1$  и  $T_2$ . Ясно, что полупроводниковый образец будет работать как термоэлемент тем эффективнее, чем лучше тепловые контакты с внешними термостатами, т. е. при наличии относительно больших по величине поверхностных скоростей релаксации энергии, обеспечивающих одновременно в субмикронном слое ( $2d < \mp \Delta$  основной канал релаксации энергии. Обозначим через  $l_{ee}$  и  $l_s$  соответственно длину электрон-электронного взаимодействия [4] и поверхностную длину релаксации энергии [2]. Очевидно, что максвеллизация электронного газа в субмикронном образце может иметь место при условии  $l_{ee} \ll l_s$ . Так как  $l_s = v / \sqrt{v_s / d}$  [2], где  $v$  — тепловая скорость носителей,  $v -$

частота рассеяния импульса,  $s$  — скорость поверхностной релаксации энергии, при эффективном теплообмене ( $s \rightarrow \infty$ ) более реальным будет обратное соотношение между введенными выше длинами:  $l_{ee} \gg l$ , т. е. в субмикронном слое более вероятно формирование немаксвелловской симметричной части ФР. Последнее обстоятельство не позволяет ввести термодинамическое понятие температуры и требует безтемпературного подхода к построению теории термоэлектрических явлений, базирующихся на микроскопических представлениях.

Так как в субмикронном термоэлементе происходит баллистический перенос энергии от одной поверхности к другой, симметричная часть ФР электронов определяется главным образом граничными условиями (ГУ). Их формулировке и посвящена настоящая работа.

Рассмотрим один из контактов двух сред: при  $x < 0$  — среда I, при  $x > 0$  — среда II. Следуя [5], мы считаем, что граница сред I и II представляет собой переходный слой толщиной  $2\delta$ , в пределе стремящейся к нулю (среда III), в котором параметры среды I непрерывным образом переходят в параметры среды II. Релаксация энергии в этом слое представляет собой, по определению, поверхностное энергетическое рассеяние. Так как в настоящее время микроскопическая теория поверхностных механизмов релаксации энергии отсутствует, изложенный далее расчет носит в целом феноменологический характер, преследующий главным образом цель выяснения структуры ГУ. Для упрощения модели мы полагаем, что предельная толщина переходного слоя значительно превышает дебаевский радиус и импульсную длину свободного пробега, что позволяет считать границу квазинейтральной областью и позволяет ввести поверхностные кинетические коэффициенты. Дальнейшее упрощение состоит в том, что как в контактах, так и в среде II электронный газ мы считаем максвеллизированным, описываемым соответствующими температурами. Это можно сделать по той причине, что, во-первых, кинетические процессы в переходном слое задаются феноменологически, и поэтому выбор модели не является существенным; во-вторых, среда II представляет собой внешнюю цепь, линейные размеры которой превышают длины изменения температуры. Из дальнейших рассуждений будет видно, что эти ограничения не являются принципиальными. Для простоты мы полагаем, что фононный газ во всех точках цепи описывается известной температурой  $T_p(x)$ .

Искомые ГУ могут быть получены из равенства парциальных токов носителей на границах сред:

$$j^I(\varepsilon, -\delta) = j^{III}(\varepsilon, -\delta), \quad j^{III}(\varepsilon, \delta) = j^{II}(\varepsilon, \delta), \quad (2)$$

где [1]

$$j^{(k)}(\varepsilon, x) = \alpha_{(\varepsilon)}^{(k)} \left[ \frac{\partial f_0^{(k)}(\varepsilon, x)}{\partial x} + eE \frac{\partial f_0^{(k)}(\varepsilon, x)}{\partial \varepsilon} \right], \quad (3)$$

$\alpha^{(k)} = -\frac{2eg^{(k)}(\varepsilon)}{\nu^{(k)}(\varepsilon)}$ ,  $g^{(k)}(\varepsilon)$  — плотность электронных состояний,  $\nu^{(k)}(\varepsilon)$  — частота рассеяния импульса,  $e$  — заряд электрона,  $E$  — напряженность электрического поля,  $k = I, II, III$ .

