Інститут радіофізики та електроніки ім. О. Я. Усикова Національна академія наук України

Інститут радіофізики та електроніки ім. О. Я. Усикова Національна академія наук України

> Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису

ВОЛОВІЧЕВ ІГОР МИКОЛАЙОВИЧ

УДК 537.3

ДИСЕРТАЦІЯ

ТРАНСПОРТ НЕРІВНОВАЖНИХ НОСІЇВ ЗАРЯДУ В БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ ПЛАЗМОПОДІБНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

01.04.04 – фізична електроніка

Подається на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело _____ І. М. Воловічев

Науковий консультант: Гуревич Юрій Генріхович, доктор фізико-математичних наук, професор

Харків – 2018

АНОТАЦІЯ

Воловічев І. М. Транспорт нерівноважних носіїв заряду в багатокомпонентних плазмоподібних середовищах. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 "Фізична електроніка". - Інститут радіофізики та електроніки ім. О. Я. Усикова НАН України, Харків, 2018.

У дисертації розвивається дифузійно-дрейфова теорія транспортних процесів в багатокомпонентних системах для дослідження взаємодії нерівноважних носіїв заряду кількох типів з електромагнітним полем в плазмоподібних середовищах. Також передбачено і вивчено ряд термо- і фотоелектричних ефектів в напівпровідникових зразках в нерівноважних умовах. Отримані результати сприяють підвищенню точності і фізичної адекватності моделей транспортних процесів, які використовуються у вивченні і моделюванні твердотільних електронних пристроїв, що є актуальною і важливою науковою задачею фізичної електроніки.

Наукова новизна полягає в тому, що в роботі вперше отримано нові закономірності для відомих кінетичних явищ, передбачено нові ефекти та дана їх фізична інтерпретація, розширено існуючі теорії для врахування впливу нерівноважних носіїв.

В роботі сформульовано єдиний методичний підхід до вивчення генераційно-рекомбінаційних процесів в плазмоподібних середовищах з нерівноважними носіями струму. Сформульовано і систематизовано граничні умови (ГУ) для вивчення стаціонарних транспортних процесів в напівпровідникових структурах. Проаналізована можливість застосування отриманих ГУ для різних матеріалів (метал, біполярний напівпровідник) та їх поєднань в режимах замкнутого і розімкнутого електричного кола, з використанням різних фізичних наближень, включаючи наближення квазінейтральності. Проаналізовано різні моделі рекомбінації, що використовуються при вивченні транспортних явищ і встановлення рівноваги в напівпровідникових структурах. Показано, що моделі, що широко використовуються для опису генерації і рекомбінації електронів і дірок, в лінійному наближенні в стаціонарних умовах не сумісні з рівняннями Максвелла. Отримано нові вирази, що описують рекомбінаційні процеси в стаціонарних режимах в довільних температурних полях, в тому числі при наявності в зразку гарячих носіїв струму.

Визначено умови, за яких можливе точне визначення поняття часу життя для кожного типу носія. Показано, що в стаціонарних умовах точне введення поняття часу життя нерівноважного носія струму або неможливо взагалі, або час життя є єдиним для електронів і дірок. Достатньою умовою коректного введення часу життя електрон-діркової пари є виконання умов квазінейтральності при однорідній і єдиній температурі носіїв.

Особливу увагу приділено вивченню прояву енергетичної нерівноважності при наявності в напівпровіднику гарячих носіїв струму. Проаналізовано процес рекомбінації в теорії гарячих носіїв, коли температури носіїв струму і фононів не збігаються між собою. Показано, що в загальному випадку розігрів електронного газу неминуче приводить до зміни концентрації електронів в зоні провідності. Доведено, що ця зміна, як правило, приводить до нелінійності кінетичних коефіцієнтів того ж порядку, що і зміна рухливості. Визначено умови, коли цією зміною можна знехтувати.

Також виявлено, що енергетична нерівноважнісь приводить до зміщення генераційно-рекомбінаційної рівноваги, що виявляється повністю еквівалентним появі додаткової зовнішньої генерації електронно-діркових пар. На прикладі двотемпературної моделі фотоефекту Дембера (дірки і фонони з рівною температурою, відмінною від температури електронів) продемонстровано, що величина електрорушійної сили (ЕРС) може істотно відрізнятися від відповідного значення при відсутності гарячих електронів. При цьому додатковий внесок в ЕРС не залежить від коефіцієнта Зеєбека, градієнта температури і темпу генерації електронно-діркових пар, а визначається виключно ступенем розігріву електронної підсистеми.

В роботі показано, що традиційна теорія термоелектрики може бути застосовна для аналізу біполярних напівпровідників тільки в рівноважних умовах або в граничному випадку сильної рекомбінації. При кінцевій швидкості рекомбінації термоерс біполярного напівпровідникового зразка визначається не тільки коефіцієнтами Зеєбека електронів і дірок, а й параметрами рекомбінаційних механізмів.

Передбачено існування в однорідному напівпровіднику в нестаціонарному температурному полі поперечного динамічного термоелектричного ефекту. Вперше побудована теорія даного ефекту, встановлено, що він можливий як в біполярному, так і в монополярному напівпровіднику. В ізотропному середовищі вектор термоелектричного струму є ортогональним вектору середнього теплового потоку в напівпровіднику. Величина динамічної термоерс немонотонним чином залежить від характеристик температурного поля. Є оптимальні значення довжини і швидкості температурної хвилі, при яких поперечний динамічний термоелектричний ефект проявляється найбільшою мірою. Екстремальні значення довжини і швидкості температурної хвилі простим чином пов'язані з часом життя і рухливістю носіїв струму. Величина поперечного динамічного термоелектричного ефекту залежить від ступеня монополярності напівпровідника, найбільш сприятливим для нього є власний або компенсований напівпровідник.

У дисертаційній роботі розвинуто теорію фотоакустичного ефекту (ФАЕ) в плазмоподібних середовищах в одно- і двотемпературному наближенні. Вперше проаналізовано вплив термоелектричного поля і зміни темпу термічної генерації носіїв в неоднорідних температурних полях на величину фотоакустичного відгуку. У однотемпературному наближенні зазначені фактори проявляються найбільш значно в області низьких частот модуляції світлового потоку.

Встановлено залежність амплітуди і фази сигналу ФАЕ від величини електрон-фононної взаємодії та розігріву електронної підсистеми. Показано, що амплітуда температурної хвилі в кожній підсистемі квазічастинок сильно залежить від частки енергії світла, що припадає на нагрів електронного газу. Існує критичне значення потужності падаючого випромінювання, нижче якого фотоакустичний сигнал може бути охарактеризований лише ефективними теплофізичними параметрами. При сильній електрон-фононній взаємодії та однаковій температурі носіїв струму і фононів ФЧХ ФАЕ може мати максимум в області низьких частот модуляції світлового потоку. Температурна залежність перетину міжзонної рекомбінації пригнічує немонотонність частотної залежності фази фотоакустичного сигналу.

Теоретично досліджені фотоелектричні ефекти в однорідному по концентрації напівпровіднику з нерівноважними носіями струму. Показано, що при однорідному освітленні напівпровідника неоднорідність рухливості носіїв породжує ЕРС. Даний об'ємний фотоефект в рівній мірі чутливий до неоднорідності рухливості як основних, так і неосновних носіїв.

Передбачений новий самоіндукований фотоефект в однорідному напівпровідниковому замкнутому колі за рахунок неоднорідної іонізації домішкових центрів. Даний фотоефект відрізняється нелінійною (кубічною) залежністю величини EPC від інтенсивності освітлення при як завгодно малому його рівні в лінійному по концентрації носіїв струму наближенні. При збільшенні інтенсивності падаючого світла нелінійність зменшується.

Вперше передбачена можливість генерації фотоерс в обмеженому мо-

нополярному однорідному багатодолинному напівпровіднику за рахунок викликаних світлом міждолинних переходів по механізму фотоефекту Дембера.

Розвинуто теорію динамічного фотоефекту. Показано, що при наявності в зразку домішок, здатних змінювати зарядовий стан під впливом світла, освітлення модульованим світловим потоком типу "біжуча хвиля" приводить до появи постійного електричного струму. Даний динамічний ефект є квазістатичним і не пов'язаний з появою в напівпровіднику нерівноважного об'ємного заряду. Величина і знак динамічної фотоерс нелінійно залежать від швидкості та напрямку руху хвилі модуляції інтенсивності світлового потоку. Існує оптимальна швидкість руху хвилі, при якій електричний струм в колі досягає максимального значення. Величина ефекту характеризується нелінійною (квадратичною) залежністю від амплітуди модуляції інтенсивності світла, а також чутлива до середнього значення інтенсивності падаючого світла. При досить великий середньої інтенсивності падаючого світла відбувається придушення фотоефекту. Крім того, при відповідному підборі параметрів можна спостерігати зміну знака фотоерс і електричного струму в колі в міру зростання середньої інтенсивності світла.

Дисертаційна робота має теоретичний характер. Її результати можуть бути використані для створення нових експериментальних методів дослідження тепло- і електрофізичних властивостей провідних середовищ, контролю параметрів напівпровідникових структур і електронних приладів. Зокрема, може бути розширено коло явищ, доступних вивченню методом ФАЕ, а також підвищена точність вимірювання параметрів біполярних напівпровідників методом фототермічної спектроскопії. Отримані результати також можуть бути використані для оптимізації шумових параметрів і поліпшення швидкодії мікроелектронних приладів, що проектуються, для створення детекторів далекого інфрачервоного і терагерцового випромінювання, підвищення ефективності термоелектричних перетворювачів енергії.

Ключові слова: нерівноважні носії, транспортні процеси, дифузійнодрейфова модель, рекомбінація, квазінейтральність, термоелектрика, фотоелектричні явища, фотоакустичний ефект.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

- Y. G. Gurevich, M. A. Rodriguez, J. L. Carillo, L. Meza-Montes, and I. N. Volovichev, "Contact phenomena in low-dimensional systems with hot electrons and phonons," *Lith. J. Phys.*, vol. 35, pp. 608–610, 1995.
- 2. Y. G. Gurevich and I. N. Volovichev, "Forgotten mechanism of nonlinearity in the theory of hot electrons," *Phys. Rev. B*, vol. 60, pp. 7715–7717, 1999.
- 3. И. Н. Воловичев, Ю. Г. Гуревич, "Генерационно-рекомбинационные процессы в полупроводниках," *ФТП*, т. 35, стор. 321–329, 2001.
- I. N. Volovichev, L. Villegas-Lelovsky, G. González de la Cruz, and Y. G. Gurevich, "The effect of carrier diffusion and recombination in semiconductors on the photoacoustic signal," *Physica B*, vol. 304, pp. 410–422, 2001.
- Y. Gurevich, G. Logvinov, I. Volovichev, G. Espejo, O. Titov, and A. Meriuts, "The role of non-equilibrium carriers in the formation of thermo-e.m.f. in bipolar semiconductors," *Phys. Status Solidi B*, vol. 231, pp. 278–293, 2002.
- I. N. Volovichev, G. Espejo, Y. G. Gurevich, O. Y. Titov, and A. Meriuts, "Recombination in semiconductors: Appearance of nonequilibrium carriers due to injection or redistribution in the sample," *Jpn. J.Appl. Phys.*, vol. 41, p. 182, 2002.
- A. Meriuts, O. I. Lyubimov, I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, G. Espejo, and
 O. Y. Titov, "Linear transport in bounded semiconductors under a thermal

field: emergence of nonequilibrium charge carriers," *Functional Materials*, vol. 2, pp. 176–181, 2002.

- L. Villegas-Lelovsky, G. Gonzalez de la Cruz, Y. G. Gurevich, and I. N. Volovichev, "Photoacoustic effect in semiconductors: Influence of field temperature on carrier diffusion and recombination," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 74, pp. 556–558, 2003.
- I. N. Volovichev, G. N. Logvinov, O. Y. Titov, and Y. G. Gurevich, "Recombination and lifetimes of charge carriers in semiconductors," J. Appl. Phys., vol. 95, pp. 4494–4496, 2004.
- Y. G. Gurevich, H. Lohvinov, M. Cruz-Irisson, O. Titov, G. Espejo-López, and I. Volovichev, "Electric current of hot electrons in semiconductor thin films," *Phys. Status Solidi C*, vol. 1, pp. S100–S103, 2004.
- Y. G. Gurevich, A. Ortiz, G. N. Logvinov, I. N. Volovichev, O. Y. Titov, J. Giraldo, and A. Gutierrez, "Transport phenomena in bipolar semiconductors: a new point of view," *Microelectr. J.*, vol. 36, pp. 886–889, 2005.
- L. Villegas-Lelovsky, G. Gonzalez de la Cruz, and I. N. Volovichev, "Effect of electron-phonon energy exchange on thermal wave propagation in semiconductors considering carrier diffusion and recombination," *Phys. Stat. Sol. B*, vol. 242, pp. 971–982, 2005.
- Y. G. Gurevich, J. E. Velázquez-Pérez, G. Espejo-López, I. N. Volovichev, and O. Y. Titov, "Transport of nonequilibrium carriers in bipolar semiconductors," J. Appl. Phys., vol. 101, p. 023705, 2007.
- I. N. Volovichev, J. E. Velázquez-Perez, and Y. G. Gurevich, "Transport boundary condition for semiconductor structures," *Solid-State Electron.*, vol. 52, pp. 1703 – 1709, 2008.
- I. Volovichev, J. Velázquez-Pérez, and Y. Gurevich, "Transport boundary conditions for solar cells," Solar Energy Mater. Solar Cells, vol. 93, pp. 6–10,

2009.

- I. Volovichev, "New non-linear photovoltaic effect in uniform bipolar semiconductor," J. Appl. Phys., vol. 116, p. 193701, 2014.
- I. Volovichev, "Nonuniform current-carrier mobility-induced bulk photovoltaic effect in bounded semiconductors," *Phys. Status Solidi B*, vol. 252, pp. 1804– 1809, 2015.
- I. N. Volovichev and Y. G. Gurevich, "Mechanisms of charge carriers nonequilibrium in transport processes in bipolar semiconductors," *Curr. Appl. Phys.*, vol. 16, no. 2, pp. 191–196, 2016.
- I. N. Volovichev, "Dynamic thermoelectricity in uniform bipolar semiconductor," *Physica B*, vol. 492, pp. 70–76, 2016.
- I. Volovichev, "Dynamic thermopower in uniform unipolar semiconductor,"
 J. Appl. Phys., vol. 119, p. 095712, 2016.
- I. N. Volovichev, O. Y. Titov, and Y. G. Gurevich, "Photovoltaic effect in unipolar multivalley semiconductors," *Philos. Mag.*, vol. 97, pp. 683–692, 2017.
- I. N. Volovichev, "Direct current in non-steady-state photovoltaic effect," *Phys. Sci. Int. J.*, vol. 17, pp. 1–11, 2018.
- O. Titov, A. Meriuts, G. Espejo, I. Volovichev, Y. Gurevich, and O. I. Lyubimov, "Thermal and electric transport in semiconductors under a thermal field: Emergence of nonequilibrium charge carriers," in *Proc. 15th European Conference on Thermophysical Properties*, (Wurzburg, Germany), pp. 737–743, Sept. 1999.
- 24. A. F. Carballo-Sanchez, G. Espejo, I. N. Volovichev, and Y. G. Gurevich, "Transient thermoelectric phenomena as new method for the characterization of semiconductor materials," in *Digest of the 3rd Annual Workshop on Simula*-

tion and Characterization Techniques in Semiconductors, Third Annual Workshop, (Mexico D. F., Mexico), pp. 12–16, Sept. 1999.

- 25. G. Espejo, I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, G. N. Logvinov, A. Meriuts, and O. Y. Titov, "Thermal field—the source of the emergence of nonequilibrium charge carriers in semiconductors," in *Proc. of the 22nd International Conference on Microelectronics*, (Nis, Yugoslavia), pp. 181–184, May 2000.
- 26. I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, and O. Y. Titov, "Recombination in inhomogeneous electron and phonon temperature fields," in *Abstracts of the 25th International Conference on the Physics of Semiconductor*, (Osaka, Japan), p. 721, Sept. 2000.
- 27. Y. Gurevich, G. Logvinov, O. Titov, and I. Volovichev, "Nonequilibrium carriers of charge in theory of thermoelectric phenomena," in *Proc. of the 22nd International Conference on Thermoelectrics*, (La Grande-Motte, France), pp. 464–467, Aug. 2003.
- 28. Y. Gurevich, H. Logvinov, O. Titov, and I. Volovichev, "Electric and heat transport in thin bipolar semiconductor films," в *Матеріали IX Міжнародної конференції МКФТТП-IX*, (Івано-Франківськ, Україна), сс. 30–31, Травень 2003.
- 29. Y. Gurevich, O. Titov, I. Volovichev, and G. Logvinov, "Transport of nonequilibrium charge carriers in semiconductor structures," in *Abstracts of the 14th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors (HCIS-14)*, (Chicago, USA), p. P7, July 2005.
- 30. Y. G. Gurevich, J. E. Velazquez-Perez, and I. N. Volovichev, "Boundary conditions for current in solar cells," in *Abstracts Book of XVI International Materials Research Congress*, (Cancun, Mexico), p. 57, Oct. 2007.
- 31. Y. G. Gurevich, I. Volovichev, and G. Gonzalez de la Cruz, "Effective thermal parameters of layered films: An application to pulsed photothermal techniques,"

in Book of Abstracts of the 28th International Conference on Materials, Surfaces and Vacuum, (Veracruz, Mexico), p. 176, Sept. 2008.

- 32. I. N. Volovichev, J. E. Velazquez-Perez, and Y. G. Gurevich, "New boundary conditions for the study of charge transport in solid-state devices," in *Proc. of* the 26th International Conference on Microelectronics, (Nis, Serbia), pp. 151– 154, May 2008.
- 33. I. Volovichev and Y. Gurevich, "New about the solar cells," in *Proc. VIII* International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, (Puebla, Mexico), p. 294, Sept. 2015.
- 34. I. Volovichev, O. Titov, and Y. Gurevich, "Photovoltaic effect in unipolar semiconductors," in Proc. IX International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, (Mazatlan, Mexico), p. 362, Sept. 2016.

ABSTRACT

Volovichev I. M. Transport of nonequilibrium charge carriers in multicomponent plasma-like media. – Qualification scientific paper published as a manuscript.

Thesis for Doctor of Science Degree in Physics and Mathematics by specialty 01.04.04 "Physical electronics". - O. Ya. Usikov Institute for Radiophysics and Electronics of the NAS of Ukraine, Kharkiv, 2018.

The thesis develops a diffusion-drift theory of transport processes in multicomponent systems to study the interaction of nonequilibrium charge carriers of several types with an electromagnetic field in plasma-like media. A series of thermo- and photoelectric effects in semiconductor specimens under nonequilibrium conditions have been predicted and studied. The obtained results help to increase the accuracy and physical adequacy of the transport process models, used in the study and modeling of solid state electronic devices, which is an actual and important scientific task of physical electronics.

Scientific novelty consists in the fact that new regularities for known kinetic phenomena are obtained in the manuscript, as well as new effects are predicted and their physical interpretation is suggested, as well as some existing theories are developed and augmented to include the influence of nonequilibrium carriers.

A unified methodical approach to the study of generation-recombination processes in plasma-like media with nonequilibrium carriers is developed. Boundary conditions (BC) for the study of stationary transport processes in semiconductor structures are deduced and systemized. The applicability of the obtained BC for various materials (metal, bipolar semiconductor, etc.) and their combinations in closed and open circuit, using various physical approximations, including the quasineutrality approximation, is analyzed. Various models of recombination, used in the study of transport phenomena and establishment of the equilibrium in semiconductor structures, are analyzed. It is shown that linear models, widely used to describe the generation and recombination of electrons and holes, in the stationary conditions are not compatible with the Maxwell equations. New expressions are obtained that correctly describe recombination processes in stationary modes in arbitrary temperature fields, including the presence of hot charge carriers in the sample.

Requirements for correct strict definition of individual charge carrier lifetime for each type of carrier are defined. It is shown that in stationary conditions a strict introduction of the concept of the lifetime of a nonequilibrium charge carrier is either impossible at all, or the lifetime is the same for electrons and holes. A sufficient condition for the correct introduction of the lifetime of an electronhole pair is the fulfillment of the quasineutrality conditions at the uniform and common carrier temperature.

Particular attention is paid to the recombination process in the theory of hot carriers, when the temperatures of the charge carriers and phonons do not coincide. It is shown that in the general case, the heating of the electron gas inevitably leads to a change in the electron density in the conduction band. It is proved that this change, as a rule, leads to the nonlinearity of the kinetic coefficients of the same order as the change in the mobility. Conditions are defined when this change can be neglected.

It was also found that the energy nonequilibrium leads to the shift of the generation-recombination equilibrium being completely equivalent to the appearance of an additional source for external electron-hole pair generation. By the example of the two-temperature model for the Dember photovoltaic effect (holes and phonons with the same temperature being different from the electron temperature) it was demonstrated that the magnitude of the emf can differ significantly from the corresponding value in the absence of hot electrons. Moreover, the additional contribution to the emf does not depend on the Seebeck coefficient, the temperature gradient and the generation rate of electron-hole pairs, but is determined solely by the heating of the electronic subsystem.

In the thesis it is shows that the traditional theory of thermoelectricity is applicable to bipolar semiconductors only under equilibrium conditions or in the limiting case of strong recombination. At a finite rate of the recombination, the thermo-emf of a bipolar semiconductor sample is determined not only by the Seebeck coefficients of electrons and holes, but also by the parameters of the recombination mechanisms.

A new transverse dynamic thermoelectric effect in a uniform semiconductor in a non-stationary temperature field is predicted. The theory of this effect is developed, it holds for both a bipolar and a monopolar semiconductor. In an isotropic plasma-like medium, the vector of the thermoelectric current is orthogonal to the mean heat flux in the semiconductor. The magnitude of the transverse dynamic thermoelectric power depends non-monotonically on the parameters of the temperature field. There are optimal values for the length and velocity of the temperature wave, when the transverse dynamic thermoelectric effect is manifested to the greatest extent. The extreme values of the length and velocity of the temperature wave are simply related to the lifetime and mobility of the charge carriers. The magnitude of the transverse dynamic thermoelectric effect depends on the degree of monopolariness of the semiconductor, the most favorable for it is an intrinsic or compensated semiconductor.

In the thesis, the theory of the photoacoustic effects (PAE) in plasma-like media is developed in the one- and two-temperature approximation. The effect of the thermoelectric field and the change in the rate of thermal generation of carriers in nonuniform temperature fields on the magnitude of the photoacoustic response is analyzed for the first time. In the one-temperature approximation, these factors are manifested most significantly in the region of low modulation frequencies of the light flux.

The amplitude and phase of the PAE signal depend on the electron-phonon interaction and the heating of the electronic subsystem. It is shown that the amplitude of the temperature wave in each subsystem of quasiparticles depends strongly on the fraction of the incident light energy accounted for the heating of the electron gas. There is a critical value of the incident light intensity, below which the photoacoustic signal can be characterized only by effective thermophysical parameters. In the case of a strong electron-phonon interaction, if the temperatures of the charge carriers and the phonons are equal, the PAE phasefrequency characteristics can have a maximum in the region of low modulation frequencies of the light flux. The temperature dependence of the interband recombination cross section suppresses the nonmonotonicity of the frequency dependence of the phase of the photoacoustic signal.

The photoelectric effects in a semiconductor with uniform equilibrium charge carrier concentration are theoretically studied. It is shown that uniform illumination of the semiconductor with coordinate-dependent carrier mobility generates the emf. This volume photovoltaic effect is equally sensitive to the nonuniformity of the mobility of both the majority and minority charge carriers.

A new self-induced photovoltaic effect in a uniform semiconductor closed circuit is predicted due to inhomogeneous ionization of impurities. This photovoltaic effect features a nonlinear (cubic) dependence of the emf magnitude on the light intensity at its arbitrarily small value in the linear approximation with respect to the carrier density. As the intensity of the incident light increases, the nonlinearity decreases.

The possibility of the photo-emf generation in a bounded monopolar uniform multivalley semiconductor due to light-induced intervalley transitions in the Dember effect is predicted for the first time.

The theory of the dynamic photovoltaic effect is developed. It is shown that in a semiconductor sample that contains impurities changing its charge state under the influence of light, illumination by a modulated light flux of the "traveling wave" type leads to the appearance of the direct electric current. This dynamic effect is quasi-static one and is not associated with the appearance of a nonequilibrium space charge in a semiconductor. The magnitude and sign of the dynamic photo-emf are nonlinearly dependent on the velocity and the propagation direction of the wave of the modulation of the light flux intensity. There is an optimal wave velocity, at which the electric current in the circuit has a maximum value. The magnitude of the effect is characterized by a nonlinear (quadratic) dependence on the amplitude of the light intensity modulation, and is also sensitive to the mean value of the incident light intensity. At a sufficiently high mean intensity of the incident light, the photovoltaic effect is suppressed. In addition, with the appropriate selection of the parameters, one can observe a change in the sign of the photo-emf and the electric current in the circuit as the mean light intensity increases.

The thesis presents a theoretical study. Its results can be used to create new experimental methods for studying the thermal and electrophysical properties of conducting media, for controlling the parameters of semiconductor structures and electronic devices. In particular, it may extend the range of phenomena suitable for FAE-based investigations and improves accuracy of photothermal spectroscopy of bipolar semiconductors. The results obtained can also be used to optimize noise parameters and improve performance in microelectronic device development, to create far-IR and terahertz radiation detectors, to increase the efficiency of thermoelectric energy converters.

Keywords: nonequilibrium charge carriers, transport phenomena, diffusiondrift model, recombination, quasineutrality, thermoelectricity, photoelectric phenomena, photoacoustic effect.

3MICT

РОЗД	ІЛ 1 СТАН РОЗВИТКУ ПРОБЛЕМИ	32	
1.1	Дифузійно-дрейфове наближення в кінетичній теорії	32	
1.2	Нерівноважні носії в термоелектричних явищах	41	
1.3	Змінне температурне поле і фотоакустичний ефект 4		
1.4	Дифузія і дрейф в фотоелектричних процесах		
1.5	Висновки до Розділу 1		
РОЗД	ІЛ 2 ДИФУЗІЙНО-ДРЕЙФОВА МОДЕЛЬ ТРАНСПОІ	PT-	
НИ	Х ЯВИЩ	57	
2.1	Основні рівняння	57	
0.0	Promuni wyoru and andwrituo arothoroti wononi r foretowow		
2.2	т раничні умови для дифузійно-дрейфовой моделі в оагатоком-		
2.2	понентному середовищі	61	
2.2	понентному середовищі	61 62	
2.2	 понентному середовищі	61 62	
2.2	 граничні умови для дифузійно-дрейфовой моделі в багатоком- понентному середовищі	61 62 70	
2.2	 граничні умови для дифузійно-дрейфовой моделі в багатоком- понентному середовищі	61 62 70 76	
2.2	 граничні умови для дифузійно-дрейфовой моделі в багатоком- понентному середовищі	61 62 70 76 85	
2.2 2.3	 граничні умови для дифузійно-дрейфовой моделі в багатоком- понентному середовищі	61 62 70 76 85	
2.2 2.3	 граничні умови для дифузійно-дрейфовой моделі в оагатоком- понентному середовищі	 61 62 70 76 85 92 	

3.1	Основні проблеми	105	
3.2	.2 Час життя нерівноважного носія в біполярному напівпрові		
	нику	109	
	3.2.1 Рекомбінація і термодинамічна рівновага	109	
	3.2.2 Малі відхилення від термодинамічної рівноваги: ліній-		
	на теорія	115	
3.3	Кінетичні явища в умовах стаціонарної зовнішньої генерації		
	нерівноважних носіїв	125	
3.4	Стаціонарні рекомбінаційні процеси при неоднорідній темпе-		
	ратурі	131	
3.5	Висновки до Розділу З	136	
ΡΟЗΠ	ΙΠ Α Η Η ΕΡΙΒΗ ΟΒΑ ЖΗΙ ΟΤ ΓΕ ΒΕΛΓΑΤΟΚΟΜΠΟΗ ΕΗΤ	I	
но	ΜΥ ΠΠΑ 3ΜΟΠΟ ΠΙΓΗΟΜΥ CEPE ΠΟΒИΙΙΙΙ	-	
4 1	Механізми нерівноважності носіїв заряду	138	
4.2	Енергетична нерівноважність і генераційно-рекомбінаційний	100	
1.2	баданс	143	
	4.2.1 Олнотемпературна молель	147	
	4.2.2 Лвотемпературна модель	150	
4.3	Рекомбіналійний механізм нелінійності в теорії гарячих елек-	100	
1.0	тронів	152	
4.4	Енергетична нерівноважність як лжерело ЕРС	160	
4.5	Концентраційна нерівноважність в багатокомпонентному се-		
	редовищі	168	
4.6	Висновки до Розділу 4	174	
РОЗД	ІЛ 5 ТЕРМОЕЛЕКТРИКА В НЕРІВНОВАЖНИХ СИ	-	
CT	\mathbf{EMAX}	177	
5.1	Проблеми теорії термоерс в біполярному напівпровіднику	177	

19

5.2 Стаціонарна термоерс в біполярному напівпровіднику					
	новажними носіями. Квазінейтральне наближення 1				
5.3	Динамічна термоерс в однорідному біполярному напівпровід-				
	нику.		192		
	5.3.1	Поперечні температурні хвилі в однорідному напівпро-			
		віднику	195		
	5.3.2	Динамічний термоелектричний ефект в умовах квазі-			
		нейтральності	198		
	5.3.3	Постійний термоелектричний струм в змінному періо-			
		дичному температурному полі	203		
5.4	Динамічна термоерс в тонкоплівкових напівпровідникових при-				
	ладах		209		
	5.4.1	Дифузійне наближення	214		
	5.4.2	Наближення часу релаксації	216		
	5.4.3	Змінний термоелектричний струм в динамічному тер-			
		моелектричному ефекті	219		
5.5	Загаль	ьні властивості поперечного динамічного термоелектрич-			
	ного ефекту в напівпровідниках				
5.6	Висно	вки до Розділу 5	224		
DODT	П		_		
РОЗД		ФОТОТЕРМІЧНІ ПРОЦЕСИ В БШОЛЯРНИХ			
HA.	IIIBIIP	ОВІДНИКАХ	227		
6.1	Вивчення властивостей провідних середовищ фотоакустичним				
	методом				
6.2	Фотоа	кустичний ефект в однотемпературному наближенні	230		
	6.2.1	Фізична модель ФАЭ	230		
	6.2.2	Просторово-часовий розподіл носіїв струму в умовах			
		ΦAE	236		
	6.2.3	Псевдо-резонансний ефект	246		

6.3	В Впли	Вплив теплової генерації носіїв струму на фотоакустичний від-		
	гук н	апівпровідника	248	
6.4	4 Двот	емпературна модель фотоакустичного ефекту	251	
6.5	5 Елек	Електрон-фононна взаємодія в фотоакустичному ефекті		
6.6	б Висн	овки до Розділу 6	258	
PO3,	ДІЛ 7	ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ЯВИЩА В ОДНОРІДНІЙ	[
П	ЛАЗМІ	НАПІВПРОВІДНИКІВ	261	
7.1	1 Прос	торова неоднорідність перетину розсіювання носіїв стру-		
	му ян	к механізм виникнення фотоерс	261	
	7.1.1	Гетерогенне замкнуте електричне коло	265	
	7.1.2	Напівпровідникове замкнуте електричне коло	268	
	7.1.3	Зв'язок з фотоерс Дембера і об'ємною фотоерс	271	
7.2	2 Нелін	нійний самоіндукований фотоефект в однорідному біпо-		
	лярн	ому напівпровіднику	275	
	7.2.1	Зміна рухливості носіїв струму під впливом світла	276	
	7.2.2	Фотоерс в замкнутому напівпровідниковому колі	279	
7.3	3 Фото	ерс Дембера в багатодолинному монополярному напів-		
	прові	днику	287	
7.4	4 Пост	ійний струм в нестаціонарних фотоелектричних явищах	299	
7.5	б Висн	овки до Розділу 7	314	
вис	HOBKI	A	317	
СПИ	ICOK B	ИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	320	
дод	(ATOK	А. Список публікацій здобувача за темою дисерта	,—	
шi	 1		351	

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

АЧХ	- амплітудно-частотна характеристика		
BAX	- вольт-амперна характеристика		
ГУ	- граничні умови		
EPC	- електрорушійна сила		
ΦAE	- фотоакустичний ефект		
ΦCP	- фундаментальна система рівнянь		
ФЧХ	- фазово-частотна характеристика		
MPG	- Moving Photocarrier Grating experimental technique		
e	- елементарний заряд		
\hbar	- стала Планка		
k_B	- стала Больцмана		
x_0	- значення фізичної величини x у стані термодинамічної рівноваги		
$x_{n,p}$	- Індекси n,p визначають приналежність фізичної величини x до		
	електронної чи діркової підсистеми відповідно		
δx	- нерівноважне значення фізичної величини x		
α_T	- коефіцієнт температуропровідності		
D	- коефіцієнт дифузії		
\mathbf{E}	- напруженість електричного поля		
${\cal E}$	- електрорушійна сила		
g	- темп зовнішньої генерації		
g_T	- темп теплової генерації		
I_0	- інтенсивність світлового потоку		
j	- густина струму		
k	- ХВИЛЬОВЕ ЧИСЛО		
L_D	- дифузійна довжина		
n, p	- концентрація носіїв: електронів і дірок відповідно		

			•	•
n_1 , n_1	- параметри моле	лі Шоклі-Ріла-Хола	ломішкового	рівня
r_1, p_1	inapamorph mode	···· ······· · ·//// · ·/////	Aominiopoi o	PIDIM

- *n*_i власна концентрація напівпровідника
- *N*_T концентрація домішок
- *R* темп рекомбінації
- Т температура
- и рухливість
- α коефіцієнт Зеєбека
- *е*_q ширина забороненої зони напівпровідника
- ϵ діелектрична проникність
- μ хімічний потенціал
- u густина станів
- ho густина заряду
- *о* перетин захвату рекомбінації
- σ провідність
- au час життя
- φ електричний потенціал
- ψ електрохімічний потенціал
- Ω частота модуляції
- ω частота випромінювання

вступ

Актуальність теми. Вирішальну роль в успіхах сучасних комп'ютерних і телекомунікаційних технологій грає широке використання напівпровідникових пристроїв. З фізичної точки зору останні являють собою обмежені плазмоподібні середовища. Одним з методів, що знайшов широке використання для опису кінетичних явищ в таких середовищах і для моделювання роботи приладів твердотільної електроніки, є дифузійно-дрейфова теорія транспортних процесів. Її застосування для аналізу напівпровідникових приладів характеризується наступними факторами. По-перше, плазма напівпровідника в загальному випадку являє собою сукупність взаємодіючих між собою підсистем частинок декількох типів (носії заряду: електрони і дірки, легкі і важкі носії; пов'язаний заряд решітки, фонони та ін.). По-друге, навіть досить слабкі зовнішні впливи на плазму напівпровідника здатні помітно виводити її зі стану термодинамічної рівноваги, породжуючи в ній нерівноважні носії струму. Нарешті, складність системи, різноманітність поєднань внутрішніх параметрів і зовнішніх умов породжують велику кількість можливих фізичних ефектів, значну частину яких на сьогоднішній день не вивчено або вивчено недостатньо.

Одним з важливих наукових завдань в галузі фізичної електроніки є підвищення точності і фізичної адекватності фізичних моделей, що використовуються для опису транспортних процесів. Останнім часом було показано, що поява нерівноважних носіїв істотно впливає на кінетику багатокомпонентної системи навіть в добре відомих ефектах (наприклад, на термоелектричні і фотоелектричні процеси в біполярних напівпровідниках). Лінійна дифузійно-дрейфова теорія процесів перенесення в таких системах має ряд серйозних внутрішніх протиріч, усунення яких представлено в даній роботі. Ці протиріччя пов'язані з некоректним описом лінійної рекомбінації нерівноважних електрон-діркових пар в умовах стаціонарного транспорту в об'ємі напівпровідника і на межі розділу середовищ, особливо на контакті напівпровідника з металом в замкнутому електричному колі.

Уточнення дифузійно-дрейфової теорії представляє не тільки самостійний науковий інтерес, а й дозволяє передбачити ряд нових кінетичних ефектів в багатокомпонентній плазмі. Ця обставина є важливою, оскільки в даний час в світі ведеться активний пошук і дослідження нових фізичних ефектів в плазмоподібних середовищах, включаючи напівпровідники і напівпровідникові гетероструктури, які могли б стати основою для розробки нових електронних приладів. Особливий інтерес представляють ефекти, що придатні для створення датчиків фотонів низької енергії (далекого інфрачервоного випромінювання, випромінювання терагерцового діапазону та ін.).

Одним з пріоритетних завдань сучасної науки є розвиток відновлюваних джерел енергії. Важливим напрямком вирішення цього завдання є вдосконалення термоелектричних і фотоелектричних перетворювачів енергії. Поряд з пошуком нових, більш ефективних матеріалів вельми цікавим є дослідження можливості побудови ефективних перетворювачів на основі відомих матеріалів і технологічних процесів, але з використанням нових режимів і принципів роботи. Є експериментальні свідчення, що зазначені цілі можуть бути досягнуті в динамічному режимі роботи термоелектричних перетворювачів енергії. У той же час, фізичні процеси, що протікають в таких приладах в динамічних режимах, характеризуються переважанням нерівноважних носіїв струму і вивчені слабко.

Фотоелектричні і термоелектричні явища також знайшли широке застосування для експериментального дослідження властивостей матеріалів. Особливе місце серед них займають методики, засновані на фотоакустичному ефекті (ФАЕ) [35–37]. На даний момент за допомогою ФАЕ є можливість вимірювати властивості твердих, рідких і газоподібних речовин, контролювати технологічні процеси у виробництві. Іншим прикладом є метод рухомої решітки фотоносіїв (MPG) [38–40]. Обидві зазначені методики пов'язані з опроміненням досліджуваного зразка модульованим світловим потоком. При дослідженні біполярного напівпровідника в цих умовах в ньому з'являються нерівноважні носії струму, ігнорування яких здатне призводити до серйозних помилок вимірювання.

Таким чином, подальше вивчення особливостей прояву нерівноважності в багатокомпонентній (в тому числі, біполярній) системі є актуальною науково-технічною задачею.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота виконувалась відповідно до тематичних планів науково-дослідних робіт Інституту радіофізики та електроніки ім. О. Я Усикова НАН України в рамках держбюджетних тем "Електромагнітні та акустичні явища НВЧ-діапазону у твердотільних структурах" (номер держреєстрації 0196U006109), "Дослідження електромагнітних і акустичних явищ НВЧ діапазону в твердих тілах" (0100U006335), "Дослідження регулярних та стохастичних явищ, що обумовлені взаємодією електромагнітних хвиль і потоків заряджених часток з речовиною" (0103U002260), "Дослідження лінійних та нелінійних властивостей твердотільних структур із застосуванням електромагнітних хвиль НВЧ діапазону і заряджених часток" (0106U011978), "Вивчення взаємодії електромагнітних та звукових хвиль, а також заряджених часток з твердотільними структурами" (0112U000211), "Дослідження взаємодії електромагнітних та звукових хвиль, а також заряджених частик з наноструктурами та метаматеріалами" (0117U004038).

Мета і задачі дослідження. Метою дисертаційної роботи було вирішення наукової проблеми стосовно розвитку лінійної дифузійно-дрейфової теорії транспортних процесів в багатокомпонентних системах для вивчення взаємодії нерівноважних носіїв заряду з електромагнітним полем в твердотільній плазмі. Для досягнення поставленої мети було розв'язано наступні *задачі*:

- Розробка методу коректного опису стаціонарної об'ємної і поверхневої рекомбінації, отримання і систематизація граничних умов (ГУ) для контактів різних типів при наявності нерівноважних носіїв струму.
- Дослідження нових фізичних ефектів і закономірностей в плазмі біполярного напівпровідника з нерівноважними носіями. Зокрема, дослідження впливу нерівноважностей різного типу на термоелектричні і фотоелектричні явища.
- Визначення закономірностей формування електрорушійної сили (ЕРС) в нестаціонарних умовах в багатокомпонентному провідному середовищі.

Об'єкт дослідження — Транспортні процеси в плазмоподібних середовищах з кількома типами нерівноважних носіїв заряду, зокрема, термоелектричні і фотоелектричні явища в біполярних напівпровідниках.

Предмет дослідження — Закономірності впливу нерівноважності на макроскопічні властивості середовища і параметри електронних приладів, зокрема, опір, величину ЕРС і струму короткого замикання.

Методи дослідження — метод послідовних наближень, стандартні математичні методи вирішення систем лінійних диференціальних рівнянь з постійними коефіцієнтами, метод Фур'є, чисельні методи рішення диференціальних рівнянь (метод кінцевих різниць).

Наукова новизна одержаних результатів полягає в тому, що у дисертації вперше отримано низку важливих результатів, зокрема:

1. Отримано загальну самоузгоджену систему граничних умов, що придатна для дослідження стаціонарних транспортних процесів у замкнутому та розімкнутому колах в структурах з напівпровідників і металів в довільних поєднаннях при будь-якому співвідношенні між розмірами зразка і радіусом екранування Дебая.

- Запропоновано нову модель рекомбінаційних процесів в неоднорідних температурних полях для лінійної дифузійно-дрейфової теорії транспортних процесів в обмежених плазмоподібних середовищах з кількома типами носіїв струму.
- 3. Встановлено умови появи і основні закономірності нового рекомбінаційного механізму нелінійності в теорії гарячих електронів.
- Вперше продемонстровано можливість появи електрорушійної сили в біполярних напівпровідниках з гарячими носіями внаслідок їх нерівноважної теплової генерації.
- 5. Розширено теорію термоелектричних явищ для середовища з нерівноважними носіями заряду декількох типів (електронів та дірок). Традиційна теорія термоелектрики у біполярному напівпровіднику є граничним випадком запропонованої теорії при наявності єдиного рівня Фермі (наприклад, при гранично сильній рекомбінації).
- 6. Передбачено принципово новий поперечний динамічний термоелектричний ефект у монополярних і біполярних напівпровідниках, встановлено умови його прояву, отримано функціональну залежність струму короткого замикання від властивостей напівпровідника і параметрів збудження. Теоретично продемонстровано можливість використання передбаченого ефекту для виміру рухливості носіїв та як перетворювача теплової енергії у електричну.
- Вперше досліджено роль нерівноважних носіїв в фотоакустичному ефекті (ФАЕ) з врахуванням температурної залежності темпу рекомбінації

та впливу термоелектричного поля. Досліджено вплив довжини зразка, поверхневої теплопровідності його задньої стінки, температурної залежності перетину міжзонної рекомбінації та сили електрон-фононної взаємодії на апмлітудно-частотну та фазово-частотну характеристики ефекту.

- 8. Всебічно досліджено можливість та особливості формування фотоерс у концентраційно-однородному напівпровіднику за рахунок просторової неоднорідності рухливості носіїв струму. Вперше показано, що наявність у напівпровіднику домішок, здатних міняти свій зарядовий стан під дією освітлення, здатна приводити до прояву двох нових фотоелектричних ефектів — нелінійного самоіндукованого фотоефекту і динамічного фотоефекту. Обидва передбачених ефекти відрізняються нелінійною залежністю величини фотоерс від інтенсивності освітлення при як завгодно малому її рівні.
- 9. Вперше показано можливість появи і вивчено основні закономірності постійного електричного струму в динамічному фотоелектричному ефекті (який полягає у генерації електрорушійної сили під впливом світлового потоку з інтенсивністю, що змінюється за законом "біжучої хвилі").
- Передбачено можливість генерації фотоерс Дембера в монополярному багатодолинному напівпровіднику за рахунок індукованих світлом міждолинних переходів без генерації електрон-діркових пар. Запропоновано фізичну інтерпретацію цього явища.

Практичне значення одержаних результатів. Робота має теоретичний характер. Її результати можуть бути використані для створення нових експериментальних методів дослідження теплофізичних і електрофізичних властивостей провідних середовищ, контролю параметрів напівпровідникових структур і електронних приладів, в тому числі в виробничому циклі. Ряд результатів можуть бути важливими для оптимізації шумових параметрів і поліпшення швидкодії мікроелектронних приладів, що проектуються, а також при створенні детекторів далекого інфрачервоного і терагерцового випромінювання. При подальшому розвитку викладена теорія може бути використана для підвищення ефективності термоелектричних перетворювачів енергії.

Особистий внесок здобувача. У дисертації узагальнені результати досліджень, що отримано за безпосередньою участю її автора. Всі наведені в дисертації результати отримані автором особисто та у співавторстві. В статті [1] особистий внесок здобувача полягає в участі у постановці мети, аналізу впливу ГУ, виборі чисельних алгоритмів та обговоренні результатів. У статтях [2, 3, 18, 21] дисертанту належить визначальний внесок у проведення розрахунків та аналіз отриманих результатів. У статтях [4, 8, 12] зроблено значний внесок у постанову задачі, вибір алгоритмів розрахунку та інтерпретацію результатів. У роботах [10, 14, 15] здобувачем проаналізовано граничні випадки та систематизовані ГУ, взято участь у обговоренні і формулюванні результатів. У роботах [5, 11] запропоновано засіб врахування рекомбінації на контакті напівпровідника з металом. У статтях [6, 7, 9, 13] зроблено пропорційний внесок у постановку проблеми, розрахунки та аналіз результатів. Статті [16, 17, 19, 20, 22] опубліковані дисертантом без співавторства.

Апробація результатів дисертації. Результати роботи за темою дисертації доповідалися на семінарі фізики твердого тіла та семінарі теоретичної фізики Інституту радіофізики та електроніки ім. О. Я. Усикова НАН України, а також на ряді наукових конференцій: The 15th European Conference on Thermophysical Properties, Wurzburg, Germany, 1999; The 3rd Annual Workshop on Simulation and Characterization Techniques in Semiconductors, Mexico D. F., Mexico, 1999; The 22nd International Conferences on Microelectronics, Nis, Yugoslavia, 2000; The 25th International Conference on the Physics of Semiconductor, Osaka, Japan, 2000; The 22nd International Conference on Thermoelectrics, La Grande-Motte, France, 2003; IX Міжнародна конференція MKФТТП-IX, Івано-Франківськ, Україна, 2003; The 14th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors, Chicago, USA, 2005; The XVI International Materials Research Congress, Cancun, Mexico, 2007; The 26nd International Conferences on Microelectronics, Nis, Serbia, 2008; The 28th International Conference on Materials, Surfaces and Vacuum, Veracruz, Mexico, 2008; The VIII International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Puebla, Mexico, 2015; The IX International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Mazatlan, Mexico, 2016 та ін.

Публікації. Основні результати дисертації опубліковані у 34 наукових працях, у тому числі у 22 статтях у міжнародних фахових наукових журналах [1-22] та 12 тезах доповідей та матеріалах міжнародних конференцій [23-34].

Структура і обсяг дисертації. Дисертація складається з анотації, вступу, семи розділів, висновків, списку використаних джерел і одного додатка. Повний обсяг дисертації складає 356 сторінок. Робота містить 34 рисунки, 1 таблицю та 331 бібліографічне посилання.

Автор висловлює щиру подяку своєму Вчителеві д.ф.-м.н., проф. Гуревічу Ю. Г. за допомогу, корисні поради, дискусії та наукові консультації. Автор глибоко вдячний усім своїм співавторам за плідну и приємну спільну працю; д.ф.-м.н., проф., акад. НАН України Яковкенко В. М., зав. відділу теоретичної фізики IPE ім. О. Я. Усикова НАН України д.ф.-м.н., проф., член-кор. НАН України Ямпольському В. О., а також усім співробітникам відділу — за всебічну підтримку і допомогу в роботі.

РОЗДІЛ 1

СТАН РОЗВИТКУ ПРОБЛЕМИ

1.1 Дифузійно-дрейфове наближення в кінетичній теорії

Складність дослідження напівпровідникової плазми, що представляє собою сукупність декількох взаємодіючих підсистем квазічастинок, різноманітність постановок задачі (поєднання різних матеріалів, різні масштаби розмірів приладу і характерних довжин фізичних процесів, які протікають в ньому) привели до того, що зараз існує чимало теоретичних моделей, що використовуються для вивчення транспортних процесів в напівпровідникових приладах мікроелектроніки. Одна з можливих класифікацій таких моделей наведена на рис. 1.1.



Рисунок 1.1 — Ієрархія теоретичних моделей дослідження транспортних процесів

Вибір конкретної моделі для дослідження того чи іншого фізичного явища є компромісом між точністю моделі і її обчислювальною простотою. З цієї точки зору однією з найбільш вдалих моделей, що знайшла широке застосування для дослідження і моделювання мікроелектронних пристроїв, є дифузійно-дрейфова модель кінетичних процесів [41, 42]. Її успіх багато в чому обумовлений такими обставинами. Незважаючи на свою достатню математичну простоту, ця модель дозволяє враховувати як взаємодію підсистем, так і міжчасткову взаємодію (міжчасткові зіткнення і розсіювання) всередині підсистеми квазічастинок. При цьому в багатьох фізично важливих випадках модель залишається коректною і при сильних зовнішніх впливах на напівпровідник завдяки перенормуванню параметрів системи (наприклад, у випадку наявності гарячих носії струму).

Дифузійно-дрейфовий феноменологічний опис напівпровідникової плазми було запропоновано Ван Рузброєком в 1950 р. [42]. Трохи пізніше був показаний зв'язок дифузійно-дрейфової моделі з мікроскопічними теоріями. У математичній літературі широко вивчалося питання про строге виведення дифузійно-дрейфових рівнянь для напівпровідника з кінетичного рівняння Больцмана. Так, була доведена можливість звести його до лінійної дифузійно-дрейфової моделі [43]. Цей результат для системи з пуасоновською взаємодією в одновимірному випадку було отримано в роботі [44]. Узагальнення [44] на багатовимірну систему виконано в [45].

Дифузійне наближення для кінетичного рівняння Больцмана для виродженої статистики вивчалося в роботах [46, 47]. Математично строге обґрунтування застосовності дифузійно-дрейфової моделі та її зв'язок з мікроскопічною теорією для сингулярних перетинів оператора розсіювання, що моделює фононну взаємодію, отримано в роботі [48] для лінійних операторів зіткнень, а в роботі [49] — для нелінійних операторів. Також було показано, що дифузійно-дрейфова модель може бути отримана з рівняння Власова-Фоккера-Планка [50]. Математичний аналіз стаціонарних рівнянь було проведено в [51]. Проблема перехідних процесів з ГУ Неймана вивчена в [52]. Глобальне існування та єдиність рішення в реальних фізичних і геометричних умовах були доведені в роботі [53]. Дифузійно-дрейфова модель для виродженої плазми напівпровідників була проаналізована в [54] (існування рішень) і [55] (єдиність стаціонарних рішень).

Фундаментальна система рівнянь (ФСР) для напівпровідника в дифузійно-дрейфовому наближенні знайшла широке застосування для моделювання електронних приладів. Перше чисельне рішення дифузійно-дрейфовий рівнянь було представлено в 1964 р [56]. Кілька поліпшена схема Шарфеттера-Гуммеля інтерпретувалася як змішаний метод кінцевих елементів [57– 59]. Питання використання дифузійно-дрейфової моделі в чисельному моделюванні напівпровідникових приладів узагальнено в монографіях [60, 61].

З математичної точки зору дифузійно-дрейфова модель являє собою систему нелінійних диференціальним рівнянь в частинних похідних. Тому для її вирішення необхідно сформулювати фізично адекватні ГУ. Однак, на відміну від ФСР моделі, питання про відповідні ГУ для неї мало висвітлювався в літературі. У роботах [62–67] робилися спроби отримати ГУ, придатні для чисельного моделювання n^+nn^+ -структур, на основі мікроскопічного розгляду балістичного транспорту носіїв струму в примежовому шарі. При цьому n^+ -області передбачалися протяжними і наявність контактів враховувалося лише частково, тому отримані ГУ можуть бути застосовні лише для зазначених окремих випадків.

Спроби обійти це обмеження були зроблені в роботах [68–70], де на основі строгого кінетичного розгляду були отримані ГУ в дифузійно-дрейфовому наближенні для малого відношення довжини вільного пробігу до довжини напівпровідникового приладу. Однак, об'єктом розгляду в цих роботах є монополярні середовища, а також не враховується рекомбінація в примежевому шарі і специфічні поверхневі механізми провідності [71] та рекомбінації в площині контакту.

З математичної точки зору проблема ГУ для дифузійно-дрейфової моделі вперше була проаналізована в роботі [72], де було показано, що використання ГУ третього роду забезпечує більш точне рішення, ніж ГУ Діріхле. Однак, отримані в [72] результати придатні для аналізу роботи напівпровідникових пристроїв в режимі розімкнутого кола, так як не враховують можливий струм носіїв через контакт. Слід зазначити, що в літературі досить часто [73, 74] для опису роботи приладу в замкнутому колі (тобто при протіканні електричного струму через контакт) використовуються безструмові ГУ. Спроба врахувати вплив струму, що протікає через контакт, була зроблена в роботах [75–77]. Однак ці роботи сфокусовані на математичних аспектах проблеми і конкретні макроскопічні вирази для густин електронного та діркового струмів через контакт в них отримані не були.

Останнім часом з'явився ряд робіт, що помилково трактують вплив поверхні на транспортні процеси. У роботах [78–80] невірно формулюється умова зшивання електричного і електрохімічного потенціалів. Стверджується, що струм через площину розділу двох середовищ пропорційний стрибку електричного потенціалу у цій площині. Однак дане ГУ невірно завжди, оскільки за відсутності квазінейтральності [81–84] (а, як наслідок, і подвійного зарядженого шару в площині контакту) електричний потенціал безперервний [85]. У наближенні квазінейтральності, по-перше, дане ГУ є зайвим. По-друге, скачок електричного потенціалу, що фігурує в ньому, є невідомим, і як буде показано в розділі 2.2, може бути обчислений вже після рішення системи рівнянь безперервності струмів носіїв.

Невірний вибір ГУ призводить до помилкових висновків про фізику транспортних явищ. Так, наприклад, через вказаний некоректний вибір ГУ в роботах [86–88] затверджується, що нерівноважний об'ємний заряд на масштабі довжини Дебая впливає на транспорт носіїв. У той же час, в [13] показано, що даний об'ємний заряд в принципі не може впливати на транспортні процеси. З тієї ж причини є невірним твердження про вплив поверхневих зарядів в наближенні квазінейтральності на транспортні явища. Певні труднощі при отриманні ГУ представляє коректне врахування поверхневої рекомбінації в контакті двох середовищ, через який протікає електричний струм. Часто, в тому числі в відомих монографіях [83, 89, 90], наводяться ГУ виду $j_n = s_n \delta n_s$, де j_n - густина струму носіїв (для визначеності - електронів) через контакт, s_n - швидкість поверхневої рекомбінації, δn_s - концентрація нерівноважних носіїв на границі. Однак, дане ГУ фізично відповідає розімкненому колі. Воно не враховує перенесення заряду через поверхню розділу, а весь описуваний їм струм обумовлений виключно поверхневої рекомбінацією. Цей висновок стає очевидним, якщо покласти $s_n = 0$.

Істотній прогрес в формулюванні ГУ для дифузійно-дрейфової моделі в режимі замкнутого кола був досягнутий в роботі [91], де був запропонований метод отримання ГУ, що коректно враховує рекомбінацію в перехідному шарі при протіканні через нього електричного струму. Однак, переносячи розроблену теорію для контакту двох напівпровідників на випадок контакту напівпровідника з металом, автори [91] не звернули уваги на можливість появи на такому контакті специфічного явища, аналогічного поверхневої рекомбінації, що зменьшує можливість застосування запропонованих ними виразів. У розділі 2.2 наведено докладне дослідження цієї проблеми і запропонований варіант її вирішення.

Важливою частиною дифузійно-дрейфового опису транспортних явищ в багатокомпонентних плазмоподібних середовищах є моделювання процесів генерації і рекомбінації в них. Врахування цих процесів важливо не тільки з формальної точки зору (тому що воно необхідно для замикання ФСР), але й тому, що рекомбінація є одним з найважливіших фізичних процесів, що визначають властивості і придатність напівпровідника до застосування в електронних пристроях. Зокрема, саме механізм випромінювальної рекомбінації критично важливий для виробництва твердотільних лазерів на напівпровідникових гетеропереходах, світлодіодів [92–94], а також інших оптоелектронних пристроїв і сонячних батарей [95]. Генераційно-рекомбінаційні процеси можуть приводити до появи негативної диференційної провідності, струмовим нестійкостям і явищам самоорганізації в напівпровіднику [96]. Тому не дивно, що механізми рекомбінації привернули увагу дослідників практично з моменту виникнення прикладного інтересу до напівпровідників [97].

Перші експериментальні результати виявилися загадковими: перетин захоплення електрона в акті рекомбінації виявилося аномально великим, знадобилося понад 20 років для пояснення цієї невідповідності [98]. Надалі увага дослідників була сконцентрована на конкретних фізичних механізмах рекомбінації: безвипромінювальній міжзонній, каскадній через домішкові центри, випромінювальній, багатофононній, Оже-рекомбінації та ін.. [98–101].

Незважаючи на тривалу історію і вражаючі досягнення у вивченні рекомбінаційних процесів в напівпровідниках і газорозрядної плазмі, до сих пір залишається ряд невирішених проблем [102–104].

Що стосується використання тієї чи іншої моделі рекомбінаційного механізму в дифузійно-дрейфовому наближенні, то тут склалася дещо парадоксальна ситуація. З одного боку, запропоновані фізично точні моделі опису рекомбінації при довільному рівні збудження (концентрації нерівноважних носіїв струму). На жаль, ці моделі є нелінійними, тому повсюдно для отримання аналітичних результатів проводиться їх лінеаризація. Спочатку такі лінеаризовані моделі використовувалися для знаходження характерних параметрів механізмів рекомбінації (перетин розсіювання, час життя) електронів і дірок за експериментальними даними і відповідали динамічному режиму транспорту (імпульсне або періодичне збудження). Потім ці лінеаризовані моделі без додаткового обґрунтування були перенесені на випадок стаціонарного біполярного транспорту нерівноважних носіїв в напівпровідниках. Слід зазначити, що строгого математичного аналізу сумісності тієї чи
іншої моделі рекомбінації з ФСР не проводилося, як і умов існування поняття індивідуального часу життя носіїв струму в різних випадках. В результаті, на даний час в літературі [73, 83, 90, 105–107] для лінійного дифузійно-дрейфового наближення широко використовуються моделі рекомбінації, несумісні з рівняннями Максвела або з ФСР наближення. У розділі 3 докладно обговорюється ця проблема і спосіб її подолання.

Рекомбінація є ключовою особливістю при описі кінетики носіїв струму в напівпровідниках, оскільки вона сильно впливає на електричні властивості напівпровідника при будь-яких рівнях зовнішнього впливу. Напівпровідникові матеріали знайшли широке застосування в електронній промисловості саме завдяки своїм нелінійним властивостями, які, в свою чергу, пояснюються тим, що в них легко з'являються нерівноважні носії та фонони навіть при відносно слабких зовнішніх впливах. Електричне поле, освітлення, іонізуюче випромінювання, нагрівання і інші зовнішні впливи легко виводять напівпровідникову систему зі стану термодинамічної рівноваги, що приводить до появи нерівноважних носіїв. Оскільки біполярний напівпровідник є системою трьох взаємодіючих підсистем (електронів, дірок і фононів), поява неравновесности в одній з них виводить з рівноважного стану і інші. У загальному випадку для вивчення транспортних процесів в напівпровідниках необхідно знайти нерівноважні функції розподілу носіїв струму і фононів, наприклад, вирішивши кінетичні рівняння Больцмана. Однак, в більшості практично значимих випадків виявляється можливим ввести нерівноважні термодинамічні характеристики: нерівноважні хімічні потенціали, електрохімічні потенціали (квазірівні Фермі) і температури для кожної підсистеми носіїв струму і фононів.

Теорія гарячих електронів в напівпровідниках охоплює безліч фізичних механізмів, що пояснюють прояв нелінійності в однорідному напівпровіднику при наявності розігріву носіїв (перегрівні механізми нелінійності, яскра-

вим проявом якої можуть бути ділянки негативної диференціальної провідності на ВАХ напівпровідникового зразка). До таких механізмів відносяться ударна іонізація [73, 108], зміна часу життя в сильному електричному полі [109], перерозподіл носіїв між долинами в багатодолинному напівпровіднику [110], непараболічность закону дисперсії електронів [111, 112]. Класична теорія транспорту струму гарячими носіями була розвинена досить давно і вельми докладно [113–120]. При цьому, як правило, вважалося, що нелінійність ВАХ пов'язана з зміною рухливості носіїв струму за рахунок зміни їх середньої енергії. Деяке число робіт було присвячено нелінійності, обумовленої ударної іонізацією [73, 108], зміною часу життя [109], міждолинним перерозподілом носіїв [110] або непараболічностью закону дисперсії носіїв струму в сильних полях [111, 112]. У однодолинних напівпровідниках, в нехтуванні процесами типу ударної рекомбінації і зміни часу життя в сильних полях, зазвичай вважалося [113–119], що розігріву піддаються тільки носії, вже існуючі в зонах, тобто в процесі розігріву концентрація носіїв залишається рівною її значенням в стані термодинамічної рівноваги.

Однак, як показано в роботі [121], існує ще один механізм нелінійності, обумовлений тим, що порушення енергетичної рівноваги між електронами і дірками (тобто різниця між їх температурами) неминуче приводить до порушення рівноваги між концентраціями електронів в зоні провідності і валентній зоні. Ця ідея вперше була представлена в роботі [122]. Однак через припущення про незмінність заселеності домішкового рівня від нагрівання, її результати виявляються неправильними, якщо нагрівання електронів та дірок різне (тобто температури електронів і дірок не рівні між собою). Крім того, залишилося невивченим питання про умови прояву даного ефекту. На жаль, незважаючи на експериментальне підтвердження існування даного механізму нелінійності [123, 124], його дослідження не отримало подальшого розвитку і він, по суті, був забутий. Детальне теоретичне дослідження механізму нелінійності, викликаної порушенням балансу між процесами захоплення електронів провідності і їх теплової генерації, було опубліковано в [2] і приведено в розділі 4.3.

Можливість перевизначення кінетичних і термодинамічних параметрів при сильному збудженні плазмоподібних середовища, з одного боку, дозволяє розширити сферу застосування дифузійно-дрейфового опису, не обмежуючись тільки слабким зовнішнім впливом. З іншого боку, у зв'язку з цим є доцільним виділити окремі випадки нерівноважності, в залежності від того, який параметр відрізняється від свого значення в стані термодинамічної рівноваги. Класифікація та взаємозв'язок різних типів нерівноважності наведені в Розділі 4.

Необхідно підкреслити, що і при слабкому збудженні напівпровідника, в лінійному наближенні нерівноважні носії впливають на ВАХ напівпровідникового приладу [125]. Цей результат, що сильно суперечить існуючому уявленню про те, що нерівноважні процеси в плазмі актуальні лише в сильних полях, може бути важливим для проектування низьковольтних мікропотужних пристроїв твердотільної електроніки [126]. У той же час, було розроблено методи експериментального дослідження нерівноважних носіїв, що відрізняються високою чутливістю і роздільною здатністю [127–129] і дають змогу експериментальної верифікації теорії нерівноважності.

Значна роль нерівноважних носіїв в лінійної дифузійно-дрейфової теорії не обмежується виключно електричними проблемами. Необхідність врахування нерівноважності в лінійному наближенні є дуже загальним результатом, оскільки нерівноважні носії, створені різними фізичними джерелами (наприклад, фотогенерацією) поводяться схожим чином [78, 130–132]. Зокрема, було показано, що опір напівпровідникового зразка є формально однаковим і не залежить від зовнішнього впливу на зразок (електричний потенціал [125] або градієнт температури [133]).

1.2 Нерівноважні носії в термоелектричних явищах

Одним з найбільш відомих фізичних ефектів, викликаних енергетичною нерівноважностю в плазмоподібному середовищі, що має довгу історію досліджень і знайшов широке практичне застосування, по праву можна вважати термоелектричний ефект Зесбека. Його відкриття відносять до 1821 р. [134, 135], хоча є підстави вважати, що цей ефект був виявлений раніше [136– 138]. Подальше вивчення термоелектричних ефектів характеризуються декількома піками інтересу. Так, протягом кількох десятиліть в середині XIX століття були виявлені основні термоелектричні явища, запропоновано їх макроскопічний опис [139] і визначено можливе практичне застосування. Протягом наступного століття термоелектричні явища досліджуються мало, із значних досягнень цього періоду можна назвати роботи [140, 141], які встановили критерії ефективності перетворення енергії в термоелектричних явищах. В кінці 30-их років спостерігається новий сплеск інтересу до термоелектричних явищ, багато в чому пов'язаний з вивченням властивостей напівпровідників і роботами дослідницької групи А. Ф. Іоффе [142, 143]. У цей період побудовані перші мікроскопічні теорії термоелектрики, відкрито багато з сучасних термоелектричних матеріалів, створені практичні зразки термогенераторів [142, 144, 145]. Потім знову спостерігається зниження дослідницького інтересу до термоелектричних явищ аж до кінця 70-их років минулого століття, коли поновилися активний пошук і створення ефективних термоелектричних матеріалів на основі нових досягнень і технологій у фізиці напівпровідників і матеріалознавстві [146–148].

Незважаючи на вражаючу історію дослідження термоелектрики, вивчення цього кола фізичних явищ ще далеко до завершення. Якщо розглядати термоелектричний перетворювач як деяке плазмоподібне середовище (що характеризується провідністю σ і коефіцієнтом Зеєбека α), яке зазнає вплив електричного **E** і магнітного **H** полів та має неоднорідну температуру $T(\mathbf{r})$ (**r** - радіус-вектор), то має місце велика кількість комбінацій фізичних параметрів, при яких поведінка системи може істотно відрізнятися і які повинні бути вивчені окремо. Сучасний стан досліджень термоелектричних явищ за такою класифікацією наведено в Таблиці 1. Таким чином, на сьогоднішній день є глибоке розуміння термоелектричних процесів в досить вузькому діапазоні умов, ще менше їх число вдалося втілити в практику.

Таблиця 1.1.

	σ	$\tilde{\sigma}$	σ	$\tilde{\sigma}$	σ_{ij}	σ	σ_{ij}	$\tilde{\sigma}$	$\tilde{\sigma}$	σ_{ij}	σ	$\tilde{\sigma}$	$ ilde{\sigma}_{ij}$	$\tilde{\sigma}_{ij}$
	α	α	$\tilde{\alpha}$	$\tilde{\alpha}$	α	α_{ij}	$lpha_{ij}$	α	$lpha_{ij}$	$\tilde{\alpha}$	\tilde{lpha}_{ij}	$\tilde{\alpha}_{ij}$	$\tilde{\alpha}$	\tilde{lpha}_{ij}
∇T	_	_	0	•	_	0	•	_	?	0	?	?	?	?
$\nabla T, \mathbf{H}$	•	0	0	•	?	0	0	0	0	?	?	?	?	?
$\nabla T, \mathbf{E}$?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
$\nabla T, \mathbf{E}, \mathbf{H}$?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
$\nabla T(t)$	0	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?	?

Плазмоподібна середа як перетворювач енергії.

Умовні позначення: \tilde{x} - просторова неоднорідність, x_{ij} - анізотропія відповідних величин; "•" - використовується, "0" - вивчається, "?" - невідомо, "_" - неможливо [149].

Але навіть для найпростішого випадку класичного термоелектричного ефекту на контакті ізотропних однорідних напівпровідникових середовищ залишається ряд невирішених важливих теоретичних питань. Можливо, з огляду на фізичну простоту і ясність теорії, спочатку створеної для металів і згодом розширеної на напівпровідники, вона однаковим чином застосовується як для монополярних, так і для біполярних середовищ [142, 145, 148, 150–153]. Помилковість такого підходу вперше була вказана в роботі [133] і пов'язана з можливістю існування в біполярному напівпровіднику квазірівнів Фермі. Експериментальне підтвердження наявності проблеми в раніше відомій теорії термоелектрики при її застосуванні до біполярних напівпровідників і коректність запропонованого в [133] підходу були отримані в роботах [154, 155]. У розділі 5.2 (за матеріалами [5, 7, 23, 25]) розвинена запропонована в [133] теорія термоелектрики з урахуванням нових ГУ (розділ 2.2) і самоузгодженої моделі рекомбінації в стаціонарних умовах (розділ 3). Необхідно відзначити, що зазначені результати були отримані в нехтуванні температурною залежністю перетину рекомбінації. Врахування останньої було пізніше зроблено Ю. Г. Гуревичем і І. Лашкевичем в роботах [156, 157].

Сучасні дослідження термоелектрики ведуться за декількома напрямками. По-перше, великі зусилля сконцентровані на пошуку нових термоелектричних матеріалів [158–161] і їх комбінацій [162]. Зокрема, інтерес представляють напівпровідники і метаматеріали зі складною зонної структурою (багатозонні напівпровідники і ін.) [163–165].

Другим напрямком є створення термоелементів на нових принципах або режимах роботи [166–168]. Прикладом таких розробок є термоперетворювач на поперечному термоелектричному ефекті [151, 169]. На відміну від традиційних термоелектричних явищ, в яких напрямки протікання струму і градієнта температури збігаються, в поперечному термоелектричному ефекті ці напрямки ортогональні. При цьому, в основі вказаного ефекту лежать або анізотропія напівпровідника, або наявність зовнішнього магнітного поля. Іншим способом підвищення ефективності термоелектричних елементів є використання динамічного режиму їх роботи [170–173]. В даний час це питання вивчено зовсім недостатньо і відноситься, в основному, до вимірювання властивостей матеріалів в змінних температурних полях [174, 175] або до перехідних процесів в термоелектричних пристроях [176–180].

В [174, 175] було показано, що використання динамічного температурного режиму дозволяє отримувати більше інформації про властивості досліджуваного середовища. В роботі [177] наведено теоретичний аналіз малосигнальної моделі термоелектричного елемента в динамічному режимі роботи. Відгук термоперетворювача на температурне збудження вперше проаналізовано в [181]. Робота термоелемента з залежними від часу параметрами вивчалася в [182], результати чисельного моделювання перехідних процесів в термоперетворювачах наведено в [182–186].

У багатьох роботах [187–192] (хоча дослідження в [187, 188] і не мають прямого відношення до напівпровідникових термоелементів) було виявлено, що ефективність роботи термоелектричного перетворювача енергії в динамічному режимі не характеризується виключно термоелектричними параметрами використовуваних матеріалів і може значно підвищуватися.

У роботах [19, 20] вперше передбачено поперечний динамічний термоелектричний ефект у однорідному ізотропному напівпровідниковому середовищі (див. Розділи 5.3–5.4 дисертації), який потенційно поєднує в собі згадані вище переваги.

На відміну від слабкої енергетичної нерівноважності, описуваної традиційними теоріями термоелектричних явищ, сильна енергетична неравноваженість може породжувати в плазмоподібних середовищах нові фізичні ефекти. Зокрема, розігрів електронної підсистеми може приводити до виникнення ЕРС [193], що пояснюється істотною відмінністю функції розподілу електронів від рівноважної. В роботі [18] передбачений ще один фізичний механізм утворення термоерс в біполярному середовищі з гарячими носіями струму, докладно він представлений в Розділі 4.4. На відміну від [193], ефект, що передбачено, викликається температурною залежністю швидкості теплової генерації носіїв струму і може проявлятися тільки в біполярних напівпровідниках.

1.3 Змінне температурне поле і фотоакустичний ефект

У 1880 р А. Белл виявив [35], що коли промінь сонячного світла, що періодично переривається, потрапляє на тверде тіло в закритій комірці, утворюється звуковий сигнал, який може бути почутий за допомогою слухової трубки, що прикріплена до комірки. Аналогічний ефект був зареєстрований Дж. Тіндалем [194] і В. Рентгеном [195] з використанням штучних джерел світла. Виявлений ефект розглядався як якийсь фізичний курйоз, що очевидно не має ніякої практичної цінності, і незабаром був забутий. Тільки через півстоліття ФАЕ в газах знову привернув до себе увагу, був зрозумілий і знайшов застосування в якості зручного методу для аналізу властивостей і складу парів і газів. Однак, ФАЕ за участю твердих тіл ігнорувався протягом майже століття, а задовільне теоретичне пояснення ефекту з твердими речовинами було відсутнє.

Останнім часом інтерес до ФАЕ відродився [37, 196–202], розроблені спектроскопічні методи вивчення речовин в будь-якому агрегатному стані, будь-якого хімічного складу, включаючи біологічні об'єкти і дослідження в медицині. Перша напівкількісна теорія, що дозволила використовувати ФАЕ з твердими матеріалами була запропонована А. Розенцвейгом і А. Гершо [203–205] і отримала подальший розвиток в роботах [206, 207]. Ці моделі, як було встановлено, дають розумно гарну згоду з експериментальними результатами для твердих і рідких зразків.

Основна мета зазначених теоретичних моделей полягає в інтерпретації сигналу ФАЕ з точки зору оптичного поглинання в зразку. У роботах [203– 207] змодельовано вплив термофізичних параметрів системи для встановлення зв'язку між спектром ФАЕ і спектром поглинання. Робота [208] уточнює теорію, представляючи рішення пов'язаних рівнянь для тиску і температури в зразку та газовому середовищі фотоакустичної комірки для рідких і твердих зразків. В роботі [209] було показано, що абсолютні коефіцієнти поглинання можуть бути визначені в будь-якому оптичному діапазоні довжин хвиль, вимірюючи сигнал ФАЕ як функцію частоти модуляції світлового потоку. В роботі [210] була використана фазово-частотна характеристика (ФЧХ) ФАЕ для визначення теплових властивостей прозорих матеріалів.

В даний час фототермічні методи широко використовуються в дослідженнях твердих тіл, зокрема напівпровідників [211]. С кількісної точки зору, основа для теоретичного опису ФАЕ в напівпровідниках також була закладена в згаданій вище роботі А. Розенквейга і А. Гершо [205] і в цілому є загальноприйнятою. Згідно [205], первинне джерело акустичного сигналу в осередку виникає з періодичного теплового потоку, спрямованого з твердого тіла в навколишній газ, оскільки тверда речовина циклічно нагрівається при поглинанні модульованого світла. Тільки відносно тонкий шар газу, що прилягає до поверхні твердого зразка реагує на періодичний потік тепла від твердого тіла до навколишнього газу. Цей приповерхневий шар газу розглядається як поршень, що генерує акустичний сигнал, який надалі приймається мікрофоном. Оскільки величина періодичних коливань тиску в осередку пропорційна величині кількості тепла, що виходить із твердого зразка, має місце тісна відповідність між силою акустичного сигналу і кількістю світла, поглиненого твердим тілом.