Электрическое поле в (3) определяется полной плотностью электрического тока  $j$ , которая при фиксированных температурах термостатов является постоянной величиной  $j = j_0$ . Так как  $j_0 = \int_0^{\infty} d\varepsilon j(\varepsilon, x)$ , парциальный ток в субмикронном слое представляется следующим выражением:

$$j^I(\varepsilon, x) = a^I(\varepsilon) \left( \frac{\partial f_0^I}{\partial x} + \frac{J_0 - \int_0^\infty \alpha^I(\varepsilon) \frac{\partial f_0^I}{\partial x} d\varepsilon}{\int_0^\infty \alpha^I(\varepsilon) \frac{\partial f_0^I}{\partial \varepsilon} d\varepsilon} \frac{\partial f_0^I}{\partial \varepsilon} \right). \quad (4)$$

Для вычисления парциального тока в области III воспользуемся ФР (1). Подставляя ее в формулу (3), получаем

$$j^{\text{III}}(\varepsilon, x) = a^{\text{III}}(\varepsilon) \frac{ef_{00}^{\text{III}}(\varepsilon)}{T^*} \left( \frac{d\tilde{\varphi}^{\text{III}}}{dx} - \frac{\mu^{\text{III}} - \varepsilon}{eT^*} \frac{dT_e^{\text{III}}}{dx} \right), \quad (5)$$

где  $f_{00}^{\text{III}}(\varepsilon)$  — равновесная ФР Максвелла со средней температурой  $T = 1/2 (T_1 + T_2)$ ,  $\mu^{\text{III}}$ ,  $\tilde{\varphi}^{\text{III}}$  — химический и электрохимический потенциалы электронного газа в пограничном слое,  $\tilde{\varphi}^{\text{III}} = \varphi^{\text{III}} + \frac{1}{e} \mu^{\text{III}}$ ,  $\varphi^{\text{III}}$  — электрический потенциал.

Так как электрохимический потенциал единый для всех носителей, для его нахождения воспользуемся общим выражением для плотности электрического тока [5]:

$$j_0 = -\sigma^{\text{III}} \left( \frac{d\tilde{\varphi}^{\text{III}}}{dx} + \alpha^{\text{III}} \frac{dT_e^{\text{III}}}{dx} \right), \quad (6)$$

где  $\sigma^{\text{III}}$ ,  $\alpha^{\text{III}}$  — проводимость и дифференциальная термоэдс.

С помощью (6) выражение для парциального тока  $j^{\text{III}}$  можно переписать в следующем виде:

$$j^{\text{III}}(\varepsilon, x) = -a^{\text{III}}(\varepsilon) \frac{ef_{00}^{\text{III}}}{T^*} \left[ \frac{j_0}{\sigma^{\text{III}}} + \{\alpha^{\text{III}} - \alpha^{\text{III}}(\varepsilon)\} \frac{dT_e^{\text{III}}}{dx} \right], \quad (7)$$

где величина  $\alpha^{\text{III}}(\varepsilon) = -(\mu^{\text{III}} - \varepsilon)/eT^*$  и может быть названа парциальной термоэдс.

Распределение электронной температуры в пограничном слое можно определить из уравнения теплового баланса [5]. В линейном по градиенту температуры приближении оно принимает вид

$$-\kappa_e^{\text{III}} \frac{d^2 T_e^{\text{III}}}{dx^2} + P [T_e(x) - T_p(x)] = 0, \quad (8)$$

где  $\kappa_e^{\text{III}}$  — электронная теплопроводность,  $P$  — величина, определяющая скорость передачи энергии между электронной и фононной подсистемами [5].