Очевидно, що всі зазначені практичні використання ФАЕ вимагають адекватної теоретичної основи для інтерпретації експериментальних даних. У разі напівпровідників на ФАЕ сигнал крім теплових параметрів впливає взаємодія носіїв струму і фононів, а також процеси релаксації їх енергії. Дійсно, при поглинанні фотона з енергією, що перевищує ширину забороненої зони напівпровідника, в ньому утворюється надлишок (у порівнянні з термодинамічно рівноважною ситуацією) електронів (дірок) з енергією вище (нижче) дна зони провідності (стелі валентної зони). За час порядку декількох пікосекунд ці нерівноважні фотоносії розподіляють надлишок енергії всередині своєї підсистеми через кулонівську взаємодію і, нарешті, ця додаткова енергія передається решітці за допомогою електрон-фононної взаємодії, а носії релаксують до дну (стелі) зони провідності (валентної зони). Оскільки надлишкові носії струму дифундують через зразок, електрон-діркові пари в кінцевому підсумку рекомбінують далеко від місця їх генерації, виступаючи додатковим джерелом тепла.

Одна з найпростіших, але в той же час досить ефективна модель для опису процесу перенесення тепла складається в призначенні кожній системі квазічастинок (електронів, діркам і фононам) власної температури. Необхідною умовою фізичної коректності даної моделі є виконання умов теорії гарячих електронів [113, 114]. Тоді проблема перенесення тепла в напівпровіднику може бути зведена до визначення просторово-часової еволюції температурних розподілів електронів, дірок і фононів з урахуванням обміну енергією між ними. Поширення електронних і фононних теплових хвиль в напівпровідниках були розглянуті в роботі [212]. Однак автори зазначеної роботи нехтують процесами дифузії та рекомбінації носіїв струму.

Ідея про вплив дифузії і рекомбінації носіїв струму на ФАЕ в напівпровідниках була висловлена Л. Мірандою [213], а потім використана для пояснення особливостей фотоакустичного сигналу, виміряного в напівпровідниках GaAs, InAs та Ge [214, 215]. У роботах [199, 216] запропонована теорія ФАЕ в напівпровідниках, що враховує процеси генерації, рекомбінації та дифузії електронно-діркових пар, яка використовує теплові ГУ у вигляді плоского періодичного джерела тепла на поверхні зразка: $Qe^{i\Omega t}$. Однак, в експериментальних умовах для генерації теплових хвиль усередині твердого тіла зразок опромінюється світловим пучком, який модулюється по інтенсивності за допомогою механічного переривника ($I = I_0 + \Delta I e^{i\Omega t}$, $\Delta I \leq I_0$) [217], тому тепловий потік, що генерується на поверхні зразка, має вигляд $Q = Q_0 + \Delta Q e^{i\Omega t}$.

Врахування нелінійних ефектів при високих рівнях інтенсивності лазерного опромінення був виконаний групою А. Манделіса [218] в нехтуванні термоелектричними ефектами і рекомбінацією носіїв. А. Сміт та П. Норріс [219] використовували двотемпературне наближення для ФАЕ в умовах опромінення тонкоплівкових металевих зразків ультракороткими лазерними імпульсами, але без урахування дифузії і рекомбінації, що мають в напівпровіднику, на відміну від металу, важливе значення . У роботах [220–222] ФАЕ в напівпровідниках був вивчений з урахуванням процесу рекомбінації носіїв і внесків від різних механізмів формування акустичної хвилі: термодифузійного, термопружного і електронно-деформаційного. Однак, при цьому не враховувалася температурна залежність темпу теплової рекомбінації і термоелектричний внесок в парціальні струми нерівноважних електронів і дірок.

У Розділі 6 за матеріалами робіт [4, 8, 12, 24, 31] представлена теорія ФАЕ, що усуває зазначені вище недоліки.

1.4 Дифузія і дрейф в фотоелектричних процесах

Однією з найбільш простих і очевидних фізичних причин появи в плазмоподібних середовищах нерівноважних носіїв струму є їх зовнішня генерація під впливом освітлення або іонізуючого випромінювання, що викликають появу фотопровідності і фотоерс [223–225].

На сьогоднішній день функціонування переважної більшості фотоперетворювачів засноване на ефекті виникнення ЕРС на гетеропереході двох напівпровідників з різним типом провідності. Проте, останнім часом спостерігається деяке пожвавлення інтересу до вивчення фотоелектричних ефектів, не пов'язаних з наявністю в досліджуваному зразку напівпровідникових переходів. Два основних фізичних механізма, що лежать в основі подібних явищ, це фотоерс Дембера [89, 225, 226] і об'ємна фотоерс в неоднорідних легованих і варізонних напівпровідниках [83, 227–229]. Обидва ці явища мають довгу історію досліджень. Фотоефект Дембера є одним з фундаментальних явищ, що виникають при взаємодії фотонів з напівпровідниковим середовищем. Він експериментально був виявлений багато десятків років назад [226], і тоді ж була запропонована його перша теорія [230, 231, 231]. Але оскільки величини фотоерс, зумовлені цими механізмами, істотно менше, ніж фотоефект на *p-n* переході [73, 89, 90], практичного застосування в фотоперетворювачах вони не знайшли і були практично забуті досить скоро після свого відкриття, представляючи швидше академічний інтерес.

Однак, відносно недавно з'явився ряд робіт, які демонструють, що ці давно відомі фізичні механізми формування фотоерс вивчені неповно. Зокрема, було виявлено, що фотоерс Дембера може бути відповідальною за генерацію терагерцового випромінювання під дією ультракоротких імпульсів лазерного випромінювання, а сама величина ефекту в цьому режимі істотно відрізняється від відповідного значення при статичному освітленні [232–236]. У ряді робіт [237, 238] було показано, що в реальних умовах, коли обмежений напівпровідник має контакт з іншим середовищем (наприклад, з металевими електродами), класична теорія взагалі виявляється непридатною: не тільки величина, але і знак фотоерс Дембера визначається параметрами контактів. Це пояснюється, в свою чергу, визначальним впливом контактів на нерівноважні носії в напівпровіднику. Таким чином, фізика фотоелектричних ефектів в об'ємі біполярного напівпровідниках виявляється багатшою і складнішою, ніж прийнято було вважати раніше.

З загальнофізичних міркувань ясно, що необхідною умовою появи ЕРС в однорідному ізотропному середовищі є порушення просторово-часової симетрії задачі. У разі фотоерс Дембера таким фактором є наявність межі зразка: при освітленні торця біполярного напівпровідникового зразка в ньому генерується ЕРС.

Другою необхідною умовою появи фотоерс прийнято вважати наявність неосновних носіїв, така точка зору широко представлена в літературі (див., наприклад, монографію [83]). Проте, є свідчення, що існують фізичні механізми, що допускають формування фотоерс в монополярному середовищі. Так, в роботі [239] показано, що сильне збудження світлом електронної підсистеми, яке формує функцію розподілу електронів, далеку від рівноважної, приводить до появи фотоерс в монополярному напівпровіднику.

Багато напівпровідників, що знайшли широке використання в електроніці (Ge, Si, GaAs i т.д.), мають складну зонну структуру з кількома екстремумами дна зони провідності (або декількома екстремумами верхньої валентної зони). Кожен такий екстремум називається долиною, а напівпровідники з такою зонної структурою називаються багатодолинними напівпровідниками [240]. Можлива ситуація, коли всі екстремуми розташовані в імпульсному просторі k при k = 0, і всі долини є еквівалентними (як у випадку кристалічної решітки алмаза або кремнію). Однак, можлива і ситуація, коли головний екстремум зони провідності розташований при k = 0, а інші дочірні екстремуми (долини) мають більш високу енергію і розташовані ближче до краю зони Брілюена. Такий випадок має місце для, наприклад, арсеніду галію. В обох випадках носії струму кожної долини можна розглядати як окрему підсистему з простим (квадратичним) законом дисперсії, з власною ефективною масою і рухливістю носіїв в кожній підсистемі (долині).

У разі нееквівалентних долин електрони провідності в різних долинах мають різну ефективну масу, тому можна говорити про різні види носіїв струму (таких як легкі і важкі електрони провідності або дірки). Оскільки підсистеми з різною ефективною масою характеризуються різною рухливістю, з'являється можливість управляти електричними властивостями напівпровідника, змінюючи концентрацію носіїв струму в різних долинах. Останнім часом ця можливість викликала значний інтерес у дослідників, давши новий напрямок в проектування електронних пристроїв, що отримав назву "валейтроніка" (valleytronics) [241, 242].

Наявність декількох долин (з різницею в енергії значно менше ширини

забороненої зони) впливає на оптичні властивості напівпровідників, забезпечуючи поглинання низькоенергетичних фотонів. Ця обставина здається привабливою з практичної точки зору: замість пошуку нових вузькощілинних матеріалів для детекторів низькоенергетичних фотонів, можна використовувати відомі багатодолинні напівпровідники. Слід зазначити, що зараз значні зусилля дослідників спрямовані саме на пошук можливості використання традиційних матеріалів і технологічних процесів для створення датчиків далекого інфрачервоного і терагерцового випромінювання [243].

Таким чином, виникає питання: чи існують фізичні механізми утворення фотоерс в багатодолинному напівпровіднику, в яких роль як основних, так і неосновних носіїв струму грали б носії одного знака з різних долин? Наприклад, легкі і важкі електрони, а дірками можна було знехтувати взагалі. Іншими словами, чи можна створити фотоелектричний елемент в концепції валейтронікі (valleytronics)?

Відповідь на це питання представлена в роботах [21, 34]. Дотримуючись їх, в розділі 7.3 побудована теорія фотоефекту Дембера в однорідному обмеженому багатодолинному напівпровіднику. Показано, що в рамках лінійної дифузійно-дрейфової теорії поява нерівноважних носіїв за рахунок індукованих світлом міждолинних переходів дійсно може приводити до появи ЕРС. Причому, як це не здається парадоксальним, в багатодолинному напівпровіднику фотоерс може виникати навіть у тому випадку, коли енергія фотона менше ширини забороненої зони, тобто неосновні носії не генеруються взагалі.

Що стосується об'ємної фотоерс в неоднорідному напівпровіднику, то з часу свого відкриття Я. Тауцем [225, 227, 228] вона досліджувалася порівняно мало [229], хоча і знайшла застосування в якості інструменту для аналізу однорідності легування напівпровідника. При цьому, прийнято вважати, що ефект обумовлений неоднорідністю концентрації носіїв струму (причому, основних), а фізичною причиною появи ЕРС є наявність вбудованого електричного поля, що виникає через неоднорідність розподілу зарядженої домішки [83]. Однак, ще Я. Тауцем була висловлена ідея, що причиною об'ємного фотоефекту може виступати неоднорідність рухливості носіїв струму при однорідному розподілі як концентрації носіїв, так і заряджених домішок. Ця ситуація виглядає дещо парадоксальною, адже формування фотоерс відбувається взагалі за відсутності вбудованого електричного поля, якому можна було б приписати сепарацію носіїв, і фізична причина ефекту не є очевидною. Необхідно відзначити, що в цьому є деяка спільність зі згаданою вище ЕРС Дембера.

Незважаючи на таку інтригуючу особливість, глибоке вивчення цього механізму формування фотоефекту не проводилося, ймовірно, через малий практичний інтерес до нього. Однак, в даний час з'явилося багато нових сучасних напівпровідникових матеріалів: аморфні, полікристалічні, пористі, напружені напівпровідники і ін., в яких рухливість носіїв може контролюватися незалежно від їх концентрації. Тому стає актуальним врахування неоднорідності рухливості носіїв струму. Дійсно, механічні напруги, технологічні особливості при кристалізації полікристалічного напівпровідника; адсорбція в пористих напівпровідниках, як в робочому режимі (при використанні їх в якості сенсорів [244, 245]), так і паразитна; неоднорідність розподілу дислокацій і характеристик міжкристалічних меж та ін. значно сильніше позначаються на рухливості носіїв струму, практично не впливаючи на їх термодинамічно рівноважну концентрацію. Координатна залежність рухливості з'являється і в неоднорідному температурному полі, але при цьому виникають ще й термоелектричні ефекти [246].

Крім того, самостійний інтерес представляє порівняння ступеня впливу неоднорідності рухливості основних і неосновних носіїв на величину фотоерс. Також раніше не вивчалось питання впливу обмеженості напівпровідника на ефект об'ємної фотоерс. Наявність же межі розподілу плазмоподібного середовища, як і в разі фотоерс Дембера [237, 238], може зробити істотний вплив на транспортні процеси в напівпровіднику при його освітленні [15, 33]. Крім того, представляє інтерес дослідити вплив частки освітленої частини напівпровідникового зразка кінцевого розміру на величину фотоерс. Особливий випадок являє собою ситуація, коли весь об'єм напівпровідника охоплений нерівноважними фотоносіями і немає точки з єдиним рівнем Фермі. У такій ситуації необхідно приділяти окрему увагу коректності введення поняття ЕРС в розімкнутому колі.

Що стосується впливу домішок в біполярному напівпровіднику на фотоефект, то загалом його прийнято розглядати як вплив на об'ємні параметри напівпровідника: на рівноважну (темнову) концентрацію носіїв струму, їх рухливість, а також на спектральну характеристику і чутливість фотоперетворювачів [247–249].

У всіх зазначених ситуаціях при слабкому рівні освітлення (в лінійному наближенні, тобто коли концентрація нерівноважних носіїв багато менше концентрації носіїв в стані термодинамічної рівноваги) фотовідгук є лінійною функцією інтенсивності падаючого світла. Це не дивно, оскільки в рамках даного наближення величина фотоерс пропорційна концентрації нерівноважних носіїв, а та, в свою чергу, лінійним чином залежить від інтенсивності освітлення.

В роботі [16] і Розділі 7.2 передбачений фізичний механізм утворення фотоерс в однорідному біполярному напівпровіднику, що характеризується нелінійною (кубічною) залежністю величини фотоерс (фотоструму) від інтенсивності освітлення при як завгодно малому рівні фотозбудження носіїв. Даний механізм проявляє себе в однорідному біполярному напівпровіднику з нейтральними домішками при неоднорідному освітленні. Під дією освітлення відбувається часткова іонізація нейтральних домішок, причому в силу неоднорідності освітлення ступінь іонізації також виявляється неоднорідною функцією координат. Якщо концентрація нейтральних домішок мала, їх внесок в концентрацію фотоносіїв також виявляється малим, тому зазвичай впливом цих домішок на фотоефект нехтують. Однак, перехід з нейтрального стану домішкового рівня в заряджене супроводжується істотною зміною перетину розсіювання електронів провідності на домішкових рівнях, що в досить чистих напівпровідниках приводить до помітної зміни рухливості носіїв. Остання при цьому, в силу неоднорідності освітлення, також стає просторово неоднорідною величиною. Ця индукована освітленням неоднорідність рухливості електронів провідності в освітленій області напівпровідника здатна приводити до появи фотоерс в спочатку однорідному напівпровіднику.

Останнім часом опубліковано ряд робіт [250–252], присвячених дослідженню динамічних фотоефектів в напівпровідниках, не пов'язаних з наявністю в зразку потенційних бар'єрів. З точки зору фундаментальної фізики напівпровідників, динамічний фотоефект становить інтерес, оскільки проявляється в ситуаціях, коли формування статичної фотоерс неможливо [83, 225, 253]. Якби освітлення однорідного напівпровідника було б статичним, перехідний процес завершився б формуванням такого розподілу нерівноважних фотоносіїв, при якому виникло вбудоване електричне поле, що компенсується дифузійним струмом, і фотоерс звернулася б в нуль. Іншими словами, на мові квазірівнів Фермі, в разі стаціонарного освітлення сталося б формування постійних в просторі квазірівнів Фермі електронів і дірок. Таким чином, на відміну від стаціонарних фотоелектричних явищ в напівпровідникових зразках без потенційних бар'єрів, при яких в силу різної рухливості носіїв струму або просторової неоднорідності провідності відбувається поява стаціонарного розподілу нерівноважних носіїв струму, що породжує ЕРС, нестаціонарний фотоефект являє собою по суті перехідний процес, який постійно підтримується зовнішнім збудженням (просторово-часовою модуляцією інтенсивності падаючого світла). Фізичною причиною появи фотоерс в однорідному напівпровіднику в таких умовах є порушення часової симетрії задачі.

Нестаціонарний фотоефект представляється перспективним з практичної точки зору як фізична основа нових адаптивних фотоприймачів [253, 254]. Також на його основі була розроблена експериментальна техніка для визначення рухливості і часу життя нерівноважних носії в напівпровіднику — метод рухомої решітки фотоносіїв (MPG) [40, 255, 256]. Теорія нестаціонарного фотоефекту, що використовується в даному методі, розвинута в роботах [38, 39, 257]. Останнім часом було запропоновано використовувати цю методику для автоматичного контролю параметрів тонкоплівкових напівпровідникових пристроїв у виробничому процесі [258]. Однак, існуюча теорія динамічного фотоефекту не враховує зміни рухливості носіїв струму, яка може бути спричинена освітленням. Крім того, в силу зазначених вище міркувань, вважається, що нестаціонарна фотоерс (або фотоелектричний струм короткого замикання в замкнутому колі) являє собою змінний електричний сигнал, в якому домінує гармоніка, що відповідає частоті коливань просторової модуляції інтенсивності освітлення. Природно, в силу нелінійності напівпровідникового середовища, можлива присутність і вищих гармонік. Можливість появи постійної компоненти струму в замкнутому напівпровідниковому колі в умовах нестаціонарної фотоерс не вивчалась. Вважається її відсутність, якщо тільки само середовище не має випрямних властивостей. Теорія, розвинена в роботі [22] і представлена в Розділі 7.4, показує принципову можливість появи в колі постійного електричного фотоструму в результаті нестаціонарного освітлення в умовах, коли формування стаціонарної фотоерс принципово неможливе. Більш того, результатом нестаціонарного фотоефекту може бути виключно постійний фотоелектричний струм

(без змінної компоненти) в напівпровідниковому замкнутому колі, що немає випрямних властивостей, наприклад, в необмеженому однорідному біполярному напівпровіднику (в кільці з біполярного напівпровідника).

1.5 Висновки до Розділу 1

Незважаючи на широке і тривале використання дифузійно-дрейфового наближення для дослідження властивостей плазмоподібних середовищ і моделювання напівпровідникових електронних приладів, є ряд невирішених теоретичних питань. Для забезпечення більш точних результатів, перш за все, необхідно усунути деякі внутрішні суперечності в широко використовуваних ГУ і способах опису рекомбінації в стаціонарних умовах.

Використання фізично коректних ГУ і рекомбінаційних моделей не тільки підвищує точність моделювання напівпровідникових пристроїв, але і дозволяє передбачити ряд нових фотоелектричних і термоелектричних ефектів.

Традиційна теорія термоелектричних явищ в біполярних напівпровідниках при наявності нерівноважності виявляється непридатною: для правильного визначення величини EPC і опору зразка в таких умовах необхідно врахування поверхневих явищ в площині контакту напівпровідника з металом (поверхневої провідності і поверхневої рекомбінації).

Нерівноважні процеси в змінних температурних полях на сьогоднішній день вивчені недостатньо, однак є ряд свідчень, що вони можуть знайти важливе застосування на практиці. В цьому розділі наведені деякі конкретні невирішені питання, пов'язані з теорією фотоелектричних і термоелектричних явищ і ФАЕ, вирішення яких представляє інтерес як з академічної, так і з практичної точок зору.

РОЗДІЛ 2 ДИФУЗІЙНО-ДРЕЙФОВА МОДЕЛЬ ТРАНСПОРТНИХ ЯВИЩ

2.1 Основні рівняння

Поширення електромагнітних хвиль в плазмі і плазмоподібних середовищах, а також кінетичні явища в цих середовищах, зумовлені впливом електромагнітного поля на носії струму, описуються рівняннями Максвела [85]:

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t},\tag{2.1}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\rho, \tag{2.2}$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\mathbf{j},\tag{2.3}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0, \tag{2.4}$$

де **E** і **H** - напруженості електричного і магнітного полів, **D** і **B** - електрична і магнітна індукції, **j** - густина струму провідності, ρ - густина об'ємного заряду, *c* - швидкість світла. Вектор **D** описує так званий струм поляризації (тобто струм пов'язаних зарядів), тоді як **j** - ток вільних носіїв (електронів, іонів, квазічастинок в твердому тілі).

Система рівнянь (2.1)-(2.4) є незамкненою і повинна бути доповнена матеріальними рівняннями, що описують фізичні властивості середовища і задають зв'язок між величинами **E**, **D**, **H**, **B** і **j**. Слід зазначити, що якщо в рівняннях (2.1)-(2.4) під **E** і **H** розуміти середнє (в статистичному сенсі) макроскопічне поле, саме ці величини будуть фігурувати і в матеріальних рівняннях (наприклад, кінетичному рівнянні Больцмана) [259–261].

У багатьох практично важливих завданнях фізичної електроніки, наприклад, при моделюванні функціонування мікроелектронних напівпровідникових пристроїв, зв'язок між величинами **E** і **D**, а також **H** і **B** може бути заданий в математично простій формі. Для ізотропного середовища $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$, $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$, де ϵ і μ - відповідно діелектрична і магнітна проникності середовища, причому найчастіше для широковживаних напівпровідників можна покласти $\mu = 1$.

Як вказувалося у Вступі, зручним способом опису кінетики носіїв струму в плазмі і плазмоподібних середовищах є дифузійно-дрейфова модель. В її рамках електричний струм являє собою суму парціальних компонент густини струмів, створюваних різними типами носіїв:

$$\mathbf{j} = \sum_{i} \mathbf{j}_{i},\tag{2.5}$$

кожна з яких може бути визначена наступним чином [41, 90, 150]:

$$\mathbf{j}_i = -\sigma_i \left(\nabla \psi_i + \alpha_i \nabla T_i \right), \qquad (2.6)$$

де σ_i - провідність підсистеми носіїв "*i*"-ого типу, $\sigma_i = eu_i n_i$; e - елементарний заряд, u_i і n_i - рухливість і концентрація носіїв відповідного типу; ψ_i - електрохімічний потенціал підсистеми носіїв (її квазірівень Фермі), T_i - її температура, α_i - коефіцієнт Зеєбека (термоерс) даного типу носіїв струму.

У разі, коли температури носіїв не є фіксованими і повинні бути знайдені самоузгоджено, система рівнянь повинна бути доповнена відповідними тепловими транспортними рівняннями - рівняннями балансу енергії [114, 115].

Якщо в системі присутні фізичні механізми, що забезпечують появу i/aбo знищення частинок тієї чи іншої підсистеми (процеси іонізації в плазмі, генераційно-рекомбінаційні процеси в напівпровіднику та ін.), необхідно формалізувати ці процеси за допомогою відповідних рівнянь. Тоді для кожної підсистеми носіїв струму може бути записано вираз виду [41, 83, 90, 150]:

$$\frac{1}{q_i} \operatorname{div} \mathbf{j}_i = -\frac{\partial n_i}{\partial t} + G_i - R_i, \qquad (2.7)$$

де q_i - заряд носія даного типу, t - час, n_i - концентрація носіїв струму i-го типу, G_i и R_i - темпи народження (генерації) і знищення (рекомбінації) даного типу квазічастинок. Детально проблематика і фізичні ефекти, зумовлені обміном частинок між підсистемами, розглянуті на прикладі напівпровідникових середовищ в Розділі 3.

В даній роботі вивчаються такі плазмоподібні середовища і при таких зовнішніх впливах, коли кінетика системи може бути описана в термінах термодинамічних величин і може бути застосована дифузійно-дрейфова модель. Напівпровідникові середовища і газорозрядна плазма достатньої щільності, як правило, задовольняють цим припущенням в більшості практично важливих випадків.

Електрохімічний потенціал ψ_i підсистеми носіїв струму виражається через потенціал електричного поля φ і хімічний потенціал даного типу носіїв μ_i наступним чином:

$$\psi = \varphi \mp \mu_i / e, \tag{2.8}$$

причому знак "-" відноситься до електронів і негативно заряджених іонів, а "+" - до позитивно заряджених іонів в плазмі, діркам в напівпровіднику і т.п.

Слід зробити важливе зауваження: запис густини електричного струму в формі (2.6), тобто введення електрохімічного потенціалу і об'єднання дифузійної і дрейфової компонент струму в одному доданку передбачає виконання відносини Ейнштейна для рухливості носіїв і їх коефіцієнта дифузії D_i :

$$\frac{D_i}{u_i} = \frac{k_B T}{e},\tag{2.9}$$

де k_B - стала Больцмана.

В іншому випадку, потрібно було б окремо записувати дрейфову $\sigma_i \mathbf{E}$ і дифузійну $eD_i \nabla n_i$ компоненти в явному вигляді. Як правило, співвідношення Ейнштейна виконується в звичайних умовах роботи мікроелектронних пристроїв. Тому в подальшому, якщо не зазначено інше, буде використане саме таке математичне формулювання дифузійно-дрейфової моделі. Однак, в деяких випадках, коли зовнішній вплив приводить систему в стан, далекий від стану термодинамічної рівноваги, тобто функція розподілу носіїв струму суттєво відрізняється від розподілу Фермі-Дірака, співвідношення Ейнштейна може не дотримуватися, що приводить до прояву нових фізичних ефектів. Один з таких проявів нерівноважности буде проаналізовано в Розділі 7.3.

Система диференціальних рівнянь в частинних похідних повинна бути доповнена відповідним набором ГУ, що відображають фізичні процеси, які відбуваються на межі поділу досліджуваних середовищ (напівпровідника з іншим напівпровідником, металом електрода та ін.). Якщо в (газорозрядній) плазмі врахування контактних явищ менш актуальне, так як для неї не характерна різка зміна властивостей середовища на нанометрових масштабах (за винятком електродів), то для напівпровідникових приладів цей аспект є вкрай важливим, тому що робота більшості з них заснована саме на фізичних процесах, які протікають на межі двох середовищ (p - n-перехід, гетероконтакти, квантові ями та ін.). Причому, в сучасній електроніці, у міру зменшення розмірів напівпровідникових пристроїв, ефекти, пов'язані з наявністю поверхонь (як вільних поверхонь, так і поверхонь розділу двох різних за своїм фізичними властивостями матеріалів, через які протікає електричний струм) починають грати все більшу роль.

Незважаючи на значну історію використання дифузійно-дрейфової моделі в дослідженнях проблем фізичної електроніки, детальному аналізу ГУ приділялося мало уваги, наприклад, часто для аналізу біполярного транспорту залучалися ГУ, спочатку введені для монополярної системи, без належного обґрунтування такого узагальнення. Це питання буде проаналізовано в наступному підрозділі.

2.2 Граничні умови для дифузійно-дрейфовой моделі в багатокомпонентному середовищі

Як зазначалося вище, актуальною є задача отримати такі ГУ, які, будучи досить універсальними, максимально повно і коректно враховували б усі фактори, що вносяться наявністю поверхонь розділу середовищ.

У цьому розділі будуть сформульовані загальні ГУ, придатні для опису транспортних процесів в різних ситуаціях, а потім вони будуть конкретизовані для випадку малого рівня інжекції (слабких збурень). Запропоновані ГУ отримані в [14] для випадку стаціонарних транспортних процесів для одновимірної задачі, в якій в ролі плазмоподібного середовища виступає біполярний напівпровідник. Передбачається, що для опису транспортних процесів в напівпровідник. Передбачається, що для опису транспортних процесів в напівпровідниковій структурі використовуються рівняння безперервності, однак пропоноване обговорення ГУ може бути корисно і для інших методів дослідження, наприклад, для вельми популярного останнім часом методу Монте-Карло [262, 263]. Адже незалежно від того, який спосіб опису транспортних процесів використовується, досліднику необхідно сформулювати ГУ, для правильного завдання яких необхідно чітке розуміння обговорюваних нижче фізичних явищ на поверхнях розділу провідних середовищ.

Все різноманіття ситуацій в обмежених зразках і структурах можна звести до двох принципово різних випадків, які вимагають різного розгляду: 1. Наявність вільної поверхні напівпровідника (Тут йдеться про напівпровідник як про найбільш складну і цікаву з практичної точки зору ситуацію. Отримані результати можуть бути застосовні для будь-якого плазмоподібного середовища).

2. Струмопровідний контакт двох середовищ. У свою чергу, в даному випадку можна говорити про два варіанти — замкнутого чи розімкнутого кола, тобто про наявність або відсутність електричного струму через поверхню розділу. Запропоновані нижче ГУ є загальними для цих двох ситуацій, і випадок розім
кнутого кола в них є граничним переходом до нульового струму
 $j\to 0.$

Розгляд фізичних процесів на межі поділу середовищ для написання ГУ зручніше почати зі випадку термодинамічної рівноваги. Після чого, вже маючи повну систему ГУ в рівновазі, проаналізувати її зміну при наявності нерівноважних носіїв і струму в колі.

2.2.1 ГУ для напівпровідникових структур в рівновазі

Як зазначалося вище, для простоти буде розглянута одновимірна модель плазмоподібного середовища (біполярного напівпровідника), нескінченного і однорідного в напрямках, перпендикулярних тому, що досліджується. У стані термодинамічної рівноваги розподіл концентрації носіїв і електричного поля в цьому середовищі описується наступною системою рівнянь [83, 89]

$$\psi_n = const, \qquad \psi_p = const,$$
 (2.10)

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}z^2} = -\frac{4\pi}{\epsilon}\rho,\tag{2.11}$$

де $\rho = e(n_t + p - n)$ [83, 89] - густина об'ємного заряду, n і p - концентрація електронів і дірок відповідно, n_t - концентрація зарядів на домішкових рівнях. Величина n_t враховує нерухомий об'ємний заряд, що створений кристалічною решіткою.

У стані термодинамічної рівноваги рівні Фермі електронів і дірок збігаються, тобто виконується співвідношення

$$\psi_n - \psi_p = \varepsilon_g/e, \tag{2.12}$$

де ε_g - ширина забороненої зони напівпровідника.

Таким чином, рівняння (2.10) не є незалежними і містять тільки одну константу інтегрування, що підлягає визначенню з ГУ.

Систему рівнянь (2.10)-(2.11) необхідно доповнити трьома ГУ, необхідними для знаходження трьох констант інтегрування. Оскільки ми маємо справу з крайової задачею, дані ГУ повинні бути сформульовані на протилежних сторонах зразка, навіть якщо розглядається нескінченний зразок. Щоб зрозуміти структуру ГУ, що мають бути сформульовані на контакті двох провідних середовищ, подумки поділимо зразок на дві частини. Уявна межа між цими частинами якраз є контактом двох провідних середовищ, що нас цікавить. Очевидно, що тепер систему рівнянь (2.10)-(2.11) необхідно вирішувати окремо в кожному з середовищ. Отже, на введеній уявній межі необхідно задати ГУ. Зрозуміло, що введення кожної нової поверхні розділу в термодинамічній рівновазі вимагає завдання трьох нових ГУ. При розгляді конкретних напівпровідникових структур ці ГУ повинні бути виписані для кожного контакту. Якщо зразок має вільні поверхні, для них також повинні бути виписані ГУ, які будуть обговорюватися окремо.

У разі контакту двох провідних середовищ в рівновазі вибір ГУ фізично досить ясний. Введення в розгляд кожного нового контакту дозволяє задати наступні ГУ: дві умови зшивання електрохімічних потенціалів для електронів і дірок (причому в силу (2.12) незалежним є тільки одна з них)

$$\psi_n(-0) = \psi_n(+0), \qquad \psi_p(-0) = \psi_p(+0), \qquad (2.13)$$

а також умови зшивання електричного потенціалу і електричної індукції (вважаємо, що контакт перебуває в площині z = 0):

$$\varphi(-0) = \varphi(+0), \qquad (2.14)$$

$$\epsilon_{01} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(-0) = \epsilon_{02} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(+0), \qquad (2.15)$$

де $\epsilon_{01,02}$ - діелектричні проникності середовищ, що контактують.

Варто зауважити, що з (2.13)-(2.14) прямує умова безперервності хімічних потенціалів носіїв, що часто формулюється у вигляді ГУ на концентрацію носіїв.

З приводу безперервності електричного потенціалу і індукції необхідно відзначити наступне. В принципі, можлива ситуація, коли їх безперервність не дотримується. Для появи стрибка електричної індукції досить наявності в площині контакту поверхневого заряду. Фізичною причиною існування останнього можуть бути адсорбовані іонізовані атоми, інші заряджені домішкові стани, пов'язані з порушенням ідеальної періодичності кристалічної решітки в площині контакту (в тому числі дислокації і інші недосконалості кристалічної решітки).

Іншою причиною порушення безперервності електричної індукції виступає шар об'ємного заряду, який може мати місце поблизу контакту, при використанні наближення квазінейтральності. В даному випадку, товщина шару об'ємного заряду (порядку радіуса екранування Дебая) є такою, якою нехтуємо, тому шар об'ємного заряду можна розглядати як деякий еквівалентний поверхневий заряд. В обох випадках замість ГУ (2.15) можна записати наступний вираз:

$$\epsilon_{02}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(+0) - \epsilon_{01}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(-0) = -4\pi(\sigma_{+} + \sigma_{-} + \sigma_{a}), \qquad (2.16)$$

де σ_a - густина фізичних поверхневий зарядів (адсорбованих іонів), в той час як

$$\sigma_{\pm} = \pm \lim_{\delta \to 0} \int_{0}^{\pm \delta} \rho(z) \mathrm{d}z$$
(2.17)

являє собою ефективну густину поверхневого заряду, що враховує існування приконтактного шару об'ємного заряду в наближенні квазінейтральності. В (2.16) знаки плюс і мінус позначають відповідно ліву і праву сторону контакту, розташованого при z = 0. Умова зшивання електричної індукції порушується при наявності некомпенсованого поверхневого заряду в площині контакту, тобто якщо $\sigma_+ + \sigma_- + \sigma_a \neq 0$. В цьому випадку електрична індукція в площині контакту терпить розрив, величина якого залишається невідомою доти, поки права частина (2.16) не конкретизована. При цьому неможливо побудувати ГУ без використання тієї чи іншої моделі, яка описує густину поверхневих зарядів. Таким чином, необхідно, наприклад, завдання фіксованої густини поверхневих станів, або введення термодинамічних характеристик системи поверхневих зарядів (модель Бардіна [264]), тощо.

Причиною наявності стрибка електричного потенціалу може бути тільки подвійний заряджений шар [85], створений, наприклад, адсорбованими на поверхні контактуючих напівпровідників іонами різного знака. Значно частіше доводиться розглядати наявність подвійного зарядженого шару на контакті при використанні наближення квазінейтральності [81, 83, 84]. Однак, як буде докладніше обговорено в підрозділі 3.2.2, в цьому випадку рівняння Пуассона (2.11) для опису транспорту носіїв не використовується, що зменшує число необхідних ГУ на два. Як буде показано нижче, і в нерівноважному стані, незалежно від того, чи використовується наближення квазінейтральності, пропонована система ГУ залишається коректно визначеною.

Виняток становить гетероперехід двох напівпровідників, в площині якого може існувати фізичний (тобто не пов'язаний з використанням наближення квазінейтральності) подвійний шар об'ємного заряду, обумовлений квантовими станами на гетеропереході, що приводить до існування стрибка електричного потенціалу. На жаль, в цьому важливому випадку використання простого і загального ГУ типу (2.14) неможливо. Для вирішення зазначеної проблеми необхідно залучення мікроскопічної моделі для визначення величини стрибка електричного потенціалу на напівпровідниковому гетеропереході і можливої його залежності від прикладеної напруги, величини електричного струму через гетероперехід, тощо.

Якщо розглянута напівпровідникова структура не має вільних поверхонь (наприклад, досліджуваний зразок має форму кільця), то в силу рівнянь (2.10) ГУ типу (2.13) виявляються незалежними для всіх площин розділу, крім однієї. Дійсно, якщо замкнуте коло складається з N ділянок, в кожній з яких рівень Фермі постійний, а на N - 1 межах виконуються умови зшивання рівнів Фермі, то на межі, що залишилася, ці умови виконуються тотожно. Отже, систему ГУ необхідно доповнити ще однією умовою. Нею є вибір рівня відліку електричного потенціалу, який можна зробити наступним чином:

$$\varphi(0) = 0. \tag{2.18}$$

Якщо ж у досліджуваного зразка є вільні поверхні, то замість ГУ (2.13) необхідно сформулювати інше ГУ, спираючись на фізичні особливості межі "тверде тіло–вакуум".

Взагалі кажучи, в залежності від бажаної деталізації фізичних процесів, можливі два підходи до розгляду даної ситуації. Одна модель — це саме межа, наприклад, напівпровідника і вакууму. Інша — враховує, що в вакуумі є вільні електрони, емітовані, наприклад, за рахунок термоелектронної емісії з самого напівпровідника або оточуючих речовин. При цьому опис транспортних процесів через такий інтерфейс "напівпровідник–електронна хмара в вакуумі" стає подібним контакту двох середовищ, одна з яких досить специфічна — електронний газ в вакуумі. При такому наближенні можна розглядати не тільки випадок розімкнутого кола, але і протікання струму через вільну поверхню напівпровідника і вакууму. Очевидно, що такий аналіз найбільш актуальний для досить високих температур.

Підкреслимо, однак, один цікавий момент, який має важливе методичне значення. Оскільки ми розглядаємо стаціонарні транспортні процеси, ми, взагалі кажучи, не маємо права ігнорувати термоелектронну емісію при будь-який ненульовий температурі. Яким малим би не був термоелектричний потік, за досить великий проміжок часу може сформуватися електронна хмара, що визначає особливості стаціонарного транспорту носіїв. Більш того, про термодинамічну рівновгу твердого тіла з електронною хмарою в вакуумі можна говорити тільки в разі плоскої нескінченної межі між твердим тілом і вакуумом. Якщо ж врахувати скінченність його розмірів, то, як неважко помітити, електростатичні сили не можуть утримати електрони з досить великими енергіями, так як на досить великих відстанях електричний потенціал зменшується як 1/r (r - відстань до поверхні зразка). Таким чином має місце постійна втрата електронів з найбільшими енергіями.

Ця втрата приводить до зміщення динамічної рівноваги на кордоні твердого тіла (де потоки електронів з твердого тіла і в нього компенсують один одного). Зменшення концентрації електронів у вакуумі приводить до емісії додаткових електронів з твердого тіла, що в свою чергу, приводить до зниження концентрації електронів провідності і зростанню роботи виходу. Тому, строго кажучи, стан твердого тіла в вакуумі з урахуванням термоелектронної емісії є не термодинамічно рівноважним, а метастабільним станом. За нескінченний час тверде тіло мало би втратити всі свої електрони провідності при будь-якій кінцевій температурі. Цього не відбувається через наявність навколишніх тіл, з якими завжди має місце обмін електронами. так само термоелектронна емісія при будь-якій температурі врешті приводить до формування контактної різниці потенціалів між двома різними тілами (звичайно, якщо є інші, більш ефективні в кожному конкретному випадку механізми, наприклад, тунельний, це формування може відбутися набагато швидше).

I в стані термодинамічної рівноваги, і при всякому зовнішньому впливі (неоднорідний нагрів, зовнішнє електричне поле, фотогенерація, зміна форми зразка і т.д.) носії струму перерозподіляються таким чином, щоб, з одно-



Рисунок 2.1 — До встановлення термодинамічної рівноваги в контакті двох металів

го боку, забезпечувалася безперервність електричної індукції на межі зразка (або ж, якщо є заряджені поверхневі стану, то щоб їх густина відповідала стрибку напруженості електричного поля на цієї межі). З іншого боку, щоб дотримувалася динамічна рівновага між потоками електронів, що покидають (за рахунок термоемісії) зразок і що приходять в нього ззовні.

Це твердження можна проілюструвати так. Розглянемо контакт двох металевих циліндрів, дотичних своїми основами (див. рис. 2.1). Очевидно, що на цьому контакті сформується подвійний заряджений шар: в одному металі буде позитивний поверхневий заряд, в іншому — негативний. Потенціал лівого металу приймемо рівним нулю, тоді потенціал правого буде дорівнює значенню контактної різниці потенціалів $\varphi_c = (\chi_{m1} - \chi_{m2})/e$, де $\chi_{m1,m2}$ - робота виходу. В об'ємі зразка (не враховуючи контакт) і на вільній поверхні зразка заряд відсутній.

Зігнемо тепер циліндри в тор, зближуючи їх протилежні торці і формуючи таким чином другий контакт. Як тільки зразок втратить лінійну форму, можна буде говорити про появу електричного поля в зазорі, що формується, (і взагалі — навколо всього зразка) з напруженістю близько $E \approx \varphi_c/b$, де b - відстань між торцями зразка, що зближуються. Це поле формується

поверхневими зарядами, що виникають на вільних торцях, як за рахунок термоемісії (тобто за тим же механізмом, за яким формувався подвійний заряджений шар на першому контакті), так і за рахунок перетікання носіїв в об'ємі металів. Звичайно, в процесі перетікання можуть брати участь носії з подвійного зарядженого шару першого контакту, проте їх концентрація залишається незмінною — будь-яке її відхилення тут же компенсується термоелектронної емісією (або іншим механізмом, який привів до формування контактної різниці потенціалів на першому контакті). До моменту формування другого контакту матиме місце подвійний заряджений шар з відповідною густиною поверхневих зарядів і різницею потенціалів φ_c .

Якщо не враховувати електронну хмару в вакуумі, то двома умовами, що замикають систему ГУ, є умови зшивання електричної індукції на вільній поверхні напівпровідника. Для плоскої геометрії (нескінченна напівпровідникова пластина товщиною 2a) і відсутності повного електричного заряду зразка (що типово для стану термодинамічної рівноваги) такими умовами будуть такі:

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(\pm a) = 0. \tag{2.19}$$

Врахування електронної хмари в вакуумі являє собою нетривіальну задачу. При досить високій температурі можна ввести хімічний потенціал електронного газу в вакуумі і розглядати електронну хмара в якості нового провідного середовища, що контактує з твердим тілом. При цьому стає можливим використовувати ГУ типу (2.13).

При низьких температурах концентрація електронів у вакуумі настільки мала, що введення хімічного потенціалу стає неможливим. З цією ж проблемою доводиться зіткнутися і при формулюванні ГУ для електронної хмари при високій температурі, але далеко від кордону твердого тіла. Наскільки відомо, така ситуація що раніше не досліджувалася. Можна припустити, що в якості граничного умови в такому випадку замість (2.13) виступить рівність термоемісійного потоку з твердого тіла і потоку електронів з вакууму. Для обчислення останнього, мабуть, необхідно розглядати балістичний транспорт електронів у вакуумі.

2.2.2 ГУ для напівпровідникових структур з нерівноважними носіями. Вільна поверхня

Почнемо розгляд ГУ з випадку наявності вільної поверхні напівпровідника, в якому присутні нерівноважні носії. Причиною їх виникнення може бути зовнішня генерація, наявність неоднорідного температурного поля, тощо. У даній роботі не деталізується механізм появи нерівноважних носіїв, оскільки він не впливає на структуру ГУ.

Для простоти розглянемо нескінченну пластину біполярного напівпровідника заданої товщини 2*a*. У цьому випадку на обох сторонах будуть однотипні ГУ. У ситуації ж, коли на одній з сторін пластини має місце контакт з іншим середовищем, ГУ будуть являти собою комбінацію ГУ для вільної поверхні і розглянуті в наступному розділі ГУ для контакту двох середовищ.

Задача, що розглядається, є одновимірної (тому що в площині пластини, тобто в напрямках *Ox* і *Oy*, розподіл всіх фізичних величин є однорідним). Стаціонарні транспортні процеси описуються наступними рівняннями [83, 89, 265]: рівнянням Пуассона

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}z^2} = \frac{4\pi}{\epsilon}\rho,\tag{2.20}$$

і двома рівняннями безперервності струму

$$\frac{\mathrm{d}j_n}{\mathrm{d}z} = e(R_n - g_n), \qquad \frac{\mathrm{d}j_p}{\mathrm{d}z} = -e(R_p - g_p), \qquad (2.21)$$

де $j_{n,p}$ -парціальні струми електронів і дірок, що визначаються виразами (2.6), які в розглянутій задачі приймають такий вигляд:

$$j_n = -\sigma_n \left(\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}z} + \alpha_n \frac{\mathrm{d}T_n}{\mathrm{d}z} \right), \qquad j_p = -\sigma_p \left(\frac{\mathrm{d}\psi_p}{\mathrm{d}z} + \alpha_p \frac{\mathrm{d}T_p}{\mathrm{d}z} \right), \qquad (2.22)$$

де n, p - концентрації електронів і дірок відповідно, $T_{n,p}$ - температури електронів і дірок, які, взагалі кажучи, можуть бути різні; $R_{n,p}, g_{n,p}$ - відповідно темпи рекомбінації і зовнішньої генерації електронів і дірок. Підкреслимо, що в стаціонарному випадку темпи зовнішньої генерації і рекомбінації електронів і дірок завжди пов'язані співвідношенням $R_n - g_n = R_p - g_p$ в силу умови divj = 0 ($j = j_n + j_p$ - повний струм в колі), що випливає безпосередньо з рівнянь Максвела (докладніше див. Розділ 3). При наявності зовнішньої генерації в розгляд, як правило, необхідно вводити концентрацію електронів на домішкових рівнях, яка може відрізнятися від свого рівноважного значення. Надалі, для спрощення викладок вважатимемо, що зовнішній генерації немає.

Необхідно відзначити, що система рівнянь (2.20)-(2.21) в загальному випадку є незамкненою, тому що температури електронів і дірок в ряді задач не можна вважати заданими. В такому випадку необхідно вводиди в розгляд рівняння балансу енергії в електронній і дірковій підсистемах з відповідними тепловими ГУ [266]. Однак, враховуючи, що теплові ГУ [266] не пов'язані безпосередньо з розглянутими електричними ГУ, для спрощення викладу будемо надалі припускати температурні поля заданими.

Рішення системи рівнянь (2.20)-(2.21) містить шість констант інтегрування, що підлягають визначенню з ГУ, тобто необхідно сформулювати шість ГУ.

Чотири з них задають струм на межах напівпровідника з вакуумом (див. [91]):

$$j_n(\pm a) = \mp e R_s^{\pm}, \qquad j_p(\pm a) = \pm e R_s^{\pm}, \qquad (2.23)$$

де R_s^{\pm} - темп рекомбінації носіїв на поверхнях $z = \pm a$.

Нагадаємо, що в даній роботі не розглядаються задачі вакуумної електроніки, в яких може мати місце електричний струм в вакуумі за рахунок, наприклад, термоелектронної емісії. Неважко помітити, що з чотирьох умов (2.23) незалежними є тільки три в силу збігу темпів електронної та діркової рекомбінації в стаціонарному випадку. Дійсно, інтегруючи (2.21) і враховуючи, що divj = 0, отримаємо $j_n(a) - j_n(-a) = j_p(-a) - j_p(a)$, тобто $j_n(a) + j_p(a) = j_n(-a) + j_p(-a) = j = 0$, що відображає факт відсутності електричного струму в вакуумі. Таким чином, незалежно можна задати тільки три значення струмів на межах напівпровідника.

Четвертим ГУ виступає вибір рівня відліку електричного потенціалу. Приймемо, для визначеності,

$$\varphi(-a) = 0. \tag{2.24}$$

Як і в разі термодинамічної рівноваги, фізичний зміст останніх двох ГУ полягає в зшивці електричного поля на межі напівпровідника і вакууму. Якщо зразок в цілому є електронейтральним, то

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(\pm a) = 0. \tag{2.25}$$

Треба відзначити, що при даній геометрії (ізольована напівпровідникова пластина), найбільш природною є ситуація повної електронейтральності. Так, наприклад, при вивченні розподілу концентрації носіїв і вбудованого електричного поля, що виникає при наявності в даній пластині в напрямку Oz градієнта температури, зразок в цілому залишається електронейтральним і ГУ (2.25) можуть бути застосовні. З практичної ж точки зору дуже важливим є встановлення ГУ на вільної поверхні в разі, коли в перпендикулярному напрямку має місце протікання струму. Наприклад, така ситуація реалізується в польових транзисторах, а також в структурах, виконаних за технологією "кремній-на-ізоляторі", що наразі активно вивчаються і в яких струм тече в тонкому шарі напівпровідника, затиснутому між двома шарами SiO₂. Хоча ця ситуація виходить за рамки розглянутої як приклад одновимірної задачі, запропоновані ГУ можуть бути застосовані і для таких досліджень.

Однак слід підкреслити, що в цьому випадку ГУ (2.25) буде справедлива тільки в разі слабкої інжекції. Дійсно, наприклад, в електронному напівпровіднику при високому ступені інжекції концентрація нерівноважних електронів значно перевищує їх рівноважне значення. У той же час концентрація іонізованих донорів залишається незмінною (в разі досить високою температури, коли все домішки повністю іонізовані). Таким чином, у всьому напівпровіднику має місце об'ємний заряд одного знака, тобто напівпровідниковий зразок виявляється в цілому зарядженим негативно, і створюване їм в вакуумі електричне поле може бути відмінно від нуля. У випадку нескінченної напівпровідникової пластини проінтегруємо рівняння Пуассона (2.20) по товщині. Якщо просторовий заряд розподілений в пластині з густиною ρ , то створювана нею напруженість електричного поля на межі напівпровідника дорівнює [85]:

$$E(\pm a) = -\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(\pm a) = \pm \frac{4\pi}{\epsilon} \int_{-a}^{a} \rho(z) \mathrm{d}z.$$
 (2.26)

Слід також підкреслити, що в розглянутій задачі передбачається відсутність поверхневих зарядів, пов'язаних з наявністю поверхневих станів, адсорбованих іонів, тощо (але не поверхневих зарядів, що з'являються в результаті перерозподілу носіїв у зразку під зовнішнім впливом в металах і напівпровідниках в наближенні квазінейтральності, див. нижче). Якщо ж такі заряди присутні, їх поверхнева густина повинна бути включена в праву частину виразу (2.26). Природно, для цього потрібно вибрати відповідну модель, що враховує залежність густини поверхневих зарядів від, наприклад, струму, що протікає, температури, заряду в напівпровіднику, тощо.

Розглянемо тепер кілька різних окремих випадків і застосовність в них наведених вище ГУ. Нехай, наприклад, в біполярному напівпровіднику повністю відсутня рекомбінація, як об'ємна, так і поверхнева. Тоді, в силу
умови div $j_{n,p} = 0$, з чотирьох ГУ (2.23) незалежними залишаються тільки два (по одному для електронів і дірок). ГУ (2.24)-(2.25) залишаються в силі. Таким чином в даному окремому випадку необхідно сформулювати одну додаткову ГУ (Підкреслимо, що необхідність введення додаткової ГУ виникає тільки в біполярному напівпровіднику; в монополярному напівпровіднику система ГУ залишається повністю визначеною і при відсутності рекомбінації). Фізичний сенс необхідності введення додаткової ГУ при відсутності рекомбінації полягає в наступному. В біполярному напівпровіднику в транспортних процесах беруть участь дві підсистеми носіїв (електрони і дірки), кожна з яких характеризується своїм квазірівнем Фермі. І одна з ГУ визначає саме взаємне розташування квазірівнів Фермі. В термодинамічній рівновазі такою ГУ є умова збігу рівнів Фермі електронів і дірок. При наявності рекомбінації, саме вона контролює величину розщеплення квазірівнів Фермі нерівноважних носіїв. При відсутності рекомбінації цей зв'язок втрачається, і необхідне введення додаткової умови.

Фізичний сенс такої додаткової ГУ полягає в тому, що крім електронейтральності зразка в цілому (тобто відсутності повного заряду) має зберігатися і повне число носіїв у кожній підсистемі (через відсутність рекомбінації). Тобто додатковою ГУ, стосовно до зразку, що розглядається, виступає наступна умова:

$$\int_{-a}^{a} \left(n(z) - n_0 \right) \right) dz = 0, \qquad (2.27)$$

де n_0 - рівноважна концентрація електронів. Природно, замість (2.27) можна використовувати аналогічний вираз для дірок (тому що, оскільки зразок в цілому нейтральний і повне число електронів не змінилося, то незмінним залишається і повне число дірок)

При наявності інжекції, як зазначалося вище, повний заряд зразка може бути відмінним від нуля. При цьому за рахунок інжекції змінюється і повне число носіїв, принаймні, в одній із зон. У такій ситуації величина розщеплення квазірівнів Фермі визначається конкретним механізмом інжекції і вимагає окремого розгляду.

Якщо товщина розглянутої напівпровідникової пластини значно перевищує радіус Дебая l, то вивчення транспорту носіїв зручно проводити в наближенні квазінейтральності [13, 81, 82, 84]. При цьому замість рівняння Пуассона маємо умову $\rho = 0$ (докладніше див. Розділ 3.2.2). Оскільки тепер замість диференціального рівняння другого порядку маємо алгебраїчне, то число констант інтегрування, що підлягають визначенню, скорочується на дві. Але і система ГУ скорочується на дві умови (2.23). Останні можуть бути в подальшому використані, якщо ми захочемо визначити густину поверхневих зарядів, яка знаходиться саме з умови відсутності електричного поля поза в цілому електронейтрального зразка. Слід зазначити, що в літературі часто недостатньо звертається увага читача на той факт, що в рамках наближення квазінейтральності, хоч і передбачається, що локальний об'ємний заряд відсутній $\rho = 0$, проте повний об'ємний заряд $\int_V \rho dV$ може бути відмінним від нуля.

При наявності рекомбінації з чотирьох ГУ (2.23) незалежними є три, і вони спільно з ГУ (2.24) складають коректно визначену повну систему ГУ в наближенні квазінейтральності. Якщо ж, як уже було зроблено вище, припустити відсутність рекомбінації, то з ГУ (2.23) незалежними залишаються тільки дві і знову система ГУ повинна бути доповнена однією додатковою умовою.

Виходом із такого становища є використання умови (2.27). Очевидно, що вона в даному випадку вже не є точною, оскільки частина носіїв пішла з об'єму напівпровідника, сформувавши поверхневий заряд. Однак число таких носіїв в $(l/a)^2$ разів менше числа носіїв, що перерозподілилися під зовнішнім впливом, тому ними у багатьох випадках можна знехтувати.

2.2.3 ГУ для контакту двох середовищ

Однією з принципових з точки зору фізики відмінностей контакту двох провідних середовищ від вільної поверхні є можливість протікання електричного струму через поверхню розділу цих середовищ. Природно, ця можливість повинна знайти своє відображення в ГУ. На жаль, ГУ, що дуже часто використовуються навіть в широковідомій літературі, з цієї точки зору не є коректними. Як приклад, що підтверджує сказане, можна навести такий. При розгляді транспортних задач в напівпровідникових структурах досить широко використовується ГУ такого вигляду (наприклад, для електронів, незалежно від того, чи є вони основними або неосновними носіями) [83]:

$$\left. j_n \right|_{\Gamma} = \left. s \left. \delta n \right|_{\Gamma} \right.$$

де *s* - швидкість поверхневої рекомбінації на межі поділу двох провідних середовищ Г. Однак, дана умова за своїм фізичним змістом означає, що носії не переносяться через контакт, а генеруються або рекомбінують на ньому, тобто весь струм в колі формується виключно механізмами поверхневої рекомбінації. Як правило, в реальних структурах це не так.

Іншим прикладом є ігнорування поверхневої рекомбінації в транспортних задачах без належної оцінки коректності такого наближення. Такий підхід може вести до неправильних результатів, бо вплив поверхневої рекомбінації на транспортні процеси має місце вже в лінійному по полю наближенні (див. роботу [125] і обговорення в Розділі 3).

Крім того, необхідно звернути увагу на можливість існування і руху кожного типу носіїв в кожному з середовищ, що контактують. Як приклад, вкажемо структуру "метал-дірковий напівпровідник-метал". Оскільки в металі дірковий струм дорівнює нулю, за відсутності рекомбінації (як об'ємної, так і поверхневої), електричний струм через дірковий напівпровідник буде здійснюватися тільки неосновними носіями — електронами. Ясно, що опір зразка в цьому випадку виявиться істотно вищим, ніж можна було очікувати [133].

З фізичної точки зору необхідно виділити наступні варіанти контакту двох середовищ, підходи до вивчення транспортних процесів в яких суттєво відрізняються. Передбачається, що немає поверхневих станів і пов'язаних з їх наявністю поверхневих зарядів.

- 1. Контакт двох напівпровідників при відсутності квазінейтральності в кожному з них (в площині контакту поверхневий заряд відсутній).
- 2. Контакт напівпровідника з металом або з іншим напівпровідником, в якому виконуються умови квазінейтральності (в контакті формується поверхневий заряд).
- Контакт напівпровідника в умовах квазінейтральності з металом або іншим напівпровідником в умовах квазінейтральності (в контакті формується подвійний заряджений шар).

Як неважко переконатися, введення кожної нової поверхні розділу двох середовищ вимагає довизначення нових шести констант інтегрування, тобто завдання шести додаткових ГУ. За відсутності в площині розділу середовищ поверхневих зарядів для випадку двох напівпровідників такими ГУ є наступні (вважаємо, що контакт має координату z = 0):

$$\epsilon_1 \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(-0) = \epsilon_2 \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(+0), \qquad (2.28)$$

$$\varphi(-0) = \varphi(+0). \tag{2.29}$$

Чотири ГУ, що визначають значення електронного та діркового струму на контакті, були сформульовані в роботі [91]:

$$j_n(+0) - j_n(-0) = eR_s, (2.30)$$

$$j_p(+0) - j_p(-0) = -eR_s, \qquad (2.31)$$

$$j_n(-0) = \sigma_n^s \left\{ \psi_n(-0) - \psi_n(+0) - \alpha_n^s \left[T_n(+0) - T_n(-0) \right] \right\} - eR_s^{n-}, \quad (2.32)$$

$$j_p(-0) = \sigma_p^s \left\{ \psi_p(-0) - \psi_p(+0) - \alpha_p^s \left[T_p(+0) - T_p(-0) \right] \right\} + eR_s^{p-}, \quad (2.33)$$

де R_s - темп поверхневої електрон-діркової рекомбінації, $\sigma_{n,p}^s$ - поверхнева провідність електронів і дірок, $\alpha_{n,p}^s$ - коефіцієнти поверхневої термоерс носіїв, R_s^{n-} , R_s^{p-} - ефективний темп рекомбінації електронів і дірок з одного боку контакту [91], детальне визначення темпів поверхневої рекомбінації буде приведено нижче.

У загальному випадку на поверхні зразка мають місце додаткові специфічні механізми рекомбінації носіїв, які повинні бути коректно враховані саме в ГУ. Оскільки статистично поверхнева рекомбінація аналогічна об'ємній рекомбінації, при її включенні в ГУ необхідно також враховувати чинники, викладені в розділі 3. Зокрема, слід звернути увагу на особливості, пов'язані з стаціонарним режимом перенесення заряду і/або можливою появою гарячих носіїв струму.

Необхідно зазначити, що форма ГУ (2.30)-(2.33) не є єдино можливою. Так, замість (2.32)-(2.33) можна виписати відповідні вирази для струмів при z = +0 [91]:

$$j_n(+0) = \sigma_n^s \left\{ \psi_n(-0) - \psi_n(+0) - \alpha_n^s \left[T_n(+0) - T_n(-0) \right] \right\} + eR_s^{n+}, \quad (2.34)$$

$$j_p(+0) = \sigma_p^s \left\{ \psi_p(-0) - \psi_p(+0) - \alpha_p^s \left[T_p(+0) - T_p(-0) \right] \right\} - eR_s^{p+}, \quad (2.35)$$

де R_s^{n+} , R_s^{p+} - ефективний темп рекомбінації електронів і дірок з іншого боку контакту, причому дотримується співвідношення $R_s^{n-} + R_s^{n+} = R_s^{p-} + R_s^{p+} = R_s$ [91].

В ряді випадків система ГУ (2.32)-(2.35) виявляється більш зручною у використанні, ніж система ГУ (2.30)-(2.33).

Фізичний сенс ГУ (2.28)-(2.33) стає абсолютно ясним, якщо розглянути однорідний напівпровідник, ввівши уявну межу розділу при z = 0. Тоді вирази (2.28)-(2.29) переходять в цілком очевидні умови зшивання рішень

для електричного поля в областях z < 0 i z > 0:

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(-0) = \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}(+0),\tag{2.36}$$

$$\varphi(-0) = \varphi(+0). \tag{2.37}$$

Оскільки поверхнева рекомбінація на уявній межі відсутня, вирази (2.30)-(2.31) переходять в наступні:

$$j_n(-0) = j_n(+0), \qquad j_p(-0) = j_p(+0).$$
 (2.38)

Умови (2.32)-(2.33) в цьому випадку (поверхнева провідність уявної межі розділу нескінченна, а температура неперервна) приводяться до наступного вигляду:

$$\psi_n(-0) = \psi_n(+0), \qquad \psi_p(-0) = \psi_p(+0),$$
(2.39)

що, вважаючи (2.37), означає зшивання рішень для концентрацій носіїв n(-0) = n(+0) и p(-0) = p(+0).

Нехай тепер в одному з напівпровідників (для визначеності — правому, тобто при z > 0) виконуються умови для наближення квазінейтральності [81, 83, 84, 267] (детальніше див. підрозділ 2.3). Оскільки в цьому випадку рівняння Пуассона в правом напівпровіднику не використовується (замість нього є алгебраїчне рівняння $\rho = 0$), то для визначення всіх констант інтегрування необхідно на дві ГУ менше.

Виконання умов квазінейтральності в правому напівпровіднику означає, що товщиною шару об'ємного заряду в ньому ми нехтуємо, вважаючи цей заряд поверхневим. У той же час в лівому напівпровіднику, де квазінейтральності немає, поблизу контакту формується шар об'ємного заряду. Проінтегрував рівняння Пуассона по приконтактній ділянці, що містить об'ємний заряд, переконаємося, що наявність густини заряду приводить до появи стрибка напруженості електричного поля на контакті. Повторне ж інтегрування рівняння Пуассона показує, що електричний потенціал залишається безперервним. Для появи стрибка електричного потенціалу необхідна наявність подвійного зарядженого шару поверхневих зарядів. Таким чином ГУ (2.29) залишається в силі, в той час як умовою (2.28) користуватися не можна. З тієї ж причини, як уже обговорювалося вище, стає непотрібним для визначення констант інтегрування аналогічна ГУ на протилежному контакті зразка.

У разі контакту двох напівпровідників в умовах квазінейтральності (або металів) на контакті утворюється подвійний заряджений шар, що приводить до появи стрибка електричного потенціалу. Тому в даному випадку не виконуються ні умови (2.28), ні умови (2.29). Однак, при цьому і в другому напівпровіднику рівняння Пуассона не використовується. Таким чином число констант інтегрування скорочується, система ГУ залишається коректно визначеною, тобто всі константи інтегрування можуть бути знайдені.

Перейдемо тепер до розгляду контакту напівпровідника з металом. Даний випадок багато в чому аналогічний контакту двох напівпровідників, якщо квазінейтральність має місце тільки в одному з них. Проте, цей випадок має дві відмінні риси, які необхідно врахувати. По-перше, в металі, на відміну від напівпровідника в квазінейтральності, відсутні нерівноважні носії [73, 268], що спрощує вирази для ГУ. По-друге, метал принципово є монополярним провідником, що створює певні труднощі у визначенні поверхневих характеристик контакту для використання ГУ виду (2.30)-(2.33). Таким чином цей випадок вимагає додаткового розгляду.

Дослідимо, яким чином перетворюються вирази (2.33), якщо одна з контактуючих середовищ являє собою метал (для визначеності, при z > 0). У металі існує тільки один тип носіїв, отже, дірковий струм в металі відсутній: $j_p(+0) = 0$. Припустимо спочатку, що в напівпровіднику немає переходів електронів в площині контакту між зоною провідності напівпровідника і його валентної зоною безпосередньо або через домішкові рівні. Однак, взагалі кажучи, при цьому може мати місце обмін електронами між металом і валентною зоною напівпровідника за рахунок тунельного або термоемісійного механізму. В принципі, можливо два шляхи врахування такого обміну.

- Можна вважати, що швидкість поверхневої рекомбінації R_s визначається тільки переходами електронів між зонами напівпровідника. В такому випадку при нехтуванні цими переходами $R_s = 0$. При цьому ми змушені допустити, що поверхнева провідність дірок σ_p^s може бути відмінна від нуля, щоб врахувати можливий дірковий струм, обумовлений переходами електронів металу в валентну зону напівпровідника. Такий підхід тягне за собою ряд методологічних труднощів. По-перше, що мати на увазі під величиною електрохімічного потенціалу дірок в металі? По-друге, потрібно знайти фізично неочевидну заміну виразу (2.31).
- Покладемо поверхневу провідність дірок на контакті напівпровідника з металом тотожно рівній нулю. При цьому процеси переходу електронів між металом і валентною зоною напівпровідника розглядаємо як новий, специфічний механізм поверхневої рекомбінації (далі — "перехресна" рекомбінація) і враховуємо його в виразі R_s. При цьому R_s ≠ 0 навіть якщо немає переходів електронів в площині контакту між зоною провідності напівпровідника і його валентної зоною. Саме цей спосіб опису і буде застосований нижче.

Визначимо структуру члена, що описує поверхневу рекомбінацію з урахуванням переходів "метал-валентна зона напівпровідника". Дотримуючись [91], розглянемо тонкий шар $-\delta < z < \delta$ поблизу контакту, вважаючи, що транспорт носіїв в ньому описується рівняннями безперервності, як і в усьому об'ємі зразка. Тоді:

$$R_s^{n-} = \sigma_n^s \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} \mathrm{d}\chi \sigma_n^{-1}(\chi) \int_{-\delta}^{\chi} R(z) \mathrm{d}z, \qquad (2.40)$$

$$R_s^{p-} = \sigma_p^s \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} d\chi \sigma_p^{-1}(\chi) \int_{-\delta}^{\chi} R(z) dz, \qquad (2.41)$$

$$R_s^{n+} = \sigma_n^s \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} d\chi \sigma_n^{-1}(\chi) \int_{\chi}^{+\delta} R(z) dz, \qquad (2.42)$$

$$R_s^{p+} = \sigma_p^s \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} \mathrm{d}\chi \sigma_p^{-1}(\chi) \int_{\chi}^{+\delta} R(z) \mathrm{d}z, \qquad (2.43)$$

$$R_s = \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} R(z) dz, \qquad (2.44)$$

де *R* описує швидкість рекомбінації (включаючи "перехресну") в перехідному шарі. Логічно припустити, що при такому розгляді перехідного шару як деякого середовища кінцевої протяжності з фізичними параметрами, що змінюються від одного середовища до іншого, процеси переходу "метал-валентна зона напівпровідника" будуть відбуватися на відстанях, значно менших товщини цього шару. Тобто темп рекомбінації може бути представлений у вигляді:

$$R(z) = \begin{cases} R_{np}(z) + R_{\sigma}\delta(z-0), & z \le 0\\ 0, & z > 0 \end{cases}$$
(2.45)

Тут R_{np} - темп рекомбінації носіїв в перехідному шарі (без врахування "перехресної" рекомбінації), R_{σ} - параметр темпу "перехресної" рекомбінації, фізичний зміст цієї величини буде з'ясований нижче.

В (2.45) явним чином враховано, що в металі рекомбінації немає, оскільки немає другого типу носіїв. Підкреслимо, що відсутність рекомбінації в одному з середовищ, взагалі кажучи, не означає, що відповідний член $R_s^{n\pm}$, $R_s^{p\pm}$ звертається в нуль. Для цього необхідна ще й особлива структура $\sigma_{n,p}$ в перехідному шарі. Дійсно, з виразів (2.40)-(2.43) видно, що оскільки інтегрування і для R_s^{n+} (R_s^{p+}), і для R_s^{n-} (R_s^{p-}) ведеться по всьому перехідному шару, для їх звернення в нуль недостатньо звернення в нуль темпу рекомбінації в одній частині шару. Для цього необхідна ще й відповідна структура підінтегральної функції, тобто провідності.

Підставляючи (2.45) у вирази (2.40)-(2.44) і інтегруючи член з "перехресної" рекомбінацією по частинах, отримуємо:

$$\begin{aligned} R_{s}^{n-} &= \sigma_{n}^{s} \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} \mathrm{d}\chi \sigma_{n}^{-1}(\chi) \int_{-\delta}^{\chi} R_{np}(z) \mathrm{d}z + \sigma_{n}^{s} R_{\sigma} \lim_{\delta \to 0} \int_{0}^{+\delta} \sigma_{n}^{-1}(\chi) \mathrm{d}\chi, \\ R_{s}^{p-} &= \sigma_{p}^{s} \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} \mathrm{d}\chi \sigma_{p}^{-1}(\chi) \int_{-\delta}^{\chi} R_{np}(z) \mathrm{d}z + \sigma_{p}^{s} R_{\sigma} \lim_{\delta \to 0} \int_{0}^{+\delta} \sigma_{p}^{-1}(\chi) \mathrm{d}\chi, \\ R_{s}^{n+} &= \sigma_{n}^{s} \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} \mathrm{d}\chi \sigma_{n}^{-1}(\chi) \int_{\chi}^{+\delta} R(z) \mathrm{d}z + \sigma_{n}^{s} R_{\sigma} \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{0} \sigma_{n}^{-1}(\chi) \mathrm{d}\chi, \\ R_{s}^{p+} &= \sigma_{p}^{s} \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} \mathrm{d}\chi \sigma_{p}^{-1}(\chi) \int_{\chi}^{+\delta} R(z) \mathrm{d}z + \sigma_{p}^{s} R_{\sigma} \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{0} \sigma_{p}^{-1}(\chi) \mathrm{d}\chi, \\ R_{s} &= \lim_{\delta \to 0} \int_{-\delta}^{+\delta} R_{np}(z) \mathrm{d}z + R_{\sigma}. \end{aligned}$$

З останнього виразу випливає, що R_{σ} - це інтегральний темп "перехресної" рекомбінації на контакті. Його можна обчислити з таких міркувань. Нехай транспорт носіїв через контакт забезпечується термоелектронною емісією. Тоді потік електронів з металу в валентну зону, який і являє собою цікавий для нас темп "перехресної" рекомбінації, дорівнює

$$j_r = \int_{\pi/2}^{\pi} d\Gamma \int d\Gamma' P(\varepsilon', \varepsilon) \mathbf{v} f_+(\varepsilon) g_+(\varepsilon) - \int_0^{\pi/2} d\Gamma \int d\Gamma' P(\varepsilon, \varepsilon') \mathbf{v} f_-(\varepsilon) g_-(\varepsilon). \quad (2.46)$$

Тут f_{-} , g_{-} - функція розподілу і густина станів в валентній зоні напівпровідника, f_{+} , g_{+} - функція розподілу і густина станів в металі, $P(\varepsilon, \varepsilon')$ - ймовірність переходу зі стану з енергією ε в металі в стан з енергією ε' в валентній зоні напівпровідника. Інтегрування ведеться за об'ємом фазового простору, а межі показують по якій півсфері треба інтегрувати (тобто задають напрямок потоку).

Подальші перетворення вимагають конкретизувати як механізм переходу електронів через контакт (ймовірність $P(\varepsilon, \varepsilon')$), так і зонну структуру, механізми релаксації і т.д. Однак, для випадку малого відхилення від рівноваги на основі (2.46) можна сформулювати модельний вираз для темпу "перехресної" рекомбінації. Очевидно, він буде містити члени $T(+0) - T_p(-0)$ і $\delta \mu_p(-0)$. Тут $\delta \mu_p(-0)$ являє собою відхилення хімічного потенціалу дірок від його рівноважного значення при температурі T(-0), $T_p(-0)$ - температура нерівноважних дірок на контакті, $T(+0) \equiv T_0$ - температура на контакті в металі. Вважається, що метал є термостат, який перебуває при температурі T_0 . Температура ж напівпровідника T(-0) може відрізнятися від рівноважної при кінцевій поверхневої теплопровідності контакту. Зміною хімічного потенціалу металу можна знехтувати, вважаючи, що концентрація електронів в металі не змінюється при протіканні електричного струму. Тоді:

$$R_{\sigma} = \xi_p \left(p(-0) - p_0 \right) + \zeta_p \left(T(+0) - T(-0) \right), \qquad (2.47)$$

де ξ_p
и ζ_p - деякі сталі, що характеризують контакт.

До такої ж структурі виразу для R_{σ} ми приходимо, розглядаючи іншу модель "перехресної" рекомбінації. Запишемо її по аналогії з темпом міжзонної рекомбінації (див. роботу [6] і Розділ 3):

$$R_{\sigma} = \varrho(T_e, T)np - \varrho(T, T)n_0 p_0, \qquad (2.48)$$

де $n = n_0 = n_m$ - концентрація електронів в металі, а $p = p_0 + \delta p$ - концентрація дірок в напівпровіднику (p_0 - концентрація дірок в рівновазі при рів-

новажній однорідній температурі T_0), $T_e = T_m = T_0 + \delta T(+0)$ - температура електронів в металі, $T = T_0 + \delta T(-0)$ - температура дірок в напівпровіднику.

У виразі (2.48) в явному вигляді враховано, що перетин захоплення електронів дірками або домішковим рівнями (перший доданок) може залежати як від енергії (температури) електронів, так і від температури кристалічної решітки. У той же час темп теплової генерації електронів провідності (другий доданок) визначається тільки температурою кристалічної решітки.

З огляду на те, що в рівновазі темп рекомбінації звертається в нуль, і вважаючи $\varrho(T_m, T_0) = \varrho(T_0, T_0) + \frac{\partial \varrho}{\partial T_c} \delta T(+0)$, приходимо до виразу:

$$R_{\sigma} = \frac{\partial \varrho}{\partial T_e} n_m p_0 \left(\delta T(+0) - \delta T(-0) \right) + \varrho n_m \delta p, \qquad (2.49)$$

що збігається за структурою з виразом (2.47).

При вивченні напівпровідникових гетероструктур, що складаються з декількох різних матеріалів, запропоновані ГУ повинні бути виписані для кожного контакту.

При отриманні вищевикладених ГУ передбачалася відсутність генерації носіїв струму на контакті. Якщо ж поверхнева генерація має місце, отримані ГУ можуть бути легко узагальнені і на цей випадок [15, 33, 269]. Темп поверхневої генерації входить адитивним чином в вирази (2.32)-(2.33).

2.2.4 Замкнуте коло. Зовнішні контакти

При вивченні транспортних ефектів в замкнутому колі, тобто при наявності зовнішньої ділянки, потрібно додатково розглянути контакти із зовнішнім колом. Як правило, зовнішнє коло являє собою металеві електроди, тому зовнішні контакти представляють собою проаналізований вище контакт напівпровідника з металом. Для замкнутого кола, що складається з напівпровідника і двох металевих електродів, повна система ГУ має такий вигляд. ГУ на лівому контакті:

$$j_n(-a) = \sigma_n^s \left\{ \psi_m(-a) - \psi_n(-a) - \alpha_n^s \left[T_n(-a) - T_m(-a) \right] \right\} + eR_s^{n+}, \quad (2.50)$$

$$j_p(+0) = -eR_s^{p+}, (2.51)$$

$$\varphi(-a) = 0. \tag{2.52}$$

На правому:

$$j_n(a) = \sigma_n^s \left\{ \psi_n(a) - \psi_m(a) - \alpha_n^s \left[T_m(a) - T_n(a) \right] \right\} - e R_s^{n-}, \qquad (2.53)$$

$$j_p(-0) = eR_s^{p-}, (2.54)$$

$$\varphi(a) = V, \tag{2.55}$$

де потенциал правого електроду V визначається зовнішнім колом.