ГУ к уравнению (8) в традиционной схеме являются требования непрерывности температур на стенках  $x = \mp \delta$  [5]. Заметим, что в газе, описываемом ФР (1), параметр  $T_e$  может быть представлен в виде следующей комбинации функций:

$$T_e = -f_0^{\text{III}} / \frac{\partial f_0^{\text{III}}}{\partial \varepsilon}. \quad (9)$$

Так как ФР и ее производные должны быть непрерывными в каждой точке, в общем случае на границах  $x = \mp \delta$  должны выполняться условия непрерывности функций типа (9) вне зависимости от того, является  $f_0(\varepsilon, x)$  максвелловской ФР или нет. Таким образом, ГУ для уравнения теплового баланса можно записать следующим образом:

$$F_0^I(-\delta) = T_e^{III}(-\delta), \quad T_e^{III}(\delta) = T_e^{II}(\delta), \quad (10)$$

где

$$F_0^I = -f_0^I / \left. \frac{\partial f_0^I}{\partial x} \right|_{x=-\delta}. \quad (11)$$

Решением уравнения (8) с ГУ (10) есть функция (подробнее см. [5])

$$T_e^{III}(x) = \frac{F_0^I + T_e^{II}}{2} - \frac{bt_1}{2} + \frac{T_p^{II} - T_p^I}{2\delta} x + \frac{ct_2}{2\delta} x + \frac{bt_2}{2 \operatorname{sh} \lambda} \operatorname{sh} kx + \frac{at_1}{2 \operatorname{ch} \lambda} \operatorname{ch} kx, \quad (12)$$

где  $t_1 = F_0^I + T_e^{II} - T_p^I - T_p^{II}$ ,  $t_2 = T_e^{II} - F_0^I - T_p^I + T_p^{II}$ ,  $b = k_c^2/k^2$ ;  $c = k_p^2/k^2$ ;  $k_{c,p}^2 = P/\kappa_{c,p}$ ,  $k^2 = k_c^2 + k_p^2$ ,  $\lambda = kd$ .

Подставляя (12) в (7) и переходя к пределу  $\delta \rightarrow 0$ , получаем выражение для поверхностного парциального тока  $j_s(\varepsilon) \Big|_{x=0} = \lim_{\delta \rightarrow 0} j^{III}(\varepsilon, x)$ :

$$j_s(\varepsilon) = \sigma_s(\varepsilon) \left\{ \frac{j_0}{\sigma_s} + [\alpha_s - \alpha_s(\varepsilon)] [\xi (F_0^I - T_e^{II}) + \eta_i (F_0^I - T_p^I) + \eta_e (F_0^I - T_p^{II})] \right\}, \quad (13)$$

где  $\sigma_s(\varepsilon) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{ea^{III}(\varepsilon) f_{00}^I}{2\delta T^*}$ ,  $\sigma_s = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\sigma^{III}}{2\delta}$  — поверхностные парциальная и интегральная проводимости,  $\alpha_s(\varepsilon) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha^{III}(\varepsilon)$ ,  $\alpha_s = \lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha^{III}$  — поверхностные парциальная и интегральная термоэдс,  $\varepsilon$  — поверхностная электронная теплопроводность,  $\eta_i$  и  $\eta_p$  — коэффициенты, определяющие скорости поверхностной релаксации энергии на «своих» и «чужих» фоновых. Выражения для этих величин приведены в [5].

Подставляя (4) и (13) в (2), получаем искомые ГУ для симметричной части ФР электронов в субмикронном слое:

$$a(\varepsilon) \left( \frac{\partial f_0}{\partial x} + \frac{j_0 - \int_0^\infty a(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial x} d\varepsilon}{\int_0^\infty a(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \Bigg|_{x=\pm d} = \sigma_s \left\{ \frac{j_0}{\sigma_s} + [\alpha_s - \alpha_s(\varepsilon)] \times \right. \\ \left. \times [\pm \xi (F_0 - T_e^{II}) \pm \eta_i (F_0 - T_p^I) \pm \eta_e (F_0 - T_p^{II})] \right\}. \quad (14)$$

Для получения ГУ для плотности тока необходимо знать распределение электрохимического потенциала в области III, которое можно получить из равенства (6) путем его дифференцирования:

$$\tilde{\varphi}^{III} = C_1 + C_2 x - \frac{b\alpha^{III}}{2} \left( \frac{t_1}{\operatorname{ch} \lambda} \operatorname{ch} kx + \frac{t_2}{\operatorname{sh} \lambda} \operatorname{sh} kx \right). \quad (15)$$

Здесь  $C_1, C_2$  — константы интегрирования.