Що стосується трансформації ГУ для рівняння Пуассона (2.14)-(2.15) при наявності електричного струму в колі, то необхідно зробити наступне зауваження. Останнім часом в літературі [79] можна зустріти такий вираз для контакту напівпровідника з металом, через який протікає електричний струм густиною *j*:

$$\delta\varphi|_{x=0} - \delta\varphi_M|_{x=0} = \frac{j}{\sigma_s},\tag{2.56}$$

де $\delta \varphi$ і $\delta \varphi_M$ - викликані струмом зміни електричного поля на контакті відповідно в напівпровіднику і в металі, σ_s - поверхнева провідність контакту. На жаль, рівняння (2.56) введено без належної аргументації і по суті невірно. Причому ця умова не виконується ні при наявності, ні при відсутності подвійного шару об'ємного заряду. Дійсно, при відсутності подвійного шару об'ємного заряду, електричний потенціал повинен бути безперервним, як згадувалося вище. Однак, рівняння (2.56) означає, що при кінцевій величині поверхневої провідності при появі в колі електричного струму неминуче з'являється розрив електричного потенціалу. У присутності ж подвійного шару об'ємного заряду, оскільки обидві сторони контакту знаходяться в умовах квазінейтральності, величина розриву електричного потенціалу невідома. Але в цьому випадку диференціальне рівняння Пуассона вироджується в рівняння алгебри $\rho = 0$, і відповідні йому ГУ стають зайвими. Тому штучне введення ГУ для рівняння Пуассона для контакту зі струмом в умовах квазінейтральності з математичної точки зору є безглуздим.

Для подальшого аналізу виразу (2.56) розглянемо випадок контакту двох металів в якості найпростішої моделі. Результати цього розгляду можуть бути легко узагальнені на випадок контактів металу з напівпровідником або двох напівпровідників шляхом врахування підсистеми дірок. При наявності на контакті подвійного шару об'ємного заряду, з (2.34), вважаючи $R_s^{n+} = 0, j_n = j, \sigma_n^s = \sigma_s$, неважко отримати:

$$j = \sigma_s \left[\delta \psi |_{x=-0} - \delta \psi |_{x=+0} \right].$$
(2.57)

Оскільки в металі відсутні нерівноважні носії, $\delta n = \delta p = 0$, $\delta \mu_n = 0$, і рівняння (2.57) набуває такого вигляду:

$$j = \sigma_s \left[\delta \varphi |_{x=-0} - \delta \varphi |_{x=+0} \right].$$
(2.58)

Це рівняння формально збігається з рівнянням (2.56), але воно має зовсім інший фізичний зміст. Вираз (2.58) виходить природним чином як наслідок транспортних рівнянь дифузійно-дрейфової моделі в приконтактному шарі і не використовується як ГУ в наближенні квазінейтральності. При порушенні умов квазінейтральності (як це розглядається в [79]) замість (2.58) має місце умова (2.56). При цьому для вирішення рівняння Пуассона в якості ГУ, як і раніше, необхідно використовувати умови безперервності електричного потенціалу на контакті (2.14).

У багатьох задачах електроніки відсутній стрибок температури на контакті напівпровідника з металом (термостатом), але може мати місце поверхнева фотогенерація носіїв струму (наприклад, при моделюванні роботи сонячних батарей [15, 270]). В цьому випадку ГУ (2.50)-(2.55) можуть бути переписані в наступному вигляді:

$$j_n(-a) = \sigma_n^s \left\{ \psi_m(-a) - \psi_n(-a) \right\} + e \left[R_s^{n+}(-a) - g_s^{n+}(-a) \right], \qquad (2.59)$$

$$j_p(+0) = -e \left[R_s^{p+}(-a) - g_s^{p+}(-a) \right], \qquad (2.60)$$

$$\varphi(-a) = 0, \tag{2.61}$$

$$j_n(a) = \sigma_n^s \left\{ \psi_n(a) - \psi_m(a) \right\} - e \left[R_s^{n-}(a) - g_s^{n-}(a) \right], \qquad (2.62)$$

$$j_p(-0) = e \left[R_s^{p-}(a) - g_s^{p-}(a) \right], \qquad (2.63)$$

$$\varphi(a) = V. \tag{2.64}$$

У деяких задачах потенціал правого електрода V являє собою фіксовану (відому) величину [125], а в деяких (наприклад, в задачах по визначенню фото- і термоерс) повинен бути обчислений поряд з просторовим розподілом носіїв [133]. В останньому випадку, вводячи в розгляд величину повного струму в колі

$$j_0 = j_n(-a) + j_p(-a), (2.65)$$

замикаємо систему ГУ (2.50)-(2.65) рівнянням Кирхгофа

$$V = j_0 R_m, (2.66)$$

де R_m - опір зовнішнього кола.

Граничний перехід до випадку розімкнутого кола реалізується шляхом устремління величини опору до нескінченності: $R_m \to \infty$.

Як обговорювалося вище, якщо в напівпровіднику реалізуються умови для застосування наближення квазінейтральності, то число констант інтегрування, що підлягають визначенню, зменшується на дві. Однак в цьому випадку на контакті напівпровідника з металом з'являються стрибки електричного потенціалу $\Delta \varphi_c(\pm a)$, що представляють собою дві нові невідомі, а ГУ (2.52), (2.55) в даному випадку повинні бути переписані таким чином:

$$\varphi(-a) = \Delta \varphi_c(-a), \qquad \varphi(a) = V - \Delta \varphi_c(a).$$
 (2.67)

Таким чином повне число невідомих залишається тим же, і система ГУ як і раніше залишається коректно визначеною.

Незважаючи на те, що вирази (2.30)-(2.33) були отримані в припущенні, що в приконтактному шарі, за яким проводиться інтегрування, транспортні процеси також описуються дифузійно-дрейфовою моделлю, ці ГУ мають важливі з точки зору фізики властивості, які забезпечують їм більш широку область застосовності, якщо величини $R_s^{n,p}$ розуміти як деякі феноменологічні параметри задачі (які можуть залежати, наприклад, від величини струму, що протікає) або для їх визначення використовувати ту чи іншу мікроскопічну модель контакту (термоелектрична емісія, тунельний транспорт, тощо).

ГУ (2.50)-(2.55) пов'язують ток носіїв через контакт зі стрибком термодинамічних величин на контакті. Для коректного визначення величини ЕРС необхідно, щоб на кінцях кола, що досліджується, співпадали електрохімічні потенціали всіх типів носіїв (див. Розділ 5). Як правило, в металевих електродах ця умова виконується і використання (2.50)-(2.55) виявляється дуже зручним.

Необхідно відзначити ще одну важливу обставину. При розгляді контакту напівпровідника з металом зовнішнього електрода виникає спокуса розглядати останній як термостат, функція розподілу електронів якого є рівноважною для заданої температури, і отже, ізотропною. Дійсно, в силу високої концентрації електронів в металі (явно перевищує концентрацію носіїв струму в напівпровіднику), в перенесенні заряду через контакт бере участь їх незначна частина, і при будь-який практично досяжній густині струму в твердотільному приладі анізотропна частина функції розподілу електронів в металі дуже мала в порівнянні з ізотропної. В силу малості товщини контакту можна припустити, що електрони в приконтактній області, які надійшли з металу в напівпровідник, зберігають ізотропний характер своєї функції розподілу. Тим часом, в силу способу отримання (2.50)-(2.55), ці ГУ автоматично враховують анізотропію функції розподілу носіїв у приконтактній області. Як буде продемонстровано нижче, вплив анізотропної частини функції розподілу електронів в металі на електричній струм через контакт може виявитися досить значним, тому застосування ГУ типу (2.50)-(2.55) важливо для отримання фізично коректних результатів.

Вплив анізотропії функції розподілу носіїв струму на контакті на вольтамперну характеристику (ВАХ) напівпровідникового електронного приладу можна наочно продемонструвати на прикладі наступної модельної задачі. Розглянемо балістичний транспорт електронів в квантовій гетероструктурі, що складається з шару GaAs товщиною 5.6 нм, укладеного між двома шарами Al_{1-x}Ga_xAs (з x = 0.67) товщиною 5 нм [1]. Концентрація легуючої домішки становить $N_D^+ = 1 \cdot 10^{18}$ сm⁻³. В цьому випадку висота потенційних бар'єрів квантової ями дорівнює 0.247 еВ. Температура приладу прийнята $T_0 = 300$ К. Хоча це завдання виходить за рамки дифузійно-дрейфової моделі, однак воно більш наочно виявляє вплив анізотропії функції розподілу електронів в металі і приконтактному шарі на ВАХ приладу.

Вважаючи зовнішній вплив малим, обмежимося першим порядком розкладання, виразивши функцію розподілу електронів у вигляді $f = f_0 + g \cos \vartheta$, де f_0 - рівноважний розподіл Фермі-Дірака при температурі T_0 , ϑ кут між вектором квазіімпульса електрона **k** і нормаллю до поверхні контакту (напрямком осі Oz). Для простоти покладемо $\vartheta = 0$. Функція g знаходиться з рівняння Больцмана [150, 271]:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}},\tag{2.68}$$

де
 ${\bf v}$ - швидкість електрона провідності в напівпровіднику.

Будемо вважати, що в напівпровідникових шарах електрони можуть розсіюватися на поздовжніх оптичних фононах (LO), для надлишкової заселеності N_{LO} яких може бути виписано наступне кінетичне рівняння [271, 272]:

$$\frac{\mathrm{d}N_{LO}}{\mathrm{d}t} = -\xi N_{LO} + \frac{1}{U} \left[S_e(g) - S_a(g) \right], \qquad (2.69)$$

де ξ - коефіцієнт затухання фононів, U - число доступних фононних мод в одиниці об'єму, $S_{e,a}$ - відповідно темпи емісії та поглинання LO-фононів (що залежать від функції g).

Існують два фізичних підходи, що широко використовуються для моделювання наведеного мікроелектронного приладу. Перший з них [273] передбачає рівноважний розподіл носіїв в приконтактній області і балістичний транспорт через систему потенційних бар'єрів. У другому підході [274] передбачається балістичний транспорт в усьому проміжку між металевими електродами, що грають роль термостата. Порівняння цих двох підходів з експериментальними дослідженнями тунельних діодів на основі двобар'єрної гетероструктури SiGe i AlAs/GaAs наведені в [275]. Використаний в цій роботі підхід відрізняється тим, що враховується асиметрія функції розподілу носіїв струму в приконтактній області (що випливає з дифузійно-дрейфової моделі протікання струму в металевому електроді).

Електричний струм через зазначену резонансну тунельну гетероструктуру може бути знайдений рішенням рівняння Шредінгера в наближенні вільного електрона для хвильової функції $\Psi(\varepsilon)$ електрона з енергією ε :

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \mathcal{V}(z) - \varepsilon\right]\Psi(\varepsilon) = 0, \qquad (2.70)$$

зі звичайними ГУ для плоских хвиль [276]. В (2.70) m - маса електрона, $\mathcal{V}(z)$ - електростатичний потенціал в структурі. Збереження заряду забезпечується зшивкою на контакті хвильової функції і її похідної, віднесеної до ефективної маси.

Знайшовши коефіцієнт проходження \mathcal{T} , електричний струм через структуру може бути знайдений в такий спосіб [277]:

$$j = \frac{e}{4\pi^3\hbar} \int d\varepsilon_z d^2 k_{||} \mathcal{T}(\varepsilon_z) \left[f(\varepsilon) - f(\varepsilon + eV) \right].$$
 (2.71)



Рисунок 2.2 — ВАХ резонансної тунельної гетероструктури. 1 - для розподілу Фермі-Дірака; 2 - для анізотропної функція розподілу електронів у контактах

Результати комп'ютерного моделювання зазначеної резонансної тунельної гетероструктури наведені на рис. 2.2.

Як видно з рис. 2.2, анізотропія носіїв струму в площині контакту напівпровідникового приладу з зовнішнім металевим електродом істотно впливає на ВАХ приладу. Тому запропоновані вище ГУ, що враховують цю анізотропію, відкривають можливість більш точно моделювати функціонування сучасних твердотільних мікроелектронних пристроїв.

2.3 Концепція квазінейтральності в теорії транспортних процесів в біполярних середовищах

Квазінейтральність є базовою концепцією в теоретичних дослідженнях і чисельному моделюванні напівпровідникових пристроїв і широко викори-

стовується в літературі, присвяченій транспортним явищам в плазмі. Фізичний сенс наближення квазінейтральності широко обговорювався (див., наприклад, [13, 81–84, 267]). Як неважко помітити з рівняння Пуассона, при збільшенні характерної довжини зміни хімічного потенціалу L в порівнянні з дебаєвським радіусом екранування l об'ємний заряд $\delta \rho$, що представляє собою відхилення від квазінейтральності, убуває як $\delta \rho \sim (l/L)^2$. Отже, якщо $(l/L)^2 \ll 1$, то величиною $\delta \rho$ можна знехтувати. У цих умовах диференціальне рівняння Пуассона стає алгебраїчним рівнянням $\delta \rho = 0$, що робить зайвим відповідні ГУ. Крім того, це рівняння алгебри встановлює зв'язок між концентраціями нерівноважних носіїв, скорочуючи на одиницю число диференціальних рівнянь в системі. У більшості напівпровідникових приладів фізичної електроніки існують області, в яких наближення квазінейтральності має місце: p - n діоди (далеко від переходу), високо леговані приконтактні області та ін. Крім того, квазінейтральні області мають першорядне значення для розуміння транспортних процесів в пристроях, в яких неосновні носії контролюють струм через пристрій.

Незважаючи на широке використання наближення квазінейтральності, його часто помилково зводять до спрощеної ситуації, вважаючи концентрації нерівноважних електронів $\delta n = n - n_0$, і дірок $\delta p = p - p_0$ (n_0 і p_0 - концентрації носіїв струму в стані термодинамічної рівноваги) рівними один одному: $\delta n \approx \delta p$. Це припущення, яке справедливо в деяких ситуаціях, може привести до суттєвих помилок в інших випадках. Дійсно, в термінах концентрацій нерівноважних носіїв рівняння Пуассона (2.2) для ізотропного біполярного напівпровідника може бути записано в наступному вигляді:

$$\operatorname{div}\delta\mathbf{E} = \frac{4\pi}{\epsilon}\delta\rho = -\frac{4\pi}{\epsilon}(\delta n - \delta p + \delta n_t), \qquad (2.72)$$

де $\delta n_t = n_t - n_t^0$, n_t^0 - концентрація захоплених електронів на домішкових рівнях (тобто концентрація негативно заряджених домішкових рівнів).

Нижче, в підрозділі 4.5 при розгляді рекомбінації буде показано, що в

стаціонарних умовах при слабкій інжекції надмірна концентрація захоплених електронів δn_t , а разом з нею і нерівноважний об'ємний заряд $\delta \rho$ лінійно залежать від концентрацій нерівноважних носіїв струму n і p: $\delta \rho = c_n \delta n + c_p \delta p$, де $c_{n,p}$ - деякі константи, які визначаються з (4.39). Звідси випливає, що квазінейтральність може бути ототожнена з умовою $\delta n \approx \delta p$ тільки у власних напівпровідниках або в умовах, що забезпечують можливість знехтувати зміною заселеності домішкових рівнів.

Як уже згадувалося, наближення квазінейтральності може бути успішно використано для зменшення складності системи рівнянь, яка описує задачу, шляхом виключення з неї рівняння Пуассона. Можна припустити, що наслідком такого підходу є втрата інформації про просторовий розподіл електричного потенціалу у зразку, що досліджується. Дійсно, в більшості дослідницьких робіт і монографій, при використанні наближення квазінейтральності питання про координатну залежність електричного потенціалу (пов'язаного з нерівновагим об'ємним зарядом) не піднімається. Покажемо, що насправді в умовах квазінейтральності ніякої втрати інформації про електричний потенціал немає.

Розглянемо для прикладу структуру "метал-напівпровідник-метал" (рис. 2.3), вибравши для визначеності електронний напівпровідник з наступним співвідношенням роботи виходу напівпровідника χ_s і металу χ_m : $\chi_s < \chi_m$. Енергетична діаграма цієї структури відразу після приведення матеріалів у контакт до закінчення перехідних процесів і встановлення термодинамічної рівноваги приведена на рис. 2.4.

Концентрація носіїв струму в невиродженому напівпровіднику до початку обміну електронами з металом, описується відомими виразами [150], що зв'язують концентрацію носіїв в однорідному напівпровіднику при температурі T_0 з їх рівноважних хімічними потенціалами $\mu_{n,p}^0$ і рівноважної гу-



Рисунок 2.3 — Структура "метал-напівпровідник-метал"

стиною станів $\nu_{n,p}^0(T_0)$, заданими при цій же температурі:

$$n_0(T_0) = \nu_n^0(T_0) \exp\left(\frac{\mu_n^0(T_0)}{k_B T_0}\right), \qquad (2.73)$$

$$p_0(T_0) = \nu_p^0(T_0) \exp\left(\frac{\mu_p^0(T_0)}{k_B T_0}\right).$$
(2.74)

На рис. 2.4 хімічний потенціал напівпровідника позначений $\mu_s^0 \equiv \mu_n^0(T_0)$, рівноважний дірковий потенціал пов'язаний з ним як $\mu_p^0 = -\epsilon_g - \mu_s^0$; густини станів: $\nu_{n,p}^0 = \left(m_{n,p}T_0/4\pi\hbar^2\right)^{3/2}$, $m_{n,p}$ - ефективні маси носіїв струму.

Після закінчення перехідних процесів, що супроводжуються перетіканням електронів з напівпровідника в метал, формується новий термодинамічно рівноважний стан, що характеризується спільною температурою T_0 і спільним електрохімічним потенціалом $\psi(x) = \varphi(x) - \mu_s^0/e$, де $\varphi(x)$ - електричний потенціал, що виникає в результаті перерозподіл заряду між напівпровідником і металом через різницю в роботах виходу.

Зазвичай можна ігнорувати цей перерозподіл заряду в металі, оскільки він має місце в масштабі кількох атомних шарів і можна вважати, що весь заряд зосереджений на поверхні металу. Розподіл же заряду в напівпровіднику істотно залежить від співвідношення l/a. Значення радіуса Дебая в монополярному напівпровіднику визначається концентрацією основних носіїв, тому



Рисунок 2.4 — Зонна діаграма структури "метал-напівпровідник-метал" до встановлення термодинамічної рівноваги

в даному випадку:

$$l = \sqrt{\frac{\epsilon k_B T_0}{4\pi e^2 n_0(T_0)}}.$$
 (2.75)

Умова квазінейтральності виконується при $a^2 \gg l^2$. В цьому випадку перерозподіл заряду в напівпровіднику відбувається тільки в шарах, близьких до площини контакту з металом [81, 82]. Товщина цих шарів приблизно l, для типових напівпровідників це складає близько $10^{-5} - 10^{-7}$ см. Зміна концентрації електронів δn_0 в цих шарах мала в порівнянні з рівноважною концентрацією. У той же час цей перерозподіл створює дуже помітне електричне поле. Розподіл концентрації в напівпровіднику в розглянутому прикладі схематично зображено на рис. 2.5.

У граничному випадку довгого зразка $(l/a \rightarrow 0)$, як це мається на увазі в квазінейтральності, в площині контакту утворюється подвійний заряджений шар, а електричний потенціал зазнає розрив, як зображено на рис. 2.6. Завершення перехідного процесу і встановлення стану термодинамічної рівноваги приводить до утворення контактної різниці потенціалів.

Енергетична діаграма даної структури "метал-електронний напівпровідник-метал" в стані термодинамічної рівноваги представлена на рис. 2.7.

У наближенні квазінейтральності вирішувати рівняння Пуассона не по-



Рисунок 2.5 — Розподіл концентрації електронів поблизу контактів з металом в стані термодинамічної рівноваги при квазінейтральності

трібно, а контактна різниця потенціалів φ_0 (електричний потенціал в металі прийнятий рівним нулю), може бути визначена за умови рівності електрохімічного потенціалу в напівпровіднику і металі [83] (див. рис. 2.7):



 $\varphi_0 = \frac{1}{e} \left[\mu_n^0(T_0) - \mu_m - \Delta \epsilon_c \right].$ (2.76)

Рисунок 2.6 — Контактна різниця потенціалів при квазінейтральності

Поява доданка $\Delta \epsilon_c = \epsilon_c - \epsilon_{cm}$ пояснюється необхідністю вибору загального рівня відліку енергії. Зазвичай за для цього вибирається рівень дна зони провідності.

Зовсім інша ситуація складається в разі, якщо товщина напівпровідника виявляється одного порядку (або менше) з радіусом Дебая $a \leq l$, тобто коли квазінейтральність відсутня. Тепер перерозподіл заряду відбувається у всьому об'ємі напівпровідника і подвійний заряджений шар не з'являється (див. рис. 2.8).



Рисунок 2.7 — Зонна діаграма структури "метал-напівпровідник-метал" в стані термодинамічної рівноваги при квазінейтральності. ε_{cm} - дно зони провідності металу

В даному випадку електричний потенціал безперервний у кожній точці, включаючи точки $x \pm a$. Ця безперервність обумовлена ГУ (2.29) до рівняння Пуассона.

Знайдемо електричний потенціал і концентрації носіїв струму в одновимірній моделі даної структури в загальному випадку, використовуючи рівняння Пуассона. Просторовий розподіл хімічних потенціалів і нерівноважних концентрацій електронів і дірок можуть бути записані в наступному вигляді:

$$\mu_n(x) = \mu_n^0(T_0) + \delta\mu_n(x), \qquad \mu_p(x) = \mu_p^0(T_0) + \delta\mu_p(x) \tag{2.77}$$

$$n(x) = n_0(T_0) + \delta n_0(x), \quad p(x) = p_0(T_0) + \delta p_0.$$
(2.78)

Знайдемо невідомі функції $\delta \mu_{n,p}(x)$, δn_0 , δp_0 в стані термодинамічної рівноваги в наближенні $\delta \mu_{n,p} \ll k_B T_0$, тобто якщо різниця робіт виходу напівпровідника і металу мала $\chi_m - \chi_s \ll \chi_m$ або якщо температура досить висока.

Тоді, з виразу для концентрації електронів в невиродженому напівпро-



Рисунок 2.8 — Розподіл об'ємного заряду в напівпровіднику за відсутності квазінейтральності

віднику

$$n(x) = \nu_n \exp\left[\frac{\mu_n^0(T_0)}{k_B T_0}\right] \exp\left[\frac{\delta\mu_n(x)}{k_B T_0}\right] = n_0 \left[1 + \frac{\delta\mu_n(x)}{k_B T_0}\right]$$

випливає

$$\delta n_0 = \frac{n_0}{k_B T_0} \delta \mu_n(x). \tag{2.79}$$

Аналогічно для дірок:

$$\delta p_0 = \frac{p_0}{k_B T_0} \delta \mu_p(x). \tag{2.80}$$

У стані термодинамічної рівноваги в системі існує єдиний рівень Фермі, тому варіації хімічного потенціалу носіїв, що викликані перерозподілом електронів через відмінність робіт виходу, пов'язані між собою співвідношенням:

$$\delta\mu_n(x) = -\delta\mu_p(x). \tag{2.81}$$

Тому

$$\delta p_0(x) = -\frac{p_0}{k_B T_0} \delta \mu_n(x).$$
 (2.82)

У цьому випадку рівняння Пуассона можна записати в наступному вигляді:

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{1}{el^2}\delta\mu_n(x). \tag{2.83}$$

З іншого боку, за відсутності електричного струму електричний і хімічний потенціали пов'язані між собою виразом:

$$\frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{e} \frac{\mathrm{d}\delta\mu_n(x)}{\mathrm{d}x}.$$
(2.84)

Вирішуючи рівняння (2.83)-(2.84) спільно, отримаємо:

$$\delta\mu_n(x) = C_1 e^{x/l} + C_2 e^{-x/l}, \qquad \varphi_0(x) = \frac{1}{e} \left(C_1 e^{x/l} + C_2 e^{-x/l} \right) + C_3, \quad (2.85)$$

де $C_{1,2,3}$ - константи інтегрування, що підлягають визначенню з ГУ. Для їх визначення використовуємо сформульовані в підрозділі 2.2.1 ГУ, які стосовно задачі, що розглядається, мають такий вигляд:

$$\pm\varphi_0(\pm a) \mp \frac{1}{e} \left[\mu_n^0(T_0) + \delta\mu_n(\pm a) - \mu_m\right] \pm \frac{\Delta\epsilon_c}{e} = 0, \qquad \varphi(\pm a) = 0. \quad (2.86)$$

Визначаючи за допомогою (2.86) константи інтегрування $C_{1,2,3}$, остаточно отримаємо:

$$\varphi(x) = \varphi_0 \left[1 - \frac{\operatorname{ch}(x/l)}{\operatorname{ch}(a/l)} \right], \qquad \delta\mu_n(x) = -e\varphi_0 \frac{\operatorname{ch}(x/l)}{\operatorname{ch}(a/l)}. \tag{2.87}$$

Розподіл електричного потенціалу в даній структурі наведено на рис. 2.9, а її зонная діаграма — на рис. 2.10.

З виразів (2.87) випливає, що якщо $l \to 0$, то $\varphi(x)$ прагне до постійного значення φ_0 у всьому інтервалі [-a, a], і до нуля поза цим інтервалом, як це і було представлено на рис. 2.6. У цьому граничному випадку координатна залежність $\varphi(x)$ може бути асимптотично апроксимована у вигляді ступінчастої функції з розривом величиною φ_0 в площині контакту металнапівпровідник. В електричних термінах це означає, що в умовах квазінейтральності, якщо радіус Дебая дуже малий (тобто при розгляді високолегованих напівпровідників), об'ємний заряд, що поширюється на довжину, яку можна порівняти з довжиною екранування в напівпровіднику, може бути замінений ефективним поверхневим зарядом (функцією примежового шару [278]), який підтримує розрив електричного потенціалу. Тому саме в цих



Рисунок 2.9 — Електричний потенціал в структурі "метал-напівпровідникметал"

умовах можна відмовитися від рішення рівняння Пуассона. Дійсно, єдиним невідомим в $\varphi(x)$ є величина розриву електричного потенціалу φ_0 на межах зразка. Оскільки величина, φ_0 не може бути визначена з рівняння Пуассона, воно може бути опущено з розгляду без втрати фізичної інформації. Більш того, в граничному випадку $l \to 0$, в рамках наближення квазінейтральності, рівняння Пуассона має бути виключено з системи рівнянь. При цьому, значення φ_0 можна знайти, скориставшись фактом сталості електрохімічного потенціал у всій структурі.

Слід підкреслити, що крім того факту, що концепція квазінейтральності серйозно полегшує теоретичне вивчення транспортних процесів в плазмі, квазінейтральність є основою функціонування багатьох пристроїв твердотільної електроніки. Так, в біполярних транзисторах перенесення заряду вимагає квазінейтрального характеру пакета [279, 280]. Дійсно, як відомо, радіус Дебая і (максвеловский) час діелектричної релаксації тісно пов'язані. При зменшенні дебаєвської довжини час релаксації основних носіїв також скорочується, покращуючи динамічний відгук підсистеми цих носіїв. Звичайно, якщо в напівпровіднику є значна густина захоплених носіїв, це буде



Рисунок 2.10 — Зонна діаграма структури "метал-напівпровідник-метал" за відсутності квазінейтральності. Термодинамічна рівновага

погіршувати динамічні параметри пристрою, оскільки захоплені носії можуть переміщатися тільки після релаксації захопленого заряду. Тому для високочастотних напівпровідникових пристроїв необхідно забезпечити виконання умови $\delta n_t \ll \delta n, \delta p$.

Розглянуті процеси мають важливе значення і для вивчення та моделювання перенесення заряду в режимах струмів, обмежених просторовим зарядом (СОПЗ) [281], в нових матеріалах, таких як AlGaN/GaN [282] і органічних напівпровідниках [283].

Протилежний граничний випадок виникає в низьковимірних системах, коли хоча б один характерний розмір (в даному випадку *a*) дуже малий, а активна область виконана з низьким ступенем легування для запобігання деградації рухливості. Така ситуація має місце в сучасних напівпровідникових приладах, наприклад, в польових транзисторах з високою рухливістю електронів (HEMT, MODFET). У цих умовах ситуація в точності протилежна попередньому випадку: $\Delta \mu_n(x) \to e\varphi_0$, $\delta n(x) \to (n_0/k_BT_0)e\varphi_0$, і навпаки, $\varphi(x) \to 0$. Останній результат примітний тим, що означає незмінність відносного положення зонної структури тонкоплівкового гетеропереходу (крім положення рівня Фермі) в порівнянні з масивним напівпровідником. Також важливо відзначити, що для тонких напівпровідникових плівок втрачає сенс поняття контактної різниці потенціалів (див. рис. 2.9). Згідно з (2.87), тільки при виконанні умов квазінейтральності $l \ll a$ можливе введення строго зазначеного параметра — контактної різниці потенціалів — як фізичної характеристики пари контактуючих матеріалів.

2.4 Висновки до Розділу 2

- Запропонована загальна система ГУ є придатною для дослідження стаціонарних транспортних процесів в довільних структурах напівпровідників і металів в різних поєднаннях в рамках дифузійно-дрейфової моделі. Оскільки дані ГУ отримані, виходячи з перших принципів і спираючись на основні фізичні особливості транспорту носіїв заряду, наведені ГУ можуть бути корисними і при інших методах теоретичного вивчення транспорту носіїв, наприклад, при моделюванні фізичних приладів методом Монте-Карло.
- Отримані ГУ можуть бути використані як в наближенні квазінейтральності, так і для дослідження напівпровідникових структур з характерними розмірами менше довжини екранування Дебая, причому перехід до наближення квазінейтральності не вимагає будь-яких додаткових припущень.
- 3. Запропоновані ГУ дозволяють коректно враховувати процеси генерації і рекомбінації різної природи в площині контакту двох напівпровідників, а також контакту напівпровідника з металом. Дані ГУ природним чином враховують анізотропію функції розподілу носіїв струму в примежовому шарі і залишаються коректними при довільній величині електричного струму, що протікає через контакт. Звісно, поза рамками лінійного наближення поверхневі характеристики контакту стають

функціями струму, що протікає, але ГУ залишаються вірними і враховують наявність струму в контакті і в металі. Завдяки цьому, отримана система ГУ може бути використана для моделювання твердотільних електронних приладів при різних способах їх включення, граничний перехід від випадку розімкнутого кола до випадку замкнутого кола виконується природним чином за допомогою єдиного параметра — опору зовнішнього кола.

4. Викладений вище розгляд особливостей застосування наближення квазінейтральності в різних фізичних ситуаціях доводить, що в загальному випадку умова квазінейтральності в біполярному напівпровіднику в формулюванні δn = δp, яка широко використовується, є некоректною і може призводити до помилки при розрахунку ВАХ напівпровідникового приладу. Рівність концентрацій нерівноважних електронів і дірок при квазінейтральності має місце тільки у власному напівпровіднику, або в ситуаціях, коли *а priori* забезпечена незмінність заселеності домішкових рівнів.

РОЗДІЛ 3

ГЕНЕРАЦІЙНО-РЕКОМБІНАЦІЙНІ ПРОЦЕСИ В БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ ПЛАЗМОПОДІБНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

3.1 Основні проблеми

У багатокомпонентному плазмоподібному середовищі підсистеми (квазі)частинок, взагалі кажучи, не є незалежними і ізольованими. Так в біполярному напівпровіднику концентрація електронів провідності і дірок може змінюватися не тільки за рахунок дифузії і дрейфу зарядів, але і завдяки переходам електронів між валентною зоною і зоною провідності. В силу цього важливою частиною дифузійно-дрейфового наближення транспортних процесів є модель генерації і рекомбінації носіїв струму. Концентрація останніх може бути знайдена рішенням системи рівнянь безперервності парціальних струмів (2.7), яка для біполярного напівпровідника може бути конкретизована наступним чином [41, 90, 150]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g_n + \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n - R_n, \qquad (3.1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g_p - \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_p - R_p, \qquad (3.2)$$

де $g_{n,p}$ - темп зовнішньої генерації, $R_{n,p}$ - темп рекомбінації носіїв. У свою чергу, темп рекомбінації $R_{n,p} = r_{n,p} - g_{Tn,Tp}$ визначається різницею темпів двох конкуруючих процесів: захопленням носіїв $r_{n,p}$ і їх тепловою генерацією $g_{Tn,Tp}$.

Система рівнянь безперервності в загальному випадку є неповної і повинна бути доповнена рівнянням Пуассона, яке для ізотропного напівпровідника с діелектричної проникністю є може бути елементарно отримано з (2.2):

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = \frac{4\pi}{\epsilon}\rho. \tag{3.3}$$

Для застосування системи рівнянь (3.1)-(3.3) необхідно конкретизувати залежність парціальних струмів, густини об'ємного заряду і темпів рекомбінації від концентрації нерівноважних носіїв.

Слід зазначити, що, на жаль, в літературі, що присвячена дослідженню стаціонарних транспортних процесів в напівпровідникових приладах в режимах, де можлива поява нерівноважних носіїв струму, нерідко зустрічаються некоректності і навіть прямі помилки. Це обумовлено тим, що рекомбінація (члени $R_{n,p}$ в рівняннях (3.1)) часто описується фізично неадекватними виразами. Типовим прикладом є наступний вираз для темпу рекомбінації [74, 83, 89, 105, 284–286]:

$$R_n = \frac{\delta n}{\tau_n}, \qquad R_p = \frac{\delta p}{\tau_p},$$
(3.4)

де $\tau_{n,p}$ - час життя нерівноважних носіїв [83, 89, 105]. Для малої концентрації нерівноважних носіїв $\delta v \ll n_0$, $\delta p \ll p_0$ величини $\tau_{n,p}$ є константами параметрами напівпровідника, що розглядається.

Віднімаючи (3.2) з (3.1), отримаємо:

$$e(g_n - g_p) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p) - e(R_n - R_p) = e\frac{\partial}{\partial t} (n - p).$$
(3.5)

У той же час, з рівнянь Максвела (2.2)-(2.3) для напівпровідника, що містить об'ємний заряд ρ , який виражається через концентрації носіїв струму n і p, а також концентрацію нерухомих зарядів на домішкових рівнях (заряд кристалічної решітки) n_t як $\rho = e(p-n-n_t)$, безпосередньо випливає умова:

$$\operatorname{div}\mathbf{j} = e\frac{\partial}{\partial t}\left(n - p + n_t\right). \tag{3.6}$$

Порівнюючи (3.5)-(3.6), отримаємо вираз

$$g_n - g_p = R_n - R_p - \frac{\partial n_t}{\partial t}.$$
(3.7)

Підстановка темпів рекомбінації, заданих у вигляді (3.4) в (3.6) призводить до результату, що не має фізичного пояснення:

$$\frac{\delta n}{\tau_n} - \frac{\delta p}{\tau_p} - \frac{\partial n_t}{\partial t} = g_n - g_p. \tag{3.8}$$

Рівняння (3.8) не звертається до тотожності, замість цього ми отримуємо ще один функціональний зв'язок між концентраціями нерівноважних носіїв δn і δp , в результаті чого система транспортних рівнянь (3.1)-(3.3) виявляється переозначеною. Це стає очевидним у разі міжзонної рекомбінації в сталому режимі, коли концентрації носіїв і електричне поле не залежать від часу. У цьому випадку маємо чотири рівняння: (3.1), (3.2), (3.3) і (3.7) (в останньому $\partial n_t / \partial t \equiv 0$ для трьох невідомих n, p і **E**. Як буде показано нижче, ця ж проблема має місце і при рекомбінації через домішкові рівні, тобто є спільною проблемою опису рекомбінації за допомогою (3.4), що доводить фізичну некоректність останнього.

Цікаво відзначити, що як випливає з (3.7), темпи рекомбінації R_n і R_p залежать не тільки від концентрації нерівноважних носіїв, а й від темпів їх зовнішньої генерації.

Оскільки в статичному режимі за відсутності зовнішньої генерації повинна виконуватися умова безперервності повного струму div $\mathbf{j} = 0$, з (3.8) виникає додаткова умова $\delta n/\tau_n = \delta p/\tau_p$, яка незрозуміло що описує і з фізичної точки зору ні на чому не грунтується. Ряд авторів (див., наприклад, монографію [83]) використовують цю умову для зменшення числа змінних, що не може бути визнано фізично обгрунтованим прийомом.

Зустрічається також підхід, коли ця умова розглядається як умова, що зв'язує часи життя носіїв [89]. Дане припущення, крім нефізічності, є малоконструктивним, тому що часи життя носіїв є вже не параметрами напівпровідника, а функціями концентрації нерівноважних носіїв, які, в свою чергу, підлягають визначенню, що приводить до появи істотних математичних труднощів. Вельми поширений інший підхід [73, 83, 90, 105, 107, 287, 288], при якому вважають:

$$R_n = R_p = \frac{\delta p}{\tau_p},\tag{3.9}$$

де під δp и τ_p розуміються відповідно концентрація нерівноважних неосновних носіїв і їх час життя. У цьому випадку умова безперервності повного струму виконується тотожно, однак має місце інше серйозне протиріччя. Воно стає особливо явним, якщо розглянути випадок, коли відбувається інжекція основних носіїв. Дійсно, з фізичних міркувань очевидно, що інжектовані нерівноважні основні носії рекомбінують. У той же час, з формальної точки зору, оскільки нерівноважні неосновні носії не з'являються ($\delta p = 0$), темп рекомбінації дорівнює нулю.

Проблема різко ускладнюється, якщо температура в зразку є неоднорідною, тобто залежить від координати. При цьому стає незрозумілим, від якого значення відраховується концентрація нерівноважних носіїв, тобто що розуміти під величинами n_0 і p_0 . Вихід зі становища був запропонований в роботі [133], однак, даний метод є досить штучним і може бути застосований тільки в разі відомого (фіксованого) температурного поля.

Ще одна проблема пов'язана з формою запису нерівноважного об'ємного заряду в рівнянні Пуассона (3.3). Найчастіше використовуються вирази, які придатні для окремих приватних випадків, без уточнення межі їх застосування, або виписуються вірні вихідні вирази, а потім робляться нічим не обгрунтовані і неконтрольовані наближення. Прикладом такого роду може служити широко розповсюджене твердження про рівність нерівноважної концентрації електронів і дірок в кожній точці зразка при міжзонній рекомбінації [83].

На цей час в літературі досі відсутній повний і послідовний опис з загальних позицій всього кола явищ, пов'язаних з процесами генерації і рекомбінації в біполярному напівпровіднику, що і є джерелом зазначених помилок і неточностей.

В силу вищевикладеного є доцільним в рамках найпростіших моделей послідовно описати процедуру знаходження неоднорідних концентрацій рівноважних і нерівноважних носіїв. Необхідно відразу підкреслити, що багато висновків (але не всі), що наведено нижче, можна знайти в монографіях, оглядах і статтях. Однак, коректне врахування одного фактора в цих роботах супроводжується зневагою інших факторів, що мають вплив на досліджуваний ефект такого ж порядку. Тому проведення систематизації, верифікації і встановлення меж придатності цих висновків є актуальним завданням. Докладний опис, теорії генераційно-рекомбінаційних процесів в біполярних напівпровідниках, що викладається нижче, можна знайти в роботах [3, 6, 9, 26].

3.2 Час життя нерівноважного носія в біполярному напівпровіднику

3.2.1 Рекомбінація і термодинамічна рівновага

Побудова повністю самоузгодженої загальної схеми рішення задач транспорту струму зручно почати з розгляду найпростішої ситуації — стану термодинамічної рівноваги. Тут і далі з метою уникнути математичних труднощів ми обмежимося лінійним аналізом.

Спочатку нехай є довільний однорідний напівпровідник, в якому концентрації електронів і дірок відповідно дорівнюють n_0 і p_0 . Оскільки в загальному випадку $n_0 \neq p_0$, в напівпровіднику є також пов'язаний заряд електронів з концентрацією n_t^0 на іонізованих домішкових центрах (пов'язаний заряд кристалічної решітки). Концентрація n_t^0 може бути негативною (наприклад, в разі донорної домішки). Сумарна концентрація домішкових центрів дорівнює N_t . Зразок є нейтральним в кожній точці ($n_0 + n_t^0 - p_0 = 0$),
отже відсутнє вбудоване електричне поле. У стані термодинамічної рівноваги температура зразка є однорідною: $T_0 = \text{const.}$ Рівні хімічних потенціалів електронів μ_n^0 і дірок μ_p^0 не залежать від координати ($\mu_{n,p}^0 = \text{const.}$) і збігаються один з одним ($\mu_n^0 = -\epsilon_g - \mu_p^0$), тобто, як і повинно слідувати за умови термодинамічної рівноваги, рівень електрохімічного потенціалу системи є постійним в просторі і єдиним для всіх підсистем носіїв струму (рис. 3.1).



Рисунок 3.1 — Зонна діаграма біполярного напівпровідника в термодинамічній рівновазі. Умовні позначення: μ - рівень Фермі, ε_0 - рівень вакуума, ε_c - дно зони провідності, ε_v - потолок валентної зони, ε_t - домішковий рівень, ε_g - ширина забороненої зони, $\mu_{n,p}^0$ - хімічний потенціал, χ_s - робота виходу, χ_0 - спорідненість з електроном

Ситуацію в неоднорідному напівпровіднику можна описати виходячи з викладеного вище вихідного стану однорідного напівпровідника. Для визначеності, припустимо, що неоднорідність створена за рахунок неоднорідного легування: $N_t(x) = N_t^0 + \delta N_t(x)$. Подумки розіб'ємо зразок на тонкі шари, ізольовані один від другого (так, що перетікання носіїв неможливо). Після термічної іонізації введених домішок в кожному такому шарі встановляться "рівноважні" концентрації носіїв, які мали б місце в масивному однорідному напівпровіднику з тим же значенням концентрації домішки у всьому об'ємі зразка. Ці концентрації позначимо:

$$n^{0}(x) = n_{0} + \delta n(x), \qquad p^{0}(x) = p_{0} + \delta p(x).$$
 (3.10)

Відповідні до концентрацій (3.10) хімпотенціали дорівнюють:

$$\mu_{n,p}^0(x) = \mu_{n,p}^0 + \delta \mu_{n,p}(x).$$
(3.11)

Оскільки в кожному шарі електрони і дірки знаходяться в рівновазі один з одним, їх рівні хімпотенціалів (3.11) збігаються: $\mu_n^0(x) = -\epsilon_g - \mu_p^0(x)$ (див. рис. 3.1). Однак, хімпотенціали вже неоднорідні в просторі, тобто $\nabla \mu_{n,p} \neq 0$ — термодинамічна рівновага між шарами відсутня. Проте, оскільки перетікання носіїв ще не відбулося, об'ємний заряд в напівпровіднику відсутній.

Якщо тепер "з'єднати" шари, що розглядаються, то станеться перетікання носіїв, що супроводжується виникненням вбудованого електричного поля і вирівнюванням електрохімічного потенціалу електронів і дірок. Стан термодинамічної рівноваги розглянутої неоднорідної системи буде характеризуватися новим розподілом носіїв: $n(x) = n^0(x) + \delta n_1(x), p(x) = p^0(x) + \delta p_1(x)$ і в напівпровіднику виникне вбудоване електричне поле з потенціалом $\varphi(x)$.

Рівні хімічного потенціалу електронів і дірок зміняться:

$$\mu_n = \mu_n^0(x) + \delta \mu'_n(x), \qquad \mu_p = \mu_p^0(x) + \delta \mu'_p(x), \qquad (3.12)$$

але як і раніше будуть задовольняти співвідношенню $\mu_n(x) = -\epsilon_g - \mu_p(x)$. Цей рівень не буде постійний в просторі, в той час як градієнт електрохімічного потенціалу дорівнює нулю $\nabla \psi_{n,p} = 0$ ($\psi_{n,p} = \mu_{n,p} \mp e\varphi(x)$).

Відзначимо, що насправді перехідний процес встановлення рівноваги, взагалі кажучи, відрізняється від викладеної вище схеми, оскільки час встановлення рівноваги в кожному шарі (яке порядку часу життя нерівноважних носіїв в даному напівпровіднику) значно перевищує максвелівский час, за який відбувається перетікання носіїв. Таким чином, перетікання носіїв адіабатично відстежує їх теплову генерацію (яка в даному випадку і є джерелом нерівноважних носіїв в період до встановлення термодинамічної рівноваги у всьому об'ємі напівпровідника), тобто ці процеси протікають одночасно і фізично виділити дві стадії перехідного процесу неможливо.

У тому випадку, коли неоднорідність створюється приведенням досить тонкого напівпровідника в контакт з іншим матеріалом, первинним стає перетікання носіїв під дією різниці термодинамічних робіт виходу контактуючих речовин. Процес формування єдиного рівня електрохімічного потенціалу починається лише на наступному етапі. Проте, викладена (штучна, уявна) процедура розбиття перехідного процесу на декілька стадій, що мають на увазі наявність рівноваги на кожній з них по відношенню до якогось одного фактору, є досить продуктивною, дозволяючи як вирішувати деякі проблеми аналізу транспортних процесів [133, 289], так і краще зрозуміти особливості формування рівноважного стану (наприклад, зміну повного числа носіїв в структурі з гетеропереходами [290]).

З фізичної точки зору єдність (але, в загальному разі, не сталість) хімічного потенціалу носіїв ($\mu_n = -\epsilon_g - \mu_p$) означає рівність швидкостей процесу захоплення носіїв домішковими центрами (або міжзонної рекомбінації) і їх термічної генерації, тобто рівність нулю швидкості рекомбінації в зразку, яка залежить від концентрації всіх сортів частинок, що беруть участь в акті рекомбінації.

Таким чином, в стані рівноваги

$$R_n(n, p, n_t) = 0, (3.13)$$

$$R_p(n, p, n_t) = 0. (3.14)$$

Третім рівнянням, що доповнює систему рівнянь (3.13)-3.14), є умова балансу частинок на домішкових рівнях. У статичному випадку ця умова має такий вигляд:

$$R_n(n, p, n_t) = R_p(n, p, n_t).$$
(3.15)

Звертає на себе увагу той факт, що рівняння (3.15), сформульоване на основі розгляду балансу частинок на домішковому рівні, одночасно забезпечує тотожне виконання вимоги, що випливає з рівнянь Максвела, до будь-якого статичного струмоперенесення div $\mathbf{j} = 0$.

Як неважко помітити, в стані термодинамічної рівноваги рівняння (3.13)-(3.15) не є лінійно незалежними, однак замість одного з них маємо умову рівності нулю парціальних струмів носіїв: $\mathbf{j}_n = \mathbf{j}_p = 0$. Необхідно підкреслити, що останнє рівняння є ні що інше, як переформульована в термінах парціальних струмів умова сталості електрохімічного потенціалу.

Четвертим рівнянням, що замикає розглянуту систему рівнянь з чотирма невідомими, є рівняння Пуассона (3.3).

Саме наведена система рівнянь є найбільш загальним математичним формулюванням задачі про термодинамічну рівновагу неоднорідного напівпровідника.

З неї цілком очевидним є перехід до випадку однорідного напівпровідника. Дійсно, якщо зразок однорідний, то електричне поле і об'ємний заряд відсутні ($\mathbf{E} = 0, \rho = 0$), рівняння Пуассона виконується тотожно, і система рівнянь складається тільки з трьох рівнянь з трьома невідомими n, p, n_t , тобто даний граничний перехід, як і раніше, приводить до коректної математичної постановці задачі.

Якщо ж і концентрація зарядів на домішкових рівнях (n_t) відома (задана), то відбувається подальше скорочення числа незалежних змінних і рівнянь до двох. Самоузгодженість такого переходу зумовлена тим, що при коректно заданої концентрації зарядів на домішкових рівнях, умова $R_n(n, p, n_t) =$ $R_p(n, p, n_t)$ виконується тотожно, принаймні для рівноважних (шуканих) концентрацій носіїв і перевизначення системи рівнянь не відбувається.

Нарешті, дослідимо описуваний підхід в часто використовуваному наближенні квазінейтральності [82, 259, 267]. Для цього слід припустити, що характерні параметри завдання (а в даному випадку це розмір зразка) набагато перевищують радіус екранування Дебая *l* основних носіїв. В цьому випадку можна покласти $\delta \rho = 0$ і рівняння Пуассона стає зайвим. Якщо ж, як зазначалося вище, використовувати припущення, що широко застосовується, про незмінність концентрації зарядів на домішкових рівнях (в наступному підрозділі будуть приведені відповідні критерії справедливості такого наближення), то умова квазінейтральності зводиться до $\delta n = \delta p$. З іншого боку, єдність рівня хімпотенціала (тобто відсутність рекомбінації) вимагає $\delta \mu_n = -\delta \mu_p$. Для невиродженого напівпровідника в термінах концентрації носіїв струму це еквівалентно виконанню умови $\delta p = -(p_0/n_0)\delta n$. Останне означає, що в монополярному напівпровіднику (наприклад, в електронному, де $n_0 \gg p_0$) об'ємним зарядом неосновних носіїв можна знехтувати. Але в силу умови квазінейтральності, це означає, що і основні носії не створюють об'ємний заряд: $\delta n = 0$. Аналогічно, для власного напівпровідника спільність умов квазінейтральності і єдності рівня хімпотенціала можливо тільки при $\delta n = \delta p = 0$. Іншими словами, для будь-якого напівпровідника квазінейтральність в рівновазі означає незмінність концентрації носіїв при будь-якому впливі ззовні, що залишає систему в рівноважному стані (наприклад, поляризація у зовнішньому електричному полі або створення контакту). Дійсно, зовнішній вплив, що не викликає появи струму і не міняє концентрацію заряджених домішок, буде екрануватися на довжині близько радіусу Дебая, тобто в силу умови $L \gg l$ — поверхневими зарядами.

3.2.2 Малі відхилення від термодинамічної рівноваги: лінійна теорія

Перейдемо до розгляду ситуації, коли має місце протікання струму при наявності в напівпровіднику нерівноважних носіїв. Покладемо, що протікання електричного струму не супроводжується розігрівом зразка, тобто температура постійна в кожній точці напівпровідника і дорівнює своєму рівноважному значенню T_0 . Спочатку проаналізуємо випадок, коли в об'ємі напівпровідника нерівноважність не є генераційною (тобто не викликана зовнішньою об'ємною генерацією нерівноважних носіїв, наприклад, світлом). При цьому може мати місце поверхнева генерація або інжекція носіїв, які повинні бути враховані відповідними складовими в ГУ.

Подальший аналіз буде обмежений тільки випадком статичного перенесення заряду (концентрація нерівноважних носіїв не залежить від часу), тому що саме в цьому режимі найбільш яскраво проявляються протиріччя традиційного опису кінетичних ефектів. Задля уникнення математичних труднощів розгляд буде проведено в лінійному наближенні, хоча викладений нижче підхід справедливий і в загальному нелінійному випадку. Зокрема, він може бути використаний для побудови коректної моделі нелінійного перенесення заряду при комп'ютерному моделюванні.

У нижченаведених виразах символом " δ ..." позначаються відхилення відповідних величин від їх рівноважних значень (що позначаються індексом "0").

Як зазначалося вище, ситуація, що розглядається, описується наступ-

ною системою рівнянь:

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_n = eR_n(n, p, \mathbf{n_t}), \tag{3.16}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_p = -eR_p(n, p, \mathbf{n_t}), \qquad (3.17)$$

$$R_n(n, p, \mathbf{n_t}) = R_p(n, p, \mathbf{n_t}), \qquad (3.18)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho(n, p, \mathbf{n_t}). \tag{3.19}$$

В системі рівнянь (3.16)-(3.19) вектором \mathbf{n}_t позначений ансамбль домішкових рівнів. При наявності тільки одного домішкового рівня під \mathbf{n}_t слід розуміти скалярну величину n_t - концентрацію електронів на цьому домішковому рівні. При наявності безлічі дискретних домішкових рівнів під (3.18) слід розуміти систему подібних рівнянь для кожного домішкового рівня. Нарешті, при наявності в напівпровіднику домішкової енергетичної зони в якості (3.18) може виступати відповідне інтегральне рівняння. У разі розглянутого далі єдиного домішкового рівня система рівнянь (3.16)-(3.19) складається з чотирьох рівнянь і є повною, тому що для чотирьох невідомих n, p, n_t і φ маємо чотири незалежні рівняння.

Необхідно підкреслити дві обставини. По-перше, в (3.19) об'ємний заряд ρ в загальному випадку являє собою функцію не тільки концентрації носіїв n, p, але і концентрації домішкових зарядів n_t , яка може змінюватися при протіканні струму. По-друге, ще раз звернемо увагу на те, що вираз (3.18) є рівнянням для концентрації електронів на домішковому рівні n_t . Виключення n_t з системи рівнянь (3.16)-(3.19) перетворює рівняння (3.18) в тотожність, що забезпечує дотримання безперервності заряду div $\mathbf{j} = 0$.

Визначимо роль нерівноважного заряду захоплених носіїв в формуванні нерівноважного об'ємного заряду і критерії зневаги величиною n_t . Для цього виключимо останню з рівнянь (3.16)-(3.19), вибравши в якості механізму рекомбінації модель Шоклі-Ріда-Холла [97, 100]. Відповідно до останньої, швидкість захоплення електронів домішковим рівнем і зворотного йому процесу — термічної генерації — становлять

$$r_n = \varrho_n n (N_t - n_t), \qquad (3.20)$$

$$g_{nT} = \varrho_n n_1 n_t, \tag{3.21}$$

$$R_n = r_n - g_{nT}, (3.22)$$

де N_t - повна концентрація домішкових станів (щоб уникнути непорозумінь, слід нагадати, що в даній моделі n_t - концентрація заповнених домішкових станів), $n_1 \equiv \nu_{n0} \exp\left(-\mathcal{I}/k_B T_0\right)$ - параметр, що характеризує домішковий рівень, $\nu_{n0} = \frac{1}{4} \left(2m_n k_B T_0/\pi \hbar^2\right)^{3/2}$ - ефективна густина станів в зоні провідності, m_n - ефективна маса електрона провідності, $\mathcal{I} \equiv \varepsilon_c - \varepsilon_t$ - енергія іонізації домішкового рівня з енергією ε_t , ε_c - енергія дна зони провідності напівпровідника. Параметр n_1 являє собою концентрацію електронів в зоні провідності, яка мала б місце, якби рівень хімічного потенціалу збігався з домішковим рівнем.

Аналогічно для дірок:

$$r_p = \varrho_p n_t p, \tag{3.23}$$

$$g_{pT} = \varrho_p p_1 (N_t - n_t), \qquad (3.24)$$

$$R_p = r_p - g_{pT},\tag{3.25}$$

де характеристика домішкового рівня p_1 визначена наступним чином: $p_1 \equiv \nu_{p0} \exp\left((\mathcal{I} - \varepsilon_g)/k_B T_0\right), \nu_{p0} = \frac{1}{4} \left(2m_p k_B T_0/\pi \hbar^2\right)^{3/2}$ - ефективна густина станів на стелі валентної зони, m_p - ефективна маса дірки.

Виключивши за допомогою (3.18) n_t , отримаємо наступні відомі вирази для концентрації пов'язаного заряду і темпу рекомбінації через домішковий рівень в моделі Шоклі-Ріда-Хола [83, 97, 100]:

$$n_t = \frac{\tau_{n0} p_1 + \tau_{p0} n}{\tau_{n0} (p + p_1) + \tau_{p0} (n + n_1)} N_t, \qquad (3.26)$$

$$R_n = R_p = \frac{np - n_i^2}{\tau_{n0}(p + p_1) + \tau_{p0}(n + n_1)},$$
(3.27)

де n_i - концентрація носіїв у власному напівпровіднику, і введені параметри:

$$\tau_{n0} = \frac{1}{\varrho_n N_t}, \quad \tau_{p0} = \frac{1}{\varrho_p N_t}.$$
(3.28)

Необхідно відзначити, що введені згідно з (3.28) параметри, хоча і мають розмірність часу, не є часом життя нерівноважних електронів і дірок в стаціонарних умовах у строгому значенні. Детальніше це питання обговорюється нижче.

При малому відхиленні від стану термодинамічної рівноваги, в лінійному наближенні, в термінах концентрацій нерівноважних носіїв струму з (3.18) і (3.20)-3.25) неважко отримати вираз для концентрації заряджених домішкових станів:

$$\delta n_t = A_n \delta n - A_p \delta p, \qquad (3.29)$$

де

$$A_n = \frac{\varrho_n n_1 N_t}{(n_0 + n_1) \left[\varrho_n (n_0 + n_1) + \varrho_p (p_0 + p_1)\right]},$$
(3.30)

$$A_p = \frac{\varrho_p n_0 N_t}{(n_0 + n_1) \left[\varrho_n (n_0 + n_1) + \varrho_p (p_0 + p_1)\right]}.$$
(3.31)

Тоді в стаціонарних умовах, як це і вимагають рівняння Максвела, має місце єдиний темп рекомбінації електронів і дірок:

$$R_n = R_p = R = \frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p}, \qquad (3.32)$$

де введені параметры

$$\tau_n = \frac{p_0 + p_1}{p_0} \tau_{n0} + \frac{n_0 + n_1}{p_0} \tau_{p0}, \qquad (3.33)$$

$$\tau_p = \frac{p_0 + p_1}{n_0} \tau_{n0} + \frac{n_0 + n_1}{n_0} \tau_{p0}.$$
(3.34)

Як і $\tau_{n0,p0}$, визначені в (3.33)-(3.34) параметри напівпровідника, хоча і мають розмірність часу, так само не є часом життя нерівноважних носіїв в біполярному напівпровіднику в стаціонарних умовах. У разі міжзонної рекомбінації її темп визначається виключно концентрацією електронів і дірок і не залежить від підсистеми домішкових станів (які, взагалі кажучи, завжди мають місце бути, якщо тільки розглянутий напівпровідник не є власним напівпровідником високого ступеня очищення):

$$R = \varrho_{ib}(np - n_i^2), \qquad (3.35)$$

де параметр ρ_{ib} характеризує перетин розсіювання міжзонної рекомбінації.

Неважко переконатися, що в лінійному наближенні міжзонна рекомбінація також описується виразом (3.32), якщо під $\tau_{n,p}$ розуміти:

$$\tau_n = \frac{1}{\varrho_{ib}p_0}, \qquad \tau_p = \frac{1}{\varrho_{ib}n_0}.$$
(3.36)

Необхідно відзначити, що і для міжзонної рекомбінації, і для рекомбінації через домішкові рівні в стаціонарному випадку завжди виконується наступне співвідношення між параметрами $\tau_{n,p}$:

$$\frac{\tau_n}{\tau_p} = \frac{n_0}{p_0}.\tag{3.37}$$

Саме виконання рівності (3.37) забезпечує тотожне виконання умови безперервності повного електричного струму і коректність використання виразу (3.32) для вивчення лінійних (по концентрації нерівноважних носіїв струму) процесів перенесення в біполярних напівпровідниках (і аналогічних багатокомпонентних плазмоподібних середовищах) в стаціонарному випадку в дифузійно-дрейфовій моделі.

Важливо відзначити, що величини $\tau_{n,p}$, навіть в лінійному наближенні, не є в строгому значенні часом життя нерівноважних носіїв струму. Більш того, в біполярному напівпровіднику в стаціонарних умовах, навіть при малому відхиленні від стану термодинамічної рівноваги, в загальному випадку неможливо ввести фізично коректне поняття часу життя нерівноважних носіїв струму. Дійсно, як випливає з (3.32), темп рекомбінації ні електронів, ні дірок не може бути виражений у вигляді експоненціально затухаючої функціональної залежності від нерівноважної концентрації носія струму одного типу з постійним параметром (який і можна було б назвати часом життя цього типу нерівноважних носіїв струму).

Виняток становить наближення квазінейтральності [259, 267]. В цьому випадку для міжзонної рекомбінації або при відсутності нерівноважного домішкового заряду концентрації нерівноважних електронів і дірок дорівнюють одна одній: $\delta n = \delta p$, тому стає можливим ввести єдиний час життя нерівноважних електронів і дірок $\tau^{-1} = \tau_n^{-1} + \tau_p^{-1}$. З фізичної точки зору це пояснюється тим, що в умовах квазінейтральності перенесення заряду здійснюється не електронами і дірками незалежно, а електрон-дірковими парами (амбіполярна дифузія і дрейф). Тому в лінійному випадку рекомбінація може бути описана в термінах часу життя нерівноважної електрон-діркової пари. Зрозуміло, що в цьому випадку цей параметр є єдиним (однаковим і для електронної, і для діркової підсистеми).

Що стосується монополярного середовища, то як неважко помітити, в електронному напівпровіднику $\tau_n \gg \tau_p$, в дірковому $\tau_p \gg \tau_n$. Таким чином, в монополярному напівпроводнику, в ситуаціях, близьких до квазінейтральності ($\delta n \sim \delta p$) дійсно темп рекомбінації визначається характеристикою ("часом життя") неосновних носіїв. У власному і компенсованому напівпровіднику параметри τ_n і τ_p рівні (однак, тільки в разі квазінейтральності вони представляють собою, відповідно за їхнім фізичним змістом, подвоєний час життя електрон-діркових пар). Якщо ж квазінейтральності немає, навіть у власному напівпровіднику $\delta n \neq \delta p$ і строго ввести параметр "час життя" нерівноважного носія струму в стаціонарних транспортних явищах не можна.

За відсутності квазінейтральності фізично обґрунтоване введення часів життя нерівноважних носіїв і застосування широко використовуваного вира-

зу (3.9) можливо тільки тоді, коли виконується умова $(\delta n/\delta p) \ll (\tau_n/\tau_p) = (n_0/p_0)$ (як зазначалося вище, тут під *n* розуміється концентрація основних носіїв). Ця умова, очевидно, не виконуються *a priori*.

Мала концентрація домішкових рівнів, тобто домінування міжзонної рекомбінації, всупереч припущенню, що приймається неявно і широко поширено в літературі [90, 105, 107, 291, 292], не є достатньою умовою для рівності нерівноважних концентрацій електронів і дірок $\delta n = \delta p$. Таке припущення є бездоказовим і за наявністю інжекції порушується очевидним чином. Більш того, як видно з (3.1)-(3.2), наявність доданків div $\mathbf{j}_{n,p}$ в загальному випадку унеможливлює виконання рівності $\delta n = \delta p$ при міжзонній рекомбінації.

Таким чином, в загальному випадку транспортних процесів, що не залежать від часу, в біполярної плазмоподібному середовищі або неможливо взагалі ввести термін час життя нерівноважних носіїв, або час життя є однаковим для нерівноважних електронів і дірок.

Слід зазначити, що зазвичай в літературі стаціонарний транспорт розглядається або при наявності інжекції [288] (коли лінійне наближення не застосовується в силу великої концентрації носіїв, тому використовується точне визначення темпів рекомбінації у вигляді (3.35) або (3.27)), або в наближенні квазінейтральності. Мабуть цим пояснюється широке поширення в статтях, монографіях і навчальних посібниках внутрішньо суперечливих моделей рекомбінації. У той же час, при моделюванні сучасних приладах мікроелектроніки [293, 294], виконаних по тонкоплівкової технології, в яких легко порушуються умови квазінейтральності, реалізуються суттєві градієнти температури і енергетична неравновесность носіїв струму (їх розігрів прикладеним електричним полем), застосування спочатку некоректних моделей рекомбінації може привести до великої похибки або зовсім невірних результатів.

Розглянуті проблеми в опису об'ємної рекомбінації нерівноважних носіїв

в стаціонарних умовах в такій же мірі проявляються і при опису поверхневої рекомбінації. Тому, в повній аналогії з об'ємною рекомбінацією, коректний вираз для поверхневої рекомбінації може бути отримано з розгляду міжзонних переходів як всередині напівпровідника, так і між зонами різних напівпровідників (або між напівпровідником і металом в разі контакту напівпровідника з металом). Як і в випадку об'ємної рекомбінації, такий вираз для темпу поверхневої рекомбінації має гарантувати тотожну рівність темпів поверхневої рекомбінації електронів і дірок в стаціонарному випадку при довільних концентраціях нерівноважних носіїв на контакті. Взагалі кажучи, в лінійному наближенні, використовуючи для врахування поверхневої рекомбінації вирази типу (2.40)-(2.44), в яких темп рекомбінації в примежовому шарі (за яким здійснюється інтегрування) задається у вигляді (3.32), зазначені проблеми вирішуються автоматично. Однак послідовна реалізація цієї методики вимагає завдання функціональної залежності провідності (що має на контакті особливості), а отже, використання мікроскопічної теорії контакту, яка для довільного контакту на даний час відсутня. Тому більш продуктивним виявляється використання феноменологічних параметрів в ГУ, форма яких забезпечує вказаний вище тотожний збіг темпів рекомбінації носіїв в стаціонарній ситуації. Очевидно, що в загальному випадку в лінійному наближенні вказані умови задовольняє вираз такої форми:

$$S = s_n \delta n_s + s_p \delta p_s, \tag{3.38}$$

де S - темп поверхневої рекомбінації, δn_s і δp_s - відповідно концентрації нерівноважних електронів і дірок на контакті, $s_{n,p}$ - характеристики поверхневого рекомбінаційного процесу, що задаються феноменологічно або мусять бути знайдені з використанням мікроскопічної моделі контакту.

Важливо відзначити, що деякі автори раніше використовували подібні до (3.38) вирази для поверхневої рекомбінації на початковому етапі обчислень, згодом переходячи до традиційних (але невірних!) виразів типу $S_n = s_n \delta n_s, \ S_p = s_p \delta p_s.$ Характерним прикладом подібного розгляду, що демонструє описані вище проблеми, є наведене в [287] дослідження.

Повертаючись до аналізу впливу електричного струму і рекомбінації на стан підсистеми пов'язаних на домішкових рівнях зарядів, з виразів (3.30)-(3.31) неважко побачити, що в випадку електронного напівпровідника ($n_0 \gg p_0$) і високих температур (коли квазірівні Фермі і електронів, і дірок далекі від домішкового рівня, а отже, донорний рівень повністю іонізовано) виконується нерівність

$$1 \gg A_n \gg A_p$$
, тобто $\delta n_t \ll \delta n$. (3.39)

Аналогічно, для діркового напівпровідника $(p_0 \gg n_0)$ при високих температурах виконується нерівність

$$1 \gg A_p \gg A_n. \tag{3.40}$$

Отже, як і раніше, в цьому випадку концентрацією нерівноважних захоплених носіїв δn_t можна знехтувати.

Ситуація змінюється, якщо температури низькі, або в напівпровіднику є досить висока концентрація глибоких домішкових рівнів, розташованих поблизу середини забороненої зони, тобто поблизу рівня Фермі власного напівпровідника в рівновазі. В цьому випадку концентрація δn_t є порівнянною за порядком величини з концентрацією нерівноважних носіїв і повинна бути врахована в рівнянні Пуассона. Іншими словами, якщо квазірівні Фермі електронів і дірок при протіканні струму розташовуються достатньо далеко від домішкового рівня, система рівнянь (3.16)-(3.19) може бути спрощена за рахунок знехтування зміною концентрації зв'язаних зарядів:

$$\operatorname{div}\mathbf{j}_n = eR(\delta n, \delta p), \qquad (3.41)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{j}_p = -eR(\delta n, \delta p), \qquad (3.42)$$

$$\operatorname{div}\delta\mathbf{E} = 4\pi\rho(\delta n, \delta p). \tag{3.43}$$

Тепер і нерівноважний об'ємний заряд $\delta \rho$ (що створює електричне поле $\delta \mathbf{E}$), і темп рекомбінації залежать тільки від концентрації нерівноважних рухливих носіїв δn і δp . Рівняння для домішкового рівня (3.18), що представляє собою в даному випадку тотожність, природно, з системи рівнянь випадає.

Якщо в конкретній задачі параметри напівпровідника обрані таким чином, що ще виконується, наприклад, і співвідношення $\delta p \ll \delta n_t$, то в рівнянні Пуассона (3.43) в правій частині в густині заряду $\rho(n, p)$ необхідно опустити δp , щоб уникнути перевищення точності, тобто потрібно вважати $\rho = \rho(n)$.

Подальше спрощення системи рівнянь може бути здійснено, якщо виконуються умови квазінейтральності, тобто всі характерні параметри завдання істотно перевищують радіус Дебая (взагалі кажучи, особливо в нелінійному випадку, необхідна верифікація отриманих рішень, тому що характерні довжини задачі можуть бути функціями, наприклад, прикладеного поля, а значить, нерівноважних концентрацій, і в сильних полях можуть порівнюватися з радіусом Дебая).

У наближенні квазінейтральності $\delta \rho = 0$, в силу умов (3.39)-(3.40) концентрації нерівноважних електронів і дірок збігаються, $\delta n = \delta p$, рівняння Пуассона стає зайвим (воно може бути в подальшому використано для верифікації отриманого рішення: div $\delta \mathbf{E} \ll 4\pi (\delta p - \delta n)/\epsilon$), а перенесення заряду описується системою двох рівнянь для $\delta n = \delta p$ і φ :

$$\operatorname{div}\mathbf{j}_n = eR(n, p), \tag{3.44}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_p = -eR(n, p). \tag{3.45}$$

3.3 Кінетичні явища в умовах стаціонарної зовнішньої генерації нерівноважних носіїв

Як вже раніше зазначалося, запропонований вище розгляд може бути застосовано, тільки у відсутності зовнішної генерації носіїв струму (фотогенерації). Для її врахування необхідно послідовно повторити всі викладені вище міркування (стартуючи з рівнянь (3.1)), утримуючи складові $g_{n,p}$.

Віднімаючи (3.2)) з (3.1)), отримаємо:

$$e(g_n - g_p) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p) - e(R_n - R_p) = e \frac{\partial(n-p)}{\partial t}.$$
 (3.46)

Закон збереження електричного заряду [85] може бути представлений в наступному вигляді:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = \operatorname{div}(\mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p) = e \frac{\partial}{\partial t} \left(n - p + n_t \right).$$
(3.47)

У рівнянні (3.47) при виборі знака перед змінною n_t , що позначає концентрацію заряджених домішкових рівнів, для визначеності було прийнято, що домішкові центри мають негативний заряд (акцепторні домішки). Необхідно звернути увагу, що на відміну від концентрацій електронів і дірок, від'ємне значення концентрації домішкових рівнів n_t має фізичний сенс. Дійсно, в електронному напівпровіднику, при переважанні донорних домішок, $n_t < 0$.

Порівнюючи (3.46) і (3.47), отримуємо таку умову, що зв'язує між собою темпи генерації і рекомбінації носіїв струму в біполярному напівпровіднику:

$$g_n - g_p = R_n - R_p - \frac{\partial n_t}{\partial t}.$$
(3.48)

Внаслідок (3.48), відхилення концентрації заряджених домішок $\delta n_t = n_t - n_t^0$ від її термодинамічно рівноважного значення n_t^0 залежить як від темпів зовнішньої генерації, так і від концентрації нерівноважних носіїв струму δn і δp через R_n і R_p . У стаціонарному випадку вираз (3.48) дає простий алгебраїчний зв'язок між δn_t , δn і δp :

$$g_n - g_p = R_n - R_p. (3.49)$$

Таким чином, з (3.48) випливає важливий фізичний висновок. У стаціонарному випадку, при наявності зовнішньої генерації електронів і дірок, неможливо не тільки ввести строге визначення часу життя нерівноважного носія, але й індивідуальний темп їх рекомбінації перестає бути фізичною характеристикою підсистеми носіїв: його величина явно залежить від зовнішніх впливів (різниці швидкостей зовнішньої генерації електронів і дірок).

Необхідно відзначити, що вирази, подібні (3.48), зустрічаються в літературі [295, 296]. Однак, автори зазначених робіт використовували отримані вирази в якості рівняння безперервності заряду на домішковому рівні, не аналізуючи фізичний зміст і глибокі фізичні наслідки, що виникають з (3.48) (зокрема, зазначена вище неможливість інтерпретувати величини $\tau_{n,p}$ як часи життя навіть в лінійному наближенні транспортної теорії для дифузійнодрейфової моделі кінетичних явищ в біполярних напівпровідниках).

Варто зауважити, що в загальному випадку темпи генерації електронів і дірок можуть бути різні навіть у стаціонарному випадку (наприклад, має місце домішкове поглинання світла, і як результат, генерація носіїв тільки одного типу). При цьому, для незалежного від часу транспорту темпи рекомбінації також стають різними, бо для виконання умови безперервності заряду div $\mathbf{j} = 0$ тепер необхідно виконання рівності (3.49), яке, як і раніше, являє собою рівняння кінетики домішкових рівнів в статичному випадку. Після виключення концентрації зв'язаних зарядів n_t система рівнянь, що описує статичне протікання струму в умовах сталої зовнішньої генерації носіїв, приймає наступний вигляд:

$$\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n = -B_n g_n - B_p g_p + R(n, p), \qquad (3.50)$$

$$\frac{1}{e}\operatorname{div}\mathbf{j}_p = B_n g_n + B_p g_p - R(n, p), \qquad (3.51)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho(n, p, g_n - g_p). \tag{3.52}$$

Слід підкреслити, що на відміну від (3.1), "ефективні" темпи генерації $g_{eff} \equiv B_n g_n + B_p g_p$, що фігурують в (3.50)-(3.51), збігаються незалежно від величини справжніх темпів генерації g_n і g_p . Ця обставина забезпечує тотожне виконання умови безперервності повного струму при будь-яких концентраціях нерівноважних носіїв і довільних темпах їх генерації.

Коефіцієнти $B_{n,p}$ в рівняннях (3.50)-(3.51) визначаються конкретним фізичним механізмом рекомбінації. Наприклад, для міжзонної рекомбінації $B_n = B_p = 1/2$, для моделі рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла:

$$B_n = \frac{\varrho_p(p_0 + p_1)}{\varrho_n(n_0 + n_1) + \varrho_p(p_0 + p_1)},$$
(3.53)

$$B_p = \frac{\varrho_n(n_0 + n_1)}{\varrho_n(n_0 + n_1) + \varrho_p(p_0 + p_1)}.$$
(3.54)

Проте, незалежно від механізму рекомбінації завжди виконується співвідношення $B_n + B_p = 1$.

У разі малого відхилення від стану термодинамічної рівноваги темпи рекомбінації і нерівноважна концентрація заряджених домішок визначаються наступними виразами:

$$R_n = \frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p} + \frac{\varrho_n (n_0 + n_1^0) (g_n - g_p)}{\varrho_n (n_0 + n_1^0) + \varrho_p (p_0 + p_1^0)},$$
(3.55)

$$R_p = \frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p} - \frac{\varrho_p (p_0 + p_1^0) (g_n - g_p)}{\varrho_n (n_0 + n_1^0) + \varrho_p (p_0 + p_1^0)},$$
(3.56)

$$\delta n_t = \frac{\varrho_n (N_t - n_t^0) \delta n - \varrho_p n_t^0 \delta p - g_n + g_p}{\varrho_n (n_0 + n_1^0) + \varrho_p (p_0 + p_1^0)}.$$
(3.57)

В (3.55)-(3.55) індексом "0" позначені значення відповідних величин в стані термодинамічної рівноваги при температурі T_0 .

Звертає на себе увагу той факт, що в статиці генераційні члени присутні і в рівнянні Пуассона, але тільки у вигляді різниці темпів генерації електронів і дірок. З фізичної точки зору це абсолютно очевидно — тільки при різних темпах генерації електронів і дірок можлива зміна концентрації заповнених домішкових станів, тобто поява об'ємного заряду, викликаного безпосередньо фотогенерацією нерівноважних носіїв струму.