Обычными ГУ являются условия непрерывности электрохимических потенциалов на боковых поверхностях образца [5]. В газе же, описываемом немаксвелловской ФР, ввести электрохимический потенциал в общем случае

нельзя, так как понятие химического потенциала существует только для равновесных или квазиравновесных систем.

Вновь обратим внимание на то, что в случае максвелловской ФР (1) химический потенциал можно представить в виде  $\mu = T_e \ln n f_0^e + \varepsilon$ . Тогда, пользуясь аналогией, величину  $\tilde{\varphi}$  следует определить как

$$\tilde{\varphi} = \varphi + \frac{1}{e} F_1, \quad (16)$$

где  $F_1 = F_0 \ln f_0 + \varepsilon$ .

В данном случае граничные значения  $\tilde{\varphi}^{\text{III}}$  будут удовлетворять следующим равенствам:

$$F_1(-\delta) = \tilde{\varphi}^{\text{III}}(-\delta), \quad \tilde{\varphi}^{\text{III}}(\delta) = \tilde{\varphi}^{\text{II}}(\delta). \quad (17)$$

Подставляя найденные выражения для  $T_e^{\text{III}}(x)$  и  $\tilde{\varphi}^{\text{III}}$  в (6), после перехода к пределу  $\delta \rightarrow 0$  можно получить следующее выражение для граничного значения плотности тока:

$$j_0 \Big|_{x=0} = \sigma_s [\tilde{\varphi}^{\text{II}} - (\varphi^{\text{I}} + \frac{1}{e} F_1) + \alpha_s (T_e^{\text{II}} - F_0^{\text{I}})] \Big|_{x=0}. \quad (18)$$

Сама величина  $j_0$  определяется законом Кирхгофа для замкнутой цепи.

Для получения макроскопических ГУ [5] прежде всего следует записать условие непрерывности парциальных потоков полной энергии в точках  $x = \pm \delta$

$$\begin{aligned} \varepsilon j^{\text{I}}(\varepsilon, -\delta) + j^{\text{I}}(\varepsilon, -\delta) \varphi^{\text{I}}(-\delta) &= \varepsilon j^{\text{III}}(\varepsilon, -\delta) + j^{\text{III}}(\varepsilon, -\delta) \varphi^{\text{III}}(-\delta), \\ \varepsilon j^{\text{III}}(\varepsilon, \delta) + j^{\text{III}}(\varepsilon, \delta) \varphi^{\text{III}}(\delta) &= \varepsilon j^{\text{II}}(\varepsilon, \delta) + j^{\text{II}}(\varepsilon, \delta) \varphi^{\text{II}}(\delta). \end{aligned} \quad (19)$$

Интегрирование (19) по энергиям от 0 до  $\infty$  приводит к равенствам, представляющим собой тепловые ГУ.

В заключение выражаю благодарность Ю. Г. Гуревичу за плодотворное обсуждение результатов работы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г. Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М., 1975. 400 с.
- [2] Гуревич Ю. Г., Логвинов Г. Н. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 10. С. 1715—1720.
- [3] Левинсон И. Б. // Автореф. докт. дис. ИПАН СССР. Л., 1967.
- [4] Рашба Э. И., Грибников З. С., Кравченко В. Я. // УФН. 1976. Т. 119. С. 3—47.
- [5] Басс Ф. Г., Бочков В. С., Гуревич Ю. Г. Электроны и фононы в ограниченных полупроводниках. М., 1984. 288 с.

Тернопольский педагогический институт  
им. Я. Галана

Получена 18.12.1991  
Принята к печати 30.01.1992