Для міжзонної генерації $g_n \equiv g_p = g, B_n = B_p = 1/2$ і рівняння перенесення заряду мають добре відомий вид:

$$\frac{1}{e}\operatorname{div}\mathbf{j}_n = -g + R(n, p), \qquad (3.58)$$

$$\frac{1}{e}\operatorname{div}\mathbf{j}_p = g - R(n, p), \qquad (3.59)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho(n,p). \tag{3.60}$$

Хотілося б привернути увагу до таких обставин. Досить часто в літературі (див., наприклад, [83]) вважають, що в разі міжзонної рекомбінації і генерації завжди має місце рівність концентрацій нерівноважних носіїв $\delta n =$ δp . Однак, це твердження жодним чином не випливає з рівнянь (3.58)-(3.60). Дійсно, якщо темпи генерації електронів і дірок (як і темпи їх рекомбінації) збігаються, то звідси, взагалі кажучи, не випливає рівність їх концентрацій (так само, як рівність похідних двох функцій не забезпечує рівність їх самих). Носії, що народжуються, можуть бути відразу ж сепаровані, наприклад, зовнішнім полем. Для виконання рівності $\delta n = \delta p$ необхідно ще й виконання умов квазінейтральності, а ніяк не наявність виключно міжзонних переходів (тобто, взагалі кажучи, остання умова є необхідною, але не є достатньою умовою рівності концентрацій нерівноважних електронів і дірок в процесі міжзонної фотогенерації).

Для монополярного напівпровідника (для визначеності, n -типу) $B_n \ll$

 $B_p \approx 1$. Якщо при цьому $g_n \sim g_p$, система рівнянь (3.50)-(3.52) приймає наступний вигляд:

$$\frac{1}{e}\operatorname{div}\mathbf{j}_n = -g_p + R(n, p), \qquad (3.61)$$

$$\frac{1}{e}\operatorname{div}\mathbf{j}_p = g_p - R(n, p), \qquad (3.62)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho(n, p, g_n - g_p). \tag{3.63}$$

Таким чином, в цьому випадку на статичний транспорт безпосередньо впливає тільки генерація неосновних носіїв. А генерація основних носіїв, якщо її темп відрізняється від темпу генерації неосновних носіїв, проявляє себе опосередковано через рівняння Пуассона.

В якості ілюстрації використання описаного вище підходу проаналізуємо випадок однорідного монополярного напівпровідника (для визначеності — електронного) при однорідній фотогенерації носіїв.

Нехай має місце тільки генерація основних носіїв — електронів ($g_p = 0$), тобто мають місце тільки переходи з домішкового рівня в зону провідності і назад (енергія фотонів перевищує енергію іонізації домішки, але менше ширини забороненої зони). Ця ситуація описується наступною системою рівнянь:

$$g_n + R_n(n, n_t) = 0, \qquad \text{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho(n, n_t, g_n).$$
 (3.64)

Як зазвичай прийнято в такого роду ситуаціях, результуючі виразі були отримані в нехтуванні неосновними носіями $(p = 0, R_p = 0)$.

В силу однорідності даної задачі рівняння Пуассона вироджується в умову нейтральності зразка $\delta n = -\delta n_t$. При цьому, нейтральність має місце при довільних розмірах напівпровідника, на відміну від наближення квазінейтральності.

При високій температурі $(n_1 \gg N_t)$ рішення системи рівнянь (3.64) має

наступний вигляд:

$$\delta n = \frac{g_n}{\varrho_n n_1}, \qquad \delta n_t = -\delta n, \qquad \delta p \equiv 0.$$
 (3.65)

Як зазначалося вище, при отриманні даного результату підсистема дірок не розглядалася взагалі. Більш вичерпним було б включити їх в розгляд, а потім зробити граничний перехід $p_0 \ll n_0$. Однак, провівши цю вельми громіздку процедуру, нескладно переконатися, що буде отриманий такий же результат, тобто генерація основних носіїв практично не впливає на концентрацію неосновних носіїв, $\delta p \ll \delta n$, а неосновні носії в цьому випадку, в свою чергу, не впливають на динамічний баланс між процесами іонізації (перехід електрона з домішкового рівня або валентної зони в зону провідності) і захоплення (перехід електрона провідності на домішковий рівень або в валентну зону).

Розглянемо тепер протилежний граничний випадок, тобто генерацію тільки неосновних носіїв ($g_n = 0$). Відзначимо, що хоча практична реалізація такої ситуації має певні складнощі (тому що для генерації неосновних носіїв потрібна енергія фотонів наперед достатня для генерації основних носіїв), з методичної точки зору цей випадок досить цікавий і дає ключ до розумінню процесів, що протікають при наявності генерації різної інтенсивності носіїв обох типів.

Як неважко переконатися, рішення системи рівнянь (3.61)-(3.63) для цього граничного випадку приводить до наступного результату:

$$\delta n = \frac{n_1 g_p}{\varrho_p n_0 N_t}, \qquad \delta p \approx \delta n, \qquad \delta n_t = \frac{g_p}{\varrho_p n_0} = \frac{N_t}{n_1} \delta n \ll \delta n. \tag{3.66}$$

Перший з выразів (3.66) можно представити як:

$$\delta n = \frac{n_1}{N_t} \frac{n_1}{n_0} \frac{\varrho_n}{\varrho_p} \delta n_{maj}, \qquad (3.67)$$

де $\delta n_{maj} = g_p/(\varrho_n n_1)$ являє собою концентрацію нерівноважних основних фотоносіїв, яка мала б місце в розглянутій вище ситуації генерації тільки

основних носіїв, якби темп генерації електронів дорівнював g_p . Оскільки $n_1 \gg N_t$, а з визначення n_1 випливає, що при високих температурах $n_1 \gg n_0$, то очевидно, що генерація неосновних носіїв змінює концентрацію основних набагато більш ефективно, ніж їх пряма генерація. Звертає на себе увагу і той факт, що, хоча при генерації неосновних носіїв концентрація зв'язаного нерівноважного заряду значно менше концентрації нерівноважних основних носіїв ($\delta n_t \ll \delta n$), проте вона істотно перевищує концентрацію нерівноважних носіїв, яка мала б місце при генерації основних носіїв того ж темпу ($\delta n_t \gg \delta n_{maj}$).

Таким чином, якщо в напівпровіднику одночасно генеруються і основні, і неосновні носії, генерація останніх надає більш істотний вплив як на заповнення домішкових станів, так і на концентрацію основних носіїв, і як наслідок, на протікання струму або формування фотоерс. З фізичної точки зору цей, на перший погляд, парадоксальний висновок можна пояснити наступним чином. Оскільки мова йде про стаціонарні процесах, то вирішальну роль має не сам процес генерації як народження тієї чи іншої частки в тій чи іншій енергетичній зоні напівпровідника, а його вплив на становище точки динамічного балансу між процесами іонізації і захоплення електрона.

3.4 Стаціонарні рекомбінаційні процеси при неоднорідній температурі

Перейдемо тепер до розгляду особливостей встановлення динамічної рівноваги між процесами генерації і рекомбінації в біполярному напівпровіднику при наявності просторової неоднорідності температури. Проаналізуємо встановлення стаціонарного режиму перенесення заряду в хімічно однорідному напівпровіднику, в якому присутня мала просторова неоднорідність температури: $T(x) = T_0 + \delta T(x)$. Проте, при опису цієї, здавалося б, найпростішої термоелектричної задачі виникає ряд проблем, найбільш очевидних саме в біполярному напівпровіднику. Основна криється в формі запису рекомбінаційного члена. У лінійному наближенні останній може бути представлений у вигляді $R(\delta n, \delta p)$. Однак, при цьому виникає питання: від якої величини повинна відраховуватися концентрація нерівноважних носіїв в неоднорідному температурному полі: від $n_0(T_0)$, від $n_0[\overline{T(x)}]$ чи від $n_0[T(x)]$?

Вперше відповідь на це питання була дана в роботі [133] на основі розгляду поетапного встановлення стаціонарного режиму в температурному полі. За аналогією з раніше розглянутим прикладом встановлення рівноваги в неоднорідне-легованому напівпровіднику, на першому етапі в кожному подумки ізольованому шарі встановлюється рівноважна концентрація носіїв, що відповідає даної локальної температурі $n = n_0(T_0) + \delta n'[\delta T(x)]$. Цю зміну концентрації за рахунок неоднорідності температури можна уявити як появу неоднорідності хімічного потенціалу, але при постійній температурі. На другому етапі під дією градієнта хімічного потенціалу відбувається перетікання електронів і дірок. Результуючий розподіл носіїв на другому етапі забезпечує появу вбудованого термоелектричного поля і рівність нулю градієнта електрохімічного потенціалу $\nabla(\mu - e\varphi) = 0$. Природно, результуючий розподіл носіїв струму на другому етапі має забезпечувати єдність рівня хімічного потенціалу електронів і дірок $(\mu_p = -\epsilon_g - \mu_n)$, що і є одним з умов знаходженя поправок до концентрацій. Саме знайдений на другому етапі розподіл носіїв має розглядатися як розподіл рівноважних концентрації в формулах для рекомбінації. На третьому етапі градієнт температури виступає в ролі зовнішньої сили, і з урахуванням цього знаходиться справжній, фізичний розподіл концентрації носіїв в напівпровіднику в неоднорідному температурному полі.

Слід зазначити, що описана вище процедура виявляється вельми вдалою з математичної точки зору, оскільки на кожному етапі (підкреслимо, що на відміну від методу послідовних наближень, в даному випадку всі поправки є одного порядку) виходять лінійні диференціальні рівняння з постійними коефіцієнтами.

Недоліком описаного методу, крім його деякої громіздкості, є неможливість використовувати його, якщо температурне поле не задано *a priori*, а повинно бути знайдено з самоузгодженого рішення транспортної задачі. Виходом в цьому випадку є повернення до розгляду статистики переходів носіїв між зонами і домішковими рівнями з урахуванням температурної залежності рекомбінаційних характеристик.

Неважко переконатися, виконавши нескладні викладки, аналогічні наведеними в підрозділі 3.2.2, що в загальному випадку вираз для рекомбінації при статичному струмоперенесенні в неоднорідному температурному полі в лінійному наближенні при будь-якому механізмі рекомбінації має наступний вигляд [6, 9]:

$$R_n = R_p = \frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p} - \beta_0 \delta T, \qquad (3.68)$$

де параметр β_0 дорівнює:

$$\beta_0 = \frac{2}{\tau_n} \frac{n_i}{p_0} \frac{\partial n_i}{\partial T} = \frac{2}{\tau_p} \frac{n_i}{n_0} \frac{\partial n_i}{\partial T}.$$
(3.69)

Природно, що для різних механізмів рекомбінації визначення параметрів $au_{n,p}$, що входять в (3.68), різниться.

Повчально відзначити, що темп рекомбінації в напівпровіднику в неоднорідному температурному полі виявляється відмінним від нуля навіть в відсутності струму і фотозбудження. Таким чином, в тих задачах, коли цим ефектом знехтувати не можна (наприклад, при опису ФАЕ, докладніше див. [4] і Розділ 6), необхідно розглядати не тільки баланс енергії, а й транспортні рівняння (3.1). Як легко помітити з (3.69), це особливо актуально для власних напівпровідників з досить вузькою забороненою зоною і, як наслідок, високою концентрацією власних носіїв. Таким чином, наявність градієнта температури приводить до появи додаткової складової в вираженні для темпів стаціонарної рекомбінації. Це складова враховує неоднорідність темпу теплової генерації носіїв струму (який, як добре відомо, пропорційний квадрату власної концентрації носіїв струму в напівпровіднику при однорідної температурі T_0 [83, 89]).

Вираз (3.68) описує рекомбінацію при неоднорідній температурі зразка в однотемпературному наближенні, тобто коли температури всіх підсистем квазічастинок збігаються. Якщо ж в плазмоподібному середовищі з'являються гарячі носії струму [113, 114, 297], темп рекомбінації може змінитися.

Отримаємо загальний вираз для стаціонарної рекомбінації в лінійній двотемпературній дифузійно-дрейфовій моделі транспортних явищ в біполярному напівпровіднику (температура дірок T_p збігається з температурою решітки T_h , але відрізняється від температури електронів провідності T_n : $T_n \neq T_p = T_{ph}$). Розглянемо спочатку міжзонну рекомбінацію. Поява в напівпровіднику гарячих носіїв (для визначеності — електронів) змінює перетин захоплення електрона провідності діркою, не впливаючи при цьому на темп спонтанних теплових переходів електронів з валентної зони в зону провідності (теплову генерацію). Тому в двотемпературній моделі загальний вираз для темпу міжзонної рекомбінації має наступний вигляд:

$$R = \varrho_{ib} \left(T_n(\mathbf{r}), T(\mathbf{r}) \right) np - \varrho_{ib} \left(T(\mathbf{r}), T(\mathbf{r}) \right) n_i^2, \qquad (3.70)$$

де перший доданок описує захоплення електрона діркою і явно залежить як від температури електронів, так і температури дірок. Навпаки, теплова генерація, що описується другим доданком, залежить тільки від температури кристалічної решітки напівпровідника. У лінійному наближенні для малих флуктуацій температури електронів і кристалічної решітки напівпровідника

$$T_n(\mathbf{r}) = T_0 + \delta T_n(\mathbf{r}), \qquad T(\mathbf{r}) = T_0 + \delta T(\mathbf{r}), \qquad \delta T_n, \ \delta T \ll T_0$$

отримуємо наступний вираз [6, 9]:

$$R = \frac{1}{\tau} \frac{n_i^2}{n_0 + p_0} \left[\frac{\delta n}{n_0} + \frac{\delta p}{p_0} - \beta_0' \delta T + \beta_n' (\delta T_n - \delta T) \right], \qquad (3.71)$$

де

$$\frac{1}{\tau} = \varrho_{ib}(n_0 + p_0), \qquad \beta_0' = \frac{1}{T_0} \left(3 + \frac{\varepsilon_g}{k_B T_0} \right), \qquad \beta_n' = \left. \frac{1}{\varrho_{ib}} \frac{\partial \varrho_{ib}}{\partial T_n} \right|_{T_n = T_0} \frac{n_0 p_0}{n_0 + p_0}$$

Необхідно відзначити дві важливі обставини. По-перше, координатна залежність електронної температури $T_n = T_n(\mathbf{r})$ в загальному випадку не впливає на член $\beta'_0 \delta T$, який збігається з аналогічним членом у виразі (3.68) для однотемпературної моделі. По-друге, з виразу (3.71) витікає, що при наявності неоднорідності температури та/або наявності гарячих носіїв струму неможливо ввести математично строге визначення часу життя нерівноважних носіїв струму навіть при виконанні умови $\delta n = \delta p$.

Аналогічним чином можна отримати вираз для рекомбінації через домішковий рівень в моделі Шоклі-Ріда-Холла в двотемпературній моделі. Перетин захоплення електрона провідності домішковим рівнем визначається наступним чином:

$$\varrho_n(T_n) = \frac{\int\limits_{\varepsilon_c}^{\infty} c_n(\varepsilon)\nu_n(\varepsilon)f_n(\varepsilon, T_n)d\varepsilon}{\int\limits_{\varepsilon_c}^{\infty} \nu_n(\varepsilon)f_n(\varepsilon, T_n)d\varepsilon},$$
(3.72)

де $c_n(\varepsilon)$ - ймовірність переходу електрону з домішкового рівня в стан з енергією ε , $\nu_n(\varepsilon)$ - густина станів, $f_n(\varepsilon, T_n)$ - функція розподілу Фермі-Дірака електронів провідності з температурою T_n , ε_c - енергія електрона на дні зони провідності. Після простих, але громіздких перетворень для темпу рекомбінації через домішковий рівень знову отримаємо вираз (3.71), де тепер параметри τ і β'_n визначаються наступним чином:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\varrho_n(T_0, T_0)\varrho_p(T_0)N_t(n_0 + p_0)}{\varrho_n(T_0, T_0)(n_0 + n_1^0) + \varrho_p(T_0)(p_0 + p_1^0)}, \quad \beta'_n = \frac{1}{\varrho_n}\frac{\partial\varrho_n}{\partial T_n}\Big|_{T_n = T_0}\frac{n_0p_0}{n_0 + p_0}$$

Необхідно відзначити, що згідно з (3.32) і (3.71) концентрація нерівноважних носіїв δn і δp прагне до нуля при гранично сильній рекомбінації ($\tau \rightarrow 0$) тільки в випадку, якщо $\delta T = \delta T_n = 0$. Дійсно, оскільки темп рекомбінації R завжди є кінцевою величиною, вираз в квадратних дужках в (3.71) повинен наближатися до нуля при $\tau \rightarrow 0$. Це означає, що рівність $\delta n = \delta p = 0$ має місце тільки при $\delta T_n = \delta T = 0$, коли (3.71) переходить в (3.32).

Слід також нагадати, що вираз (3.71) було отримано для випадку, коли зовнішня стаціонарна генерація носіїв струму відсутня.

3.5 Висновки до Розділу 3

Наведений вище аналіз показує, що в рамках єдиних фізичних уявлень можливо описати явища перенесення в напівпровідниках і напівпровідникових структурах, не деталізуючи конкретні механізми генераційно-рекомбінаційних процесів. Також встановлено, що наявність температурних полів і неузгодженість температур носіїв струму і фононів може істотно вплинути на рекомбінаційні процеси при вивченні явищ перенесення навіть в лінійному за зовнішніми впливам наближенні.

На основі вищевикладеного розгляду можна зробити наступні висновки.

 У моделях рекомбінації, що широко використовуються в лінійній дифузійно-дрейфовій теорії транспортних явищ в біполярних напівпровідниках в стаціонарних умовах має місце внутрішня суперечливість.
 Запропоновано спосіб її усунення і для малих збурень отримані вирази для стаціонарної рекомбінації нерівноважних носіїв струму в біполярних напівпровідниках при неоднорідній температурі в одно- і двотемпературній моделях.

- 2. У стаціонарних умовах математично строге введення поняття часу життя нерівноважного носія струму або неможливо взагалі, або час життя є єдиним для електронів і дірок. Достатньою умовою коректного введення часу життя електрон-діркової пари є виконання умов квазінейтральності за відсутності нерівноважного заряду кристалічної решітки при однорідній і єдиній температурі носіїв.
- 3. В біполярному напівпровіднику в стаціонарних умовах при вкрай сильній рекомбінації ($\tau \to 0$) нерівноважні носії відсутні ($\delta n = \delta p = 0$) тільки при однорідній і єдиній температурі носіїв ($\delta T_n = \delta T = 0$).
- 4. Зовнішня стаціонарна генерація неосновних носіїв струму в біполярному напівпровіднику надає більш істотний вплив на транспортні процеси, ніж генерація основних носіїв тієї ж інтенсивності. Ця відмінність тим істотніше, чим більше відношення рівноважних концентрацій основних і неосновних носіїв струму.

РОЗДІЛ 4

НЕРІВНОВАЖНІСТЬ В БАГАТОКОМПОНЕНТНОМУ ПЛАЗМОПОДІБНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

4.1 Механізми нерівноважності носіїв заряду

Легкість появи нерівноважних носіїв заряду і фононів навіть при відносно слабких зовнішніх впливах [259, 261] в багатокомпонентних плазмоподібних середовищах обумовлює їх нелінійні властивості. Саме ця обставина є фізичною причиною, по якій напівпровідникові матеріали знайшли широке застосування в електронній промисловості. Електричне поле, освітлення, іонізуюче випромінювання, нагрівання та інші зовнішні впливи легко виводять напівпровідникову систему зі стану термодинамічної рівноваги, що приводить до появи нерівноважних носіїв. В силу різноманітності шляхів порушення рівноваги в напівпровіднику корисно провести деяку класифікацію фізичних механізмів нерівноважності, що дозволить глибше зрозуміти фізичні причини явищ, що викликаються нерівноважністю тієї чи іншої природи. Але спочатку необхідно визначитися, що розуміти під терміном "нерівноважний носій заряду" в плазмоподібному середовищі, зокрема, в біполярному напівпровіднику. Строго кажучи, будь-який носій струму в системі, виведеної зі стану термодинамічної рівноваги, може вважатися нерівноважним. У свою чергу, стан термодинамічної рівноваги в напівпровіднику має на увазі існування єдиного і постійного в просторі рівня електрохімічного потенціалу. В цьому випадку, при однорідному розподілі температури парціальні струми носіїв (і відповідно, повний електричний струм) відсутні.

Додаток зовнішнього електричного поля при однорідній температурі приводить до виникнення електричного струму в замкнутому колі: система виходить з рівноваги. Однак якщо зовнішній вплив є досить малим, обурення зачіпає тільки електрохімічний потенціал системи, в той час як хімічний потенціал (а значить, і концентрація носіїв струму) зберігає своє рівноважне значення. Оскільки рівень Фермі також залишається єдиним, не порушується і рівновага між підсистемами носіїв. Нерівноважність такого типу доречно назвати імпульсною, так як з мікроскопічної точки зору вона характеризується появою в функції розподілу носіїв струму малої анізотропної частини. Симетрична ж частина функції розподілу, що визначає концентрацію носіїв, залишається незмінною. Прикладом транспорту в умовах імпульсної нерівноважності є електропровідність монополярного напівпровідника. Цей ефект обумовлений саме струмом рівноважних носіїв, що і забезпечує виконання закону Ома для ділянки кола (постійний опір зразка).

При неоднорідній температурі, згідно (2.6), умови однорідності рівня Фермі вже недостатньо для відсутності парціальних струмів носіїв. Навпаки, відсутність парціальних струмів при неоднорідній температурі реалізується тільки при неоднорідному електрохімічному потенціалі. Однак, навіть якщо неоднорідність температури і електрохімічного потенціалу компенсують один одного і потік зарядів відсутній, система є нерівноважною в термодинамічному сенсі.

Описана вище імпульсна нерівноважність з точки зору транспортних процесів в напівпровіднику є тривіальної: ВАХ зразка є лінійної. Значно більший інтерес представляє таке порушення термодинамічної рівноваги, яке позначається на лінійності ВАХ або приводить до появи нових фізичних ефектів (наприклад, появи ЕРС). Надалі, під нерівноважністю буде розумітися стан системи, при якому симетрична частина функції розподілу носіїв не є рівноважною. Носії струму в таких ситуаціях будемо називати нерівноважними носіями. Як буде показано нижче, таке визначення не має на увазі наявності сильного зовнішнього впливу на напівпровідник: відхилення параметрів підсистем (концентрації носіїв, їх температури, тощо) можуть бути малими. При цьому внесок нерівноважних носіїв в процеси перенесення може виявитися порівнянним з внеском рівноважних носіїв струму. Більш того, нелінійний відгук системи на зовнішнє збурення може бути отриманий, як це не парадоксально звучить, вже в лінійному наближенні за відповідними малими параметрами (наприклад, концентрацією нерівноважних носіїв, див. Підрозділи 5.3, 5.4, 7.2, 7.4).

Стан термодинамічної рівноваги багатокомпонентного плазмоподібного середовища, прикладом якого є біполярний напівпровідник, включає в себе виконання наступних очевидних умов.

- Розподіл часток по енергіях всередині кожної підсистеми характеризується рівноважною функцією Фермі-Дірака (для носіїв струму) або Бозе-Ейнштейна (для фононів). У кожній підсистемі можливо визначити свою температуру.
- Підсистеми частинок знаходяться в тепловій рівновазі одна з одною, відсутній потік енергії між ними. Температури всіх підсистем рівні.
- Незважаючи на обмін частками між підсистемами (теплова генерація і рекомбінація, поглинання і випускання рівноважних фононів), дотримується динамічний баланс, сумарний потік частинок з однієї підсистеми в іншу дорівнює нулю.
- У неоднорідній системі (неоднорідно легований напівпровідник, обмежений напівпровідник в контакті з іншим середовищем при ненульовий контактній різниці потенціалів) дифузійний і дрейфовий потоки взаємно компенсуються в кожному середовищі.

Відповідно, будь-яке порушення зазначених умов дозволяє говорити про нерівноважну ситуацію. Винятком є протікання електричного струму, який не порушує ні енергетичного розподілу носіїв, ні просторового розподілу їх концентрацій — згадана вище імпульсна нерівноважність (лінійний транспорт рівноважних носіїв). Залежно від того, яка з перерахованих вище умов порушується, можна провести класифікацію фізичних механізмів нерівноважності в багатокомпонентних плазмоподібних середовищах.

Перш за все, необхідно визначити умови виникнення нерівноважності в напівпровіднику. Оскільки біполярний напівпровідник є системою трьох взаємодіючих підсистем (електронів, дірок і фононів), поява нерівноважності будь-якої природи в одній з них виводить з рівноважного стану і інші. У загальному випадку для вивчення транспортних процесів в напівпровідниках необхідно знайти нерівноважні (в термодинамічній сенсі) функції розподілу носіїв струму, а також фононів. Для цього можна скористатися, наприклад, кінетичним рівнянням Больцмана [150, 266]. Однак, в більшості практично значимих випадків виявляється можливим ввести нерівноважні термодинамічні характеристики: нерівноважні хімічні потенціали, електрохімічні потенціали (квазірівні Фермі) і температури для кожної підсистеми носіїв струму і фононів. Відповідно, можна виділити окремі випадки нерівноважності, в залежності від того, який параметр відрізняється від свого значення в стані термодинамічної рівноваги. Так, наприклад, в разі інжекції електронів і/або дірок з середовища, що контактує, в напівпровідник, генерації носіїв струму за допомогою освітлення, нагріву зразка, тощо, відбувається зміна концентрації носіїв струму (причому їх концентрації, як правило, виявляються просторово-неоднорідними) [13]. Нерівноважність такого типу доречно назвати концентраційною нерівноважностю.

В силу фізичної природи напівпровідників концентраційна нерівноважність, взагалі кажучи, приводить до зміни положення динамічної рівноваги між іншими процесами. Зокрема, змінюється співвідношення дифузійної і дрейфової компонент електронного та діркового струмів [83]. Також порушується баланс процесів захоплення електронів провідності домішковими рівнями і дірками (тобто рекомбінація електронів) з одного боку, і термічної генерації носіїв — з іншого. Це порушення балансу означає, що нерівноважні носії, що з'явилися, наприклад, в зоні провідності, приводять до виникнення генераційно-рекомбинационної нерівноважності, що в свою чергу породжує нерівноважні дірки [13], як це було продемонстровано в Розділі 3.

З точки зору термодинамічних характеристик напівпровідника і концентраційна, і генераційно-рекомбінаційна нерівноважності обумовлені відхиленням електрохімічного потенціалу від свого рівноважного значення. При цьому концентраційна нерівноважность відповідає просторовій неоднорідності електрохімічного потенціалу, а генераційно-рекомбінаційна — відмінності електрохімічного потенціалу електронів і дірок (розщепленню квазірівнів Фермі) [83]. Аналогічно, просторова неоднорідність температури і відмінність температур різних підсистем носіїв струму і/або фононів складає механізм енергетичної нерівноважності в транспортних процесах в напівпровідниках [266].

Слід підкреслити, що енергетична нерівноважність в рідкісних випадках може бути проаналізована незалежно від інших механізмів нерівноважності. Так, наприклад, енергетична нерівноважність, що обумовлена просторовою неоднорідністю температури носіїв, по-перше, приводить до зміщення дифузійно-дрейфової рівноваги через появу термоелектричного поля [133]. По-друге, через температурну залежність перетинів захоплення електронів домішками зміщується і положення генераційно-рекомбінаційної рівноваги, що безпосередньо відбивається на концентрації носіїв, тобто приводить до концентраційної нерівноважності [6].

Розглянемо особливості прояву та взаємозв'язок різних механізмів нерівноважності в біполярних напівпровідниках в стаціонарному режимі. Необхідно відзначити, що в стаціонарному режимі, коли нерівноважний об'ємний заряд в напівпровіднику не залежить від часу, математичний опис транспортних процесів дещо спрощується. Однак, при цьому в силу незмінності об'ємного заряду, тобто виконання умови div $\mathbf{j} = 0$, з'являється додатковий механізм взаємного впливу різних типів нерівноважності. При нестаціонарних (наприклад, високочастотних) процесах такий взаємний вплив не встигає проявитися, і з'являється можливість проаналізувати деякі механізми нерівноважності незалежно [114].

4.2 Енергетична нерівноважність і генераційно-рекомбінаційний баланс

Енергетична нерівноважність, за визначенням, свідчить про суттєву відмінність функції розподілу носіїв струму від рівноважних. Ця відмінність, в свою чергу, може являти собою одним з наступних варіантів:

- 1. збуджена функція розподілу носіїв струму далека від функції Фермі-Дірака. Цей випадок може мати місце при сильному зовнішньому збуджені. При цьому стає неможливим термодинамічний опис підсистем носіїв струму (введення поняття температури, хімічного потенціалу, визначення рухливості і коефіцієнта дифузії, тощо) Дослідження цього випадку вимагає безпосереднього вирішення кінетичного рівняння Больцмана і не може бути виконано в рамках дифузійно-дрейфової моделі, якій присвячена дана дисертаційна робота. Тому, залишимо цей випадок без розгляду.
- 2. Зовнішній вплив дозволяє визначити для збудженої функції розподілу термодинамічні параметри, як це має місце в теорії гарячих електронів [113]. Температури електронів, дірок і фононів при цьому можуть розрізнятися між собою і бути неоднорідними в просторі.
- 3. Підсистеми носіїв струмів і фононів можуть бути описані функціями розподілу з єдиної температурою, що є функцією координат одно-

температурне наближення для напівпровідника в неоднорідному температурному полі.

Очевидно, що неоднорідний нагрів спочатку однорідного зразка викликає появу в біполярному напівпровіднику надлишкових електронно-діркових пар, концентрація яких залежить від координати, порушуючи таким чином початкову однорідність зразка. До такого ж результату приводить дія світла і іонізуючих випромінювань, а також інжекція носіїв з контактуючих середовищ. Чи є ці джерела нерівноважних носіїв еквівалентними в сенсі формування ВАХ або можливості генерації ЕРС? Щоб відповісти на це питання, докладніше зупинимося на енергетичній нерівноважності та її впливі на генераційно-рекомбінаційну рівновагу в біполярному напівпріводнику.

З точки зору математики, для цього потрібно обчислити зсув динамічної рівноваги між тепловою генерацією і рекомбінацією електронів і дірок, після чого визначити концентрації нерівноважних носіїв струму, викликані цим зміщенням. Цю задачу зручно вирішувати в рамках дифузійно-дрейфової моделі, що адекватно описує роботу більшості сучасних твердотільних пристроїв мікроелектроніки.

Рівняння безперервності для густини електронного та діркового струмів (2.7), стосовно ситуації, що розглядається, зручно конкретизувати наступним чином:

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_n = e(R_n - G_n), \quad \operatorname{div} \mathbf{j}_p = e(G_p - R_p).$$
(4.1)

Тут, як і раніше, $G_{n,p}$ являють собою темпи зовнішньої генерації носіїв. Теплова генерація включена в рекомбінаційний член $R_{n,p}$, що відповідає різниці темпів захоплення електрона провідності діркою або домішковим рівнем і темпом зворотного процесу — теплової генерації вільних носіїв.

Темп рекомбінації, як у випадку міжзонної рекомбінації, так і в стаціонарному режимі рекомбінації через домішковий рівень в моделі Шоклі-РідаХолла, може бути записаний у вигляді $R_n = R_p = \rho(np - n_i^2)$. При цьому, в разі стаціонарної рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла коефіцієнт захоплення ρ є функцією як параметрів домішкового рівня, так і концентрації носіїв.

У лінійному наближенні темп стаціонарної рекомбінації при наявності енергетичної нерівноважності, що допускає термодинамічний опис, може бути визначений виразом (3.71). Як зазначалося вище, задля спрощення при виведенні (3.71) передбачалося, що нагрів впливає тільки на електрони провідності, а дірки швидко віддають надлишкову енергію кристалічній решітці (непружне розсіювання дірок на фононах [114, 266]). Тобто, через відмінність ефективних мас електронів m_n і дірок m_p ($m_n \ll m_p$), розігріву піддається тільки електронна підсистема, а температури діркової підсистеми і фононів збігаються.

Подібно (2.6), густини електронного та діркового струмів в нерівноважному випадку зручно виразити за допомогою квазірівнів Фермі (електрохімічних потенціалів) [83, 105]:

$$\mathbf{j}_n = -\sigma_n \left(\nabla \delta \psi_n + \alpha_n \nabla \delta T_n \right), \qquad (4.2)$$

$$\mathbf{j}_p = -\sigma_p \left(\nabla \delta \psi_p + \alpha_p \nabla \delta T\right), \qquad (4.3)$$

де $\delta\psi_{n,p} = \psi_{n,p} - \psi_{n,p}^{(0)}$ - нерівноважний електрохімічний потенціал електронів і дірок, $\psi_{n,p}^{(0)}$ - електрохімічний потенціал електронів і дірок в термодинамічній рівновазі. Нерівноважні добавки до електрохімічного потенціалу носіїв струму пов'язані з нерівноважними добавками до хімічних і електричного потенціалів простими співвідношеннями:

$$\delta\psi_n = \delta\varphi - \delta\mu_n/e, \quad \delta\psi_p = \delta\varphi + \delta\mu_p/e,$$
(4.4)

де $\delta \mu_{n,p} = \mu_{n,p} - \mu_{n,p}^{(0)}, \ \mu_{n,p}^{(0)}$ - хімічний потенціал носіїв струму в термодинамічній рівновазі, $\delta \varphi = \varphi - \varphi_0$ - електричний потенціал в нерівноважній ситуації, φ_0 - потенціал вбудованого електричного поля в стані термодинамічної рівноваги. Причому, в силу єдиності рівня Фермі в стані термодина-
мічної рівноваги для рівноважних хімічних і електрохімічних потенціалів електронів і дірок виконуються наступні співвідношення: $\mu_n^{(0)} + \mu_p^{(0)} = -\varepsilon_g$ і $e(\psi_p^{(0)} - \psi_n^{(0)}) = \varepsilon_g$.

Необхідно підкреслити, що з цієї умови єдиності рівня Фермі витікає, що в невиродженому напівпровіднику виконується рівність $n_0p_0 = n_i^2$ [83]. Саме через цю обставину в моделі Шоклі-Ріда-Холла залежність величини коефіцієнта захоплення ρ від концентрації нерівноважних носіїв струму і заселеності домішкового рівня позначається на темпі рекомбінації $R_n = R_p = \rho(np - n_i^2)$, починаючи з квадратичних членів за концентрацією нерівноважних носіїв. Таким чином, в лінійному по концентрації нерівноважних носіїв наближенні можна цією залежністю знехтувати, вважаючи величину ρ постійною (або такою, що залежить тільки від температури явним чином). У свою чергу, таке припущення дозволяє провести вивчення міжзонної рекомбінації і рекомбінації через домішковий рівень у єдиний спосіб, оскільки білінійні форми для їх темпів в стаціонарному режимі ідентичні.

Для невиродженого електронного газу $n(T_n) = \nu_n(T_n) \exp(\mu_n/k_B T_n)$, $p(T) = \nu_p(T) \exp(\mu_p/k_B T)$ [83, 150] ($\nu_{n,p}$ - густина станів у відповідній зоні, причому $\nu_{n,p}(T) \sim T^{3/2}$), тобто концентрації нерівноважних носіїв пов'язані з нерівноважним хімічним потенціалом в лінійному наближенні наступним чином:

$$\delta n = \frac{n_0}{k_B T_0} \delta \mu_n + \left(\frac{3}{2} - \frac{\mu_n^{(0)}}{k_B T_0}\right) \frac{n_0}{T_0} \delta T_n, \quad \delta p = \frac{p_0}{k_B T_0} \delta \mu_p + \left(\frac{3}{2} - \frac{\mu_p^{(0)}}{k_B T_0}\right) \frac{p_0}{T_0} \delta T.$$
(4.5)

Тоді, с урахуванням (4.3)-(4.4) темп рекомбінації (3.71) можно виразити через квазірівні Фермі:

$$R_{n} = R_{p} = \frac{en_{0}p_{0}}{\tau(n_{0} + p_{0})k_{B}T_{0}} \left[\delta\psi_{p} - \delta\psi_{n} + \frac{1}{e}\left(\frac{3}{2} - \frac{\mu_{n}^{(0)}}{k_{B}T_{0}} + \beta_{n}'T_{0}\frac{n_{0} + p_{0}}{n_{0}p_{0}}\right)(\delta T_{n} - \delta T)\right].$$
 (4.6)

Варто звернути увагу на дві обставини. По-перше, при наявності зовнішньої генерації носіїв вираз (4.6) залишається коректним для стаціонарної рекомбінації через домішкові рівні при $G_n = G_p$. По-друге, в виразі (4.6) випадає доданок, що містить δT окремо. Таким чином, неоднорідний розігрів носіїв, якщо він зберігає єдину температуру носіїв струму і фононів, тобто не порушує енергетичної рівноваги між підсистемами, не впливає на генераційно-рекомбінаційний баланс, незважаючи на появу енергетичної нерівноважності всередині підсистем за рахунок просторової неоднорідності температури, що виникає. Даний висновок однаково справедливий як для міжзонної рекомбінації, так і для рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла в стаціонарному режимі.

4.2.1 Однотемпературна модель

Нехай зовнішній вплив такий, що розігріву електронної підсистеми не відбувається, тобто у всій системі існує один єдиний (можливо, просторово неоднорідний) температурний розподіл ($\delta T_n = \delta T$). Тоді (4.6) набуває такого вигляду:

$$R_n = R_p = \frac{e n_0 p_0}{\tau (n_0 + p_0) k_B T_0} \left(\delta \psi_p - \delta \psi_n\right).$$
(4.7)

В цьому випадку темп рекомбінації цілком визначається величиною розщеплення квазірівнів Фермі. З (4.7) вітикає, що в межах нескінченно сильною рекомбінації ($\tau \rightarrow 0$) за будь-якою просторовою енергетичною нерівноважностю в системі існує єдиний (нехай і такий, що залежить від координати) рівень Фермі електронів і дірок. Його просторова неоднорідність в цих умовах може обумовлювати існування нерівноважних носіїв і протікання електричного струму в результаті зсуву динамічного балансу процесів дифузії і дрейфу носіїв струму в неоднорідній напівпровідниковій системі.

Більш того, в наближенні квазінейтральності [13, 82] концентрація носіїв струму в кожній точці зразка **r** дорівнює значенням концентрації, яка мала б місце в однорідному напівпровіднику при однорідній температурі $T = T(\mathbf{r})$. Дійсно, існування єдиного рівня Фермі визначає перший зв'язок між електронною і дірковою концентраціями. Умова квазінейтральності $\delta\rho(\mathbf{r}) = 0$ (де $\delta\rho(\mathbf{r})$ - об'ємний заряд в напівпровіднику) дає друге співвідношення між концентраціями електронів і дірок. Ці два співвідношення дозволяють однозначно визначити δn і δp . Однак умова квазінейтральності в кожній точці зразка $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i$ збігається з умовою нейтральності однорідного напівпровідника в термодинамічній рівновазі при однорідній температурі $T_i = T(\mathbf{r}_i)$. Таким чином, в разі нескінченної швидкості рекомбінації концентрація носіїв струму дорівнює їх концентрації в даному напівпровіднику в стані термодинамічної рівноваги при температурі $T_i = T(\mathbf{r}_i)$.

Навпаки, коли умови квазінейтральності не виконуються, концентрація носіїв заряду завжди відрізняється від її локального значення в термодинамічній рівновазі. Варто відзначити, що в будь-якому випадку можна говорити про нерівноважні носії, так як концентрація носіїв заряду відрізняється від термодинамічно рівноважного значення, що відповідає незбудженій температурі (температурі термостата) T_0 , якщо $T(\mathbf{r}) \neq T_0$. Хочеться в черговий раз підкреслити дивний на перший погляд результат: існування в системі єдиного рівня Фермі, обумовлене нульовим часом життя носіїв, не означає відсутності нерівноважних носіїв струму. З фізичної точки зору, цей результат представляє загальну умову рівноваги між двома підсистемами єдиної макроскопічної системи по відношенню до переходів частинок між ними [298].

Крім того, на відміну від стану термодинамічної рівноваги, електрохімічний потенціал (єдиний рівень Фермі) в випадку нескінченної швидкості рекомбінації, як правило, не є постійним в просторі. Його просторова неоднорідність в цих умовах може обумовлювати існування нерівноважних носіїв заряду і електричний струм, що виникає в результаті зсуву динамічного балансу між процесами дифузії та дрейфу носіїв заряду.

Фізична причина того, що темп рекомбінації при єдиній температурі фононів і носіїв струму залежить виключно від величини розщеплення квазірівнів Фермі, полягає в наступному. Вираз (4.6), як і подібні результати роботи [9], обумовлені вибором мікроскопічної моделі рекомбінації, в якій фактично постулюється, що:

- темп рекомбінації (захоплення електронів провідності дірками і домішковими рівнями) залежить тільки від концентрації та середньої енергії носіїв (їх температур), але не від їх градієнтів, тощо, тобто визначається симетричною частиною функції розподілу носіїв струму.
- Теплова генерація носіїв взагалі не залежить від стану підсистеми носіїв і визначається тільки температурою решітки (але не її градієнтом, не середнім квазіімпульсом фононів, тощо), тобто знову-таки симетричною частиною функції розподілу фононів.

Таким чином, в використаних моделях міжзонної рекомбінації і рекомбінації за каскадним механізмом Шоклі-Ріда-Холла від самого початку відсутні залежності від градієнтів фізичних величин і асиметричною частини функцій розподілу. Звідси фізично і витікає незалежність швидкості рекомбінації від градієнта квазірівнів Фермі, що, як частковість, виражається і в збігу квазірівнів Фермі при нульовому часу життя, незалежно від ступеня нерівноважності системи.

З іншого боку, такі моделі рекомбінації є загальноприйнятими, і незалежність ймовірності переходу електрона від виду функції розподілу (за умови, звичайно, фіксованою середньої енергії), що лежить в їх основі, добре узгоджується з експериментальними результатами [100]. Поява ж залежності ймовірності переходу електрона від виду функції розподілу можлива лише тоді, коли вже стає некоректним саме поняття температури [299].

4.2.2 Двотемпературна модель

В якості більш складної ситуації розглянемо однорідний біполярний напівпровідник, в якому має місце однорідний розігрів одної з підсистем носіїв (для визначеності — електронів) [113, 114, 297]. Такий випадок може мати місце при опромінюванні напівпровідника світлом, що слабо поглинається і має енергію фотонів меншу за ширину забороненої зони, коли основним механізмом поглинання світла є його поглинання вільними носіями [291, 300, 301].

У розглянутій задачі, також як і в разі термодинамічної рівноваги, відсутній як повний струм (розімкнуте коло), так і парціальні струми носіїв порізно. Однак має місце енергетична нерівноважність: через розігрівання електронів їх температура відрізняється від температури дірок і фононів (яку ми приймаємо однаковою): $T_n \neq T_p = T_0$.

Розглянемо процес встановлення стаціонарного режиму послідовно (в дві стадії).

На першому етапі, в результаті розігріву електронного газу його концентрація залишається незмінною, але рівень хімічного потенціалу змінюється (через явну його залежність від температури), залишаючись однорідним в силу однорідності розігріву. У лінійному наближенні ця зміна складає $\delta \mu_n = \mu_n^0 (T_n - T_0)/T_0$, а нове значення хімічного потенціалу $\mu'_n(T_n) = \mu_n^0 + \delta \mu_n$. Рівень хімічного потенціалу дірок на даному етапі залишається незмінним, тобто рівні хімічних потенціалів електронів і дірок розщеплюються: $\mu'_n(T_n) \neq -\varepsilon_g - \mu_p^0(T_0)$.

Однак, розщеплення рівнів хімічного потенціалу в свою чергу спричиняє появу рекомбінації. Тому, на другому етапі хімічні потенціали електронів і дірок змінюються таким чином, щоб усунути порушення рекомбінаційної рівноваги. Дійсно, в просторово однорідному, статичному випадку у відсутності зовнішньої генерації рівняння (3.1) зводяться до $R_n = 0$ і $R_p = 0$. Згідно (4.6), це можливо тільки в тому випадку, коли розщеплення квазірівнів Фермі пропорційно різниці температур електронів і дірок, а хімічні потенціали пов'язані таким співвідношенням:

$$\mu_n(T_n) = -\varepsilon_g - \mu_p(T_0) - \left(\frac{3}{2} - \frac{\mu_n^{(0)}}{k_B T_0} + \beta'_n T_0 \frac{n_0 + p_0}{n_0 p_0}\right) (T_n - T_0).$$

Відзначимо, що взагалі кажучи, зміні піддаються обидва хімічних потенціали, тобто $\mu_n(T_n) \neq \mu'_n(T_n), \ \mu_p(T_0) \neq \mu_p^0(T_0)$. Таким чином, в результаті рекомбінації енергетична нерівноважність приводить до появи квазірівнів Фермі.

Якщо ж розігрів носіїв є неоднорідним, розщеплення квазірівнів Фермі перестає бути однаковим в усіх точках зразка, а рекомбінація відмінна від нуля. Іншими словами, в цьому випадку енергетична нерівноважність приводить до появи нерівноважності рекомбінаційної (поява квазірівнів Фермі) і концентраційної (просторова неоднорідність квазірівнів Фермі).

Слід нагадати, що вище температури носіїв вважаються заданими. Інакше необхідно додати рівняння теплового балансу, яке включає і члени, що описують виділення тепла в підсистемі носіїв в результаті акту рекомбінації.

Таким чином, взаємний вплив енергетичної та рекомбінаційної нерівноважності може проявлятися двома способами. По-перше, зсув генераційнорекомбінаційного балансу приводить до зміни концентрації носіїв. По-друге, поява в виразі для рекомбінації (4.6) доданка, пропорційного різниці температур підсистем носіїв заряду, може відповідати появі нових фізичних ефектів. Розглянемо ці два способи прояву взаємного впливу енергетичної та рекомбінаційної нерівноважності докладніше.

4.3 Рекомбінаційний механізм нелінійності в теорії гарячих електронів

Вище було показано, що енергетична нерівноважність при наявності температурної залежності перетинів захоплення приводить до зрушення положення динамічної рівноваги між процесами захоплення і термічної генерації, тим самим змінюючи концентрації носіїв в зоні провідності і валентній зоні, а також заселеність домішкових рівнів. До такого ж результату може приводити і відмінність температур носіїв струму. Тому необхідно встановити, наскільки великим є вплив цієї зміни на кінетичні коефіцієнти в порівнянні зі зміною рухливості носіїв струму при такій же розбіжності їх температур.

Вперше задача про вплив нерівноважної концентрації носіїв на ВАХ тонкоплівкового напівпровідникового зразка з гарячими носіями струму була поставлена в роботах [10, 28], де були сформульовані основні рівняння, ГУ і обговорена фізика явища. Дотримуючись цих робіт, розглянемо пластину ізотропного однорідного невиродженого напівпровідника, обмежену в напрямку осі Oz поверхнями $z = \pm a$ (рис. 4.1). Нехай постійне електричне поле з інтенсивністю E_x докладено паралельно осі Ox, так що електричний струм з густиною j_x протікає вздовж зразка. Якщо товщина напівпровідника менше довжини остигання $2a \leq l_{\varepsilon}$ [119], в ньому виникає градієнт електронної температури в напрямку перпендикулярному вектору **E**.

Фізичні характеристики поверхонь $z = \pm a$ представлені електронною поверхневою теплопровідністю η_n . Для спрощення розрахунків обмежимося умовами квазінейтральності. Це припущення в умовах незмінності заселеності домішкових рівнів (наприклад, у власному напівпровіднику) означає рівність концентрацій нерівноважних електронів і дірок $\delta n = \delta p$, що виникають через розігрівання підсистем носіїв струму.



Рисунок 4.1 — Нерівноважність в тонкій напівпровідниковій плівці

Оскільки ефективна маса дірки m_p зазвичай істотно перевищує ефективну масу електронів m_n розігрівом діркової системи в слабкому електричному полі можна знехтувати, як це було зроблено вище. Також покладемо, що фононна підсистема знаходиться в стані рівноваги. Виділимо викликані розігрівом варіації електронної температури і концентрації електронів і дірок: $\delta T_n(z) = T_n(z) - T_0$, $\delta n(z) = n(z) - n_i$, $\delta p = p(z) - n_i$, причому для спрощення обчислень будемо розглядати слабке електричне поле. З цієї причини можна вважати, що $\delta T_n(z) \ll T_0$, $\delta n = \delta p \ll n_i$.

У розглянутій постановці задачі густина електричного струму уздовж осі Ox дорівнює $j_x = \sigma E_x$, де $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$ - провідність напівпровідника, яка в умовах розігріву може бути описана наступною моделлю [113, 114, 119]:

$$\sigma_n = \sigma_n^0 \left(\frac{T_n}{T_0}\right)^{q_n} \frac{n}{n_0}, \qquad \sigma_p = \sigma_p^0 \frac{p}{p_0}, \tag{4.8}$$

де $\sigma^0_{n,p}$ - провідність за відсутністю розігріву, q_n - параметр механізму розсіювання імпульсу.

Для самоузгодженого визначення електронної температури необхідно спільно з рівняннями безперервності вирішити і рівняння теплового балансу [113, 114, 119]. Повна система рівнянь в даній постановці задачі виглядає так:

$$\frac{\mathrm{d}Q_{nz}}{\mathrm{d}z} + k_B n_0 \tilde{\nu} \delta T_n = \sigma_0 E_x^2 + \xi_r \varepsilon_g R, \qquad (4.9)$$

$$\frac{\mathrm{d}j_{nz}}{\mathrm{d}z} = eR, \qquad \frac{\mathrm{d}j_{pz}}{\mathrm{d}z} = -eR, \tag{4.10}$$

де Q_{nz} - густина потоку тепла в електронній підсистемі уздовж осі Oz, парціальні струми носіїв уздовж осі Oz задовольняють рівнянням (2.6), $\tilde{\nu}$ - частота релаксації енергії в електронній підсистемі; ξ_r - частка енергії (в одиницях ε_g), що передається електронній підсистемі в один акт рекомбінації.

Поперечний (до напрямку протікання електричного струму) тепловий потік в електронній підсистемі містить диффузионную і дрейфову компоненти:

$$Q_n = \prod_n j_{nz} - \kappa_n \frac{\mathrm{d}\delta T_n}{\mathrm{d}z},\tag{4.11}$$

де κ_n - електрона теплопровідність, Π_n - коефіцієнт Пельтьє [142, 150].

Рівняння (4.9) і (4.10) повинні бути доповнені відповідними ГУ. ГУ до рівнянь безперервності були обговорені в розділі 2.2:

$$j_{nz}(\pm a) = \pm eR_s(\pm a), \qquad j_{pz}(\pm a) = \mp eR_s(\pm a), \qquad (4.12)$$

а в якості теплових ГУ до рівняння балансу для даної геометрії можна вибрати наступні [119, 302]:

$$-\kappa_n \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \delta T_n(\pm a) = \pm \eta_n \delta T_n(\pm a) \mp \xi_s \varepsilon_g R_s(\pm a), \qquad (4.13)$$

де ξ_s - доля енергії (в одиницях ε_g), що передається підсистемі електронів в один акт поверхневої рекомбінації.

В роботах [113, 119, 303, 304] нерівноважні носії заряду вважалися відсутніми, що відповідає граничному випадку нескінченно сильної рекомбінації (хоча це припущення не було явно задекларовано в зазначених роботах). Природно розглянути протилежний граничний випадок, коли об'ємна і поверхнева рекомбінація відсутні. Ця ситуація малоймовірна в реальному напівпровідниковому приладі, але вона представляє інтерес для теоретичного аналізу даної проблеми. Умова відсутності рекомбінації математично виглядає як $R=R_s\equiv 0.$

Необхідно відзначити, що в цьому випадку рекомбінаційно-генераційний механізм нерівноважності відсутній, існування нерівноважних носіїв викликано енергетичним і концентраційним механізмом: перерозподілом електронів і дірок всередині відповідних зон через появу неоднорідності електронної температури в напрямку Oz.

Як вказувалося в розділі 2.2, випадок повної відсутності рекомбінації є особливим випадком, коли з ГУ (4.12) неможливо визначити одну константу інтегрування і необхідно залучити додаткове ГУ. Їм виступає умова збереження повного числа носіїв в колі (повної нейтральності зразка). З фізичної точки зору зрозуміло, що при відсутності інжекції, рекомбінації і теплової генерації повне число електронів в зоні провідності постійно, можлива лише варіація їх концентрації по перетину напівпровідникової плівки:

$$\int_{-a}^{a} \delta n(z) \mathrm{d}z = 0. \tag{4.14}$$

В силу ГУ (4.14) середній внесок нерівноважних носіїв струму в електропровідність в розглянутому окремому випадку відсутній. Але при наявності рекомбінації нерівноважні носії заряду можуть додатково виникати через перехід між зонами. У цьому випадку умова (4.14) порушується, а генераційно-рекомбінаційна нерівноважність дає додатковий внесок в нелінійність електропровідності.

Якщо поверхнева рекомбінація відсутня, а зразок адіабатично ізольований, то температурні поля носіїв є однорідними в просторі, а розмірних ефектів, пов'язаних з неоднорідністю температури, не виникає. Однак, при наявності об'ємної рекомбінації в адіабатично ізольованому тонкоплівковому зразку, можлива поява рівномірного розподілу нерівноважних носіїв, що змінює провідність зразка. Детальний розгляд зазначеного механізму нелінійності ВАХ однорідного зразка в гріючому електричному полі і аналіз умов, при яких він найбільш яскраво виражений або дуже малий, були опубліковані в роботі [2]. Для отримання більш загальних результатів врахуємо можливість рекомбінації за участю домішкових рівнів.

Нехай в однорідному біполярному полупроводнике існує єдиний невироджений домішковий рівень з енергією ε_t і концентрацією домішки N_t . У даній моделі кінетика зміни концентрації носіїв в зонах за рахунок розігріву визначається наступними процесами:

- - захопленням електронів із зони провідності на домішковий рівень,
- - тепловою емісією електронів з домішкового рівня в зону провідності,
- - захопленням дірок на домішковий рівень,
- - тепловою емісією дірок з домішкового рівня в валентну зону.

Слід підкреслити, що тут не враховується явна залежність коефіцієнтів захоплення від величини електричного поля, тобто не враховуються процеси типу зміни часу життя носіїв струму в сильних полях (див. [109]).

У зазначених припущеннях можна скористатися отриманим в Розділі З виразом (3.71) для темпу рекомбінації в двотемпературній моделі. У стаціонарному стані в даній постановці задачі (однорідність уздовж осі Oz і відсутність поверхневої рекомбінації) згідно (4.10) відсутність поперечної компоненти струмів $j_{nz,pz}$ відповідає поводженню в нуль темпів рекомбінації електронів і дірок $R_n = R_p = R = 0$. Умову нейтральності однорідного зразка можна записати в наступному вигляді: $\delta n + \delta n_t - \delta p = 0$. Тоді концентрації нерівноважних електронів і дірок визначаються наступними виразами:

$$\delta n = -\frac{n_1(p_0 + p_1)^2 + N_t p_1 n_1}{(p_0 + p_1)^2 n_1 + (n_0 + n_1)^2 p_1 + N_t p_1 n_1} \frac{\delta T_n}{\rho_n(T_0)} \frac{\partial \rho_n(T_0)}{\partial T_n} n_0 \tag{4.15}$$

$$\delta p = \delta n \left[1 + \frac{N_t p_1}{(p_0 + p_1)^2} \right]^{-1}, \qquad \delta T_n \equiv T_n - T_0.$$
(4.16)

Подальше дослідження виконано з урахуванням наступних додаткових припущень:

- газ носіїв струму є невиродженим, тобто виконується співвідношення $n_0 p_0 = n_1 p_1 = n_i^2;$
- має місце параболічний закон дисперсії носіїв струму в енергетичних зонах напівпровідника.

При виконанні зазначених умов можна проаналізувати отримані вирази в двох граничних випадках.

I. Власний напівпровідник з низькою концентрацією домішок.

При цьому $n_1 \gg n_0 = p_0 = n_i \gg p_1$ і вирази (4.15)-(4.16) переходять в наступні:

$$\frac{\delta n}{n_i} = -\frac{\delta T_n}{2\varrho_n(T_0)} \frac{\partial \varrho_n(T_0)}{\partial T_n},\tag{4.17}$$

$$\delta p \approx \delta n.$$
 (4.18)

Таким чином, величина ефекту зміни концентрації носіїв при розігріві в цьому випадку визначається виключно температурної залежністю коефіцієнта захоплення електронів ρ_n .

Неважко також помітити, що вирази (4.17)-(4.18), що описують рекомбінацію через домішковий рівень за механізмом Шоклі-Ріда-Холла, мають той же вигляд, що і в разі існування тільки міжзонних переходів у власному напівпровіднику. Іншими словами, мала концентрація пасток у власному напівпровіднику з точки зору реакції на розігрів електронів провідності не проявляє себе специфічним чином, а зміна концентрації носіїв струму при появі гарячих електронів може бути представлено як результат перенормованої міжзонної рекомбінації. У свою чергу, ця обставина може заважати коректному виміру характеристик напівпровідника (перетинів захоплення, часу життя, тощо) в експериментальних методиках, де розігрів електронної підсистеми не контролюється.

II. Монополярний напівпровідник *n* -типу з донорними домішками. Відносна зміна концентрації носіїв в цьому випадку описується наступними виразами:

$$\frac{\delta n}{n_0} = -\left[\left(\frac{n_i^2}{n_0^2} + \frac{N_t}{n_1}\right)^{-1} + 1\right]^{-1} \frac{\delta T_n}{\varrho_n(T_0)} \frac{\partial \varrho_n(T_0)}{\partial T_n}$$
(4.19)

$$\delta p = \delta n \left[1 + \frac{n_0^2 N_t}{n_i^2 n_1} \right]^{-1}.$$
(4.20)

Неважко переконатися, що в даній ситуації зміна концентрації носіїв при розігріві визначається не тільки температурної залежністю ρ_n , але і іншими параметрами напівпровідника (рівноважна концентрація, концентрація і параметри домішки). В області високих температур ($T_0 \gg \mathcal{I} / \ln (\nu_{n0}/N_t)$, тобто $N_t \ll n_1$) функціональна залежність $\delta n/n_0$ від N_t має глибокий мінімум при $N_t \approx \sqrt[3]{n_i^2 n_1}$, рівний

$$\left|\frac{\delta n}{n_0}\right|_{\min} = \left(\frac{2n_i}{n_1}\right)^{2/3} \frac{\delta T_n}{\varrho_n(T_0)} \frac{\partial \varrho_n(T_0)}{\partial T_n} \sim \exp\left(-\frac{\varepsilon_g - 2\mathcal{I}}{3k_B T_0}\right) \ll 1.$$
(4.21)

Таким чином, поблизу зазначеної концентрації додатковий внесок у зміну провідності дуже малий і розігрівні ефекти описуються існуючими теоріями [113–119].

При низьких температурах або, що еквівалентно, при сильному легуванні $(N_t \gg n_1)$ ми повертаємося до виразу (4.17). Однак, на відміну від випадку власного напівпровідника, коли викликані розігрівом зміни концентрації електронів і дірок практично рівні, в даній ситуації, як можна побачити з (4.20), концентрація неосновних носіїв (дірок) не змінюється: $\delta p \to 0$.

У монополярному випадку, як і для власного напівпровідника, відхилення від традиційних теорій визначається температурною залежністю коефіцієнта захоплення електронів ρ_n . На жаль, наразі відсутня послідовна теорія, що дозволяє отримати аналітичний вираз для цієї величини. Тому проаналізуємо модельні залежності для двох випадків домішкових центрів: з потенціалами, що притягують і що відштовхують.

При захопленні електронів потенціалом, що притягає, $\rho_n(T_n) \sim T_n^{-m}$, причому безрозмірний параметр *m* змінюється в межах від $m \simeq 1$ до $m \simeq 5$ в залежності від природи матеріалу і домішки [305, 306]. Тоді

$$\frac{\delta T_n}{\varrho_n(T_0)} \frac{\partial \varrho_n(T_0)}{\partial T_n} = -m \frac{\delta T_n}{T_0}.$$

У разі захоплення відштовхуючим потенціалом домішки (наприклад, іонами золота або міді в германії) температурна залежність коефіцієнта захоплення задовільно описується наступним виразом [307]:

$$\varrho_n(T_n) \sim \exp\left[-\left(\frac{T^*}{T_n}\right)^{1/3}\right],$$

де $T^* \equiv 27\pi^2 m_n e^4 Z^2 / 2\epsilon^2 \hbar^2$, Z - заряд відштовхуючого центру в одиницях e. Тоді, для обраного модельного відштовхуючого потенціалу

$$\frac{\delta T_n}{\varrho_n(T_0)} \frac{\partial \varrho_n(T_0)}{\partial T_n} = \frac{1}{3} \left(\frac{T^*}{T_0}\right)^{1/3} \frac{\delta T_n}{T_0}.$$

Оскільки $T^* \sim 10^9$ К [307, 308], то в разі відштовхуючого потенціалу внесок розглянутого ефекту в зміну провідності в електричному полі, що гріє, стає більш істотним.

У свою чергу, зміна концентрації носіїв струму навіть в однорідному напівпровідниковому зразку при розігріві носіїв струму являє собою додатковий фізичний механізм нелінійності ВАХ напівпровідникових приладів, який раніше не враховувався теорією гарячих електронів. Ігнорування цього механізму при, наприклад, спробі експериментального визначення температурної залежності провідності гарячих електронів може приводити до істотних погрішностей.

Дійсно, згідно з (4.8), знаючи малу флуктуації електронної температури $\delta T_n \ (\delta T_n \ll T_0)$, що викликала зміну провідності $\delta \sigma = \sigma - \sigma_0$, можна обчислити параметр q_n :

$$q_n = -\frac{\delta\sigma}{\sigma_0} \bigg/ \frac{\delta T_n}{T_0} \,. \tag{4.22}$$

Температурна залежність провідності гарячих електронів в (4.8) в існуючій теорії гарячих електронів цілком визначається температурною залежністю рухливості, а концентрація носіїв покладається постійною (тобто $n \equiv n_0, p \equiv p_0$). Якщо ж в зміні провідності врахувати обговорюваний механізм нелінійності, визначений за (4.22) параметр q міститиме похибку δq_n порядку:

$$\delta q_n = \begin{cases} m \frac{n_i^2}{n_0^2}, & \text{для потенціалу, що притягує,} \\ \left(\frac{T^*}{T_0}\right)^{1/3} \frac{n_i^2}{n_0^2}, & \text{для потенціалу, що відштовхує.} \end{cases}$$
(4.23)

Як неважко побачити з (4.23), оскільки для відомих фізичних механізмів розсіювання електронів провідності параметр q_n порядку одиниці, в разі монополярного напівпровідника похибкою у визначенні q_n для притягуючого потенціалу можна знехтувати. Навпаки, в біполярному напівпровіднику похибка виявляється неприйнятно високою. При домінуванні відштовхуючого потенціалу розсіювачів, особливо при низьких температурах, механізм нелінійності, що розглядається, ігнорувати не можна незалежно від типу напівпровідника.

4.4 Енергетична нерівноважність як джерело ЕРС

Загальновідомо, що енергетична нерівноважність приводить до виникнення термоерс (ефект Зеєбека [139]), але це тривіально. Значно цікавішою видається інша можливість появи EPC під впливом нерівноважної термічної генерації, яку проілюструємо на прикладі ефекту Дембера [226, 237].

Якщо енергетична нерівноважність не обмежується просторовою неоднорідністю температури, а в напівпровіднику існують гарячі носії (наприклад, електрони: $\delta T_n \neq \delta T$), то ситуація істотно змінюється. Звернемо увагу, що доданок в (4.6), пропорційний $\delta T_n - \delta T$, описує зсув генераційно-рекомбінаційного балансу під впливом різниці температур електронів і дірок. Ця складова не містить квазірівнів Фермі, отже тепер теплова генерація носіїв повністю еквівалентна зовнішній генерації носіїв з темпом

$$G_n^{(T)} = G_p^{(T)} = \frac{n_0 p_0}{\tau (n_0 + p_0) k_B T_0} \left(-\frac{3}{2} + \frac{\mu_{n0}}{k_B T_0} - \beta_n' T_0 \frac{n_0 + p_0}{n_0 p_0} \right) (\delta T_n - \delta T).$$
(4.24)

Математично це означає, що система диференціальних рівнянь безперервності струму (4.1), (4.6) з урахуванням (4.2)-(4.3), а також система рівнянь для визначення констант інтегрування з відповідних ГУ (що представляють собою умови зшивання електрохімічних потенціалів і струмів носіїв, докладніше див. Розділ 2.2 і роботы [11, 13, 14, 27, 29, 30, 32]), є неоднорідними навіть в тому випадку, коли відсутні градієнти температури або коефіцієнтами Зеєбека можна знехтувати: $\alpha_{n,p} \approx 0$. Таким чином, в цьому випадку навіть однорідний розігрів електронів приводить до появи концентраційної і рекомбінаційної нерівноважності [2].

Іншими словами, теплова генерація в разі різниці температур носіїв може грати роль зовнішньої генерації, зокрема, у відповідній геометрії задачі приводити до виникнення EPC за механізмом фотоерс Дембера, об'ємної фотоерс та ін. При цьому роль темпу фотогенерації носіїв грає величина, яка визначається виразом (4.24). Проілюструємо можливість появи EPC під впливом нерівноважної термічної генерації на прикладі ефекту Дембера [226, 237] в одновимірній двотемпературній моделі.

Розглянемо однорідний напівпровідниковий зразок у формі паралелепіпеда, одна з граней якого (що має координату x = 0) освітлена світлом, що сильно поглинається, з глибиною поглинання γ^{-1} (рис. 4.2). Приймемо довжину зразка в напрямку падіння світла (Ox) досить великою, щоб вважати зразок в цьому напрямку нескінченним, а всі фізичні величини в перпендикулярних напрямках однорідними. У цьому випадку розглянута задача стає одновимірною.



Рисунок 4.2 — До задачі про фотоерс Дембера. Цифрами позначено: 1 - потік освітлення, 2 - напівобмежений напівпровідниковий зразок

Якщо енергія фотонів перевищує ширину забороненої зони напівпровідника, поглинання світла супроводжується як генерацією фотоносіїв зі швидкістю $G_{ph} = g_I I_{ph} \gamma \exp(-\gamma x)$ (де I_{ph} - інтенсивність падаючого світла, g_I - квантовий вихід), так і розігрівом носіїв. Останній обумовлений двома чинниками. По-перше, надлишкова енергія фотонів $\hbar \omega - \varepsilon_g$ (де ω - частота фотона) перерозподіляється в електронній підсистемі, зумовлюючи її відмінність від температури решітки. По-друге, можливий безпосередній розігрів електронів провідності за рахунок поглинання світла вільними носіями без фотогенерації [193]. Другий механізм нагріву електронного газу працює навіть в тому випадку, коли енергія фотона менше ширини забороненої зони напівпровідника, і фотогенерація електронно-діркових пар не відбувається.

Спільний розгляд транспорту заряду і енергії є досить громіздкою задачею навіть в лінійному наближенні. Обмежившись метою якісно продемонструвати зв'язок концентраційної і енергетичної нерівноважні в процесах формування ЕРС, можна прийняти ряд додаткових припущень, що дозволяють провести аналіз теплоперенесення та формування ЕРС окремо. Поперше, будемо вважати, що довжина остигання електронів [193] набагато перевищує глибину поглинання світла, тобто має місце поверхневий розігрів електронної підсистеми. По-друге, знехтуємо джоулевим розігрівом носіїв, що є типовим при вивченні фотоефекту в розімкнутому електричному колі.

Тоді, рівняння перенесення тепла в електронній підсистемі може бути записано у вигляді [266]:

$$\frac{\mathrm{d}Q_n}{\mathrm{d}x} - n\tilde{\nu}\delta T_n = 0, \qquad (4.25)$$

де Q_n - потік тепла в електронній підсистемі, $\tilde{\nu}$ - енергетична частота релаксації. В рамках лінійного наближення $\tilde{\nu} = \text{const}$, а $n = n_0$. Температури решітки і діркової підсистеми вважаємо однорідними в просторі і такими, що збігаються: $T_{ph} = T_p = T_0$.

У свою чергу, потік тепла в електронній підсистемі може бути записаний в наступному вигляді [309, 310]:

$$Q_n = \Pi_n j_n - \kappa_n \frac{\mathrm{d}\delta T_n}{\mathrm{d}x},\tag{4.26}$$

де Π_n - коефіцієнт Пельтьє, κ_n - електронна теплопровідність. Для подальшого спрощення викладок вважатимемо електронну теплопровідність постійною і достатньо високою, щоб знехтувати в (4.26) складовою, що пропорційна електронному струму. Нижче буде наведено більш докладне обговорення критеріїв такого припущення. Тоді вираз (4.26) приймає наступний вигляд:

$$Q_n = -\kappa_n \frac{\mathrm{d}\delta T_n}{\mathrm{d}x}.\tag{4.27}$$

Рішення диференціального рівняння (4.25) з урахуванням зазначених припущень має вигляд

$$\delta T_n = \delta T_{n0} \exp(-\lambda_T x), \qquad (4.28)$$

де $\delta T_{n0} \equiv \delta T_n(0), \ \lambda_T = \sqrt{n_0 \tilde{\nu} / \kappa_n}$ - довжина остигання електронів. Згідно (4.24), такий розподіл електронної температури за рахунок зсуву генераційно-рекомбінаційної рівноваги еквівалентний зовнішній фотогенерації електронно-діркових пар з темпом $G_T = \Gamma_T \delta T_{n0} \exp(-\lambda_T x)$, де

$$\Gamma_T = \frac{n_0 p_0}{(n_0 + p_0) k_B T_0 \tau} \left(\frac{\mu_{n0}}{k_B T_0} - \frac{3}{2} - \beta'_n T_0 \frac{n_0 + p_0}{n_0 p_0} \right), \tag{4.29}$$

а темпи ефективної зовнішньої генерації, що фігурують в (4.1), складають $G_n = G_p = G_{ph} + G_T.$

При вивченні процесів формування ЕРС в обмежених напівпровідниках, особливо при вивченні ефекту Дембера, вирішальне значення має вибір коректних ГУ [237, 238]. Останні, в свою чергу, визначаються типом контактів і фізичними процесами на межах напівпровідника. Будемо вважати, що висвітлення напівпровідника відбувається через тонкий (напівпрозорий) металевий контакт. Для спрощення припустимо, що в площині розділу "металнапівпровідник" відсутні поверхневі рекомбінація і генерація носіїв струму. Така фізична ситуація адекватно описується наступними ГУ [13, 14, 91]:

$$j_n(0) = -\sigma_{ns} \left(\delta \psi_n(0) - \varphi_m(0)\right), \qquad (4.30)$$

$$j_p(0) = 0. (4.31)$$

Тут σ_{ns} - поверхнева провідність контакту "метал-напівпровідник", $\varphi_m(0)$ - електричний потенціал лівого електрода. Рівняння (4.30) відображає монополярний (найчастіше - електронний) характер провідності металу. Іншими словами, за відсутності поверхневої рекомбінації (в тому числі "перехресної"), як обговорювалося в Розділі 3, дірки не можуть переходити з напівпровідника в метал.

З (4.31) випливає, що в разі розімкнутого кола $j_n(0) = 0$. При кінцевій величині поверхневої провідності σ_{ns} в силу (4.30) виконується рівність $\psi_n(0) = \varphi_m(0)$. В глибині напівбезмежного зразка нерівноважні носії відсутні, а друга пара ГУ набуває такого вигляду:

$$\delta \psi_{n,p}|_{x \to \infty} \to 0. \tag{4.32}$$

При такому виборі ГУ ЕРС дорівнює значенню електрохімічного потенціалу на лівій межі зразка: $\mathcal{E} = \delta \psi_n(0)$ [193].

Рішення системи рівнянь лінійного наближення (4.1) не представляє математичних складнощів. Стандартними методами вирішення систем лінійних диференціальних рівнянь з урахуванням ГУ (4.29)-(4.32) в граничному випадку світла, що сильно поглинається ($\gamma \to \infty$), отримаємо такі вирази для квазірівнів Фермі:

$$\delta\psi_n = -\frac{\lambda_T C_T \delta T_{n0} + eI_{ph}}{\lambda\sigma_n} e^{-\lambda x} + \frac{C_T - \alpha_n \sigma_n}{\sigma_n} \delta T_{n0} e^{-\lambda_T x}, \qquad (4.33)$$

$$\delta\psi_p = \frac{\lambda_T C_T \delta T_{n0} + eI_{ph}}{\lambda\sigma_p} e^{-\lambda x} - \frac{C_T}{\sigma_p} \delta T_{n0} e^{-\lambda_T x}, \qquad (4.34)$$

де $C_T = (\lambda_n^2 \alpha_n \sigma_n - e\Gamma_T)/(\lambda^2 - \lambda_T^2), \ \lambda^2 = \lambda_n^2 + \lambda_p^2$ - зворотня довжина амбіполярної дифузії, $\lambda_{n,p} = e^2 n_0 / (\tau_{n,p} \sigma_{n,p} T_0).$

Тоді величина фотоерс дорівнює:

$$\mathcal{E} = \frac{e}{\lambda\sigma_n} I_{ph} - \frac{\lambda\lambda_T + \lambda_p^2}{\lambda(\lambda + \lambda_T)} \alpha_n \delta T_{n0} - \frac{e\Gamma_T}{\sigma_n \lambda(\lambda + \lambda_T)} \delta T_{n0}.$$
(4.35)

Перший доданок у виразі (4.35) відповідає класичній фотоерс Дембера в розімкнутому колі для даної геометрії зразка в відсутності розігріву електронів. Необхідно підкреслити, що наявність металевих електродів приводить до того, що ЕРС Дембера відрізняється від різниці потенціалів електричного поля, яку в літературі часто ототожнюють з ЕРС Дембера. Докладне обговорення цього питання можна знайти в [237, 238].

Другий доданок в (4.35) відповідає термоерс електронів в неоднорідному температурному полі $\delta T_n(x) = \delta T_{n0} \exp(-\lambda_T x)$. Якщо довжина остигання досить мала ($\lambda_T \gg \lambda$), вся зміна температури відбувається фактично на контакті напівпровідника з металом, а цей доданок набуває типового для термоерс виду $\alpha_n \delta T_{n0}$ і містить тільки властивості електронної підсистеми (її коефіцієнт Зеєбека α_n).

В протилежному граничному випадку ($\lambda_T \ll \lambda$) на термоелектричний внесок починають впливати дірки: $(\lambda_p/\lambda)^2 \alpha_n \delta T_{n0}$. При цьому, якщо дифузійна довжина дірок значно перевищує дифузійну довжину електронів $\lambda_p \ll \lambda_n$, то $\lambda \approx \lambda_n \ll \lambda_p$, а термоелектричний внесок у сумарну величину ЕРС Дембера стає дуже незначним. Фізично це означає, що незважаючи на значну довжину охолодження, електрони рекомбінують поблизу контакту, не встигнувши "відчути" різницю температур і створити термоерс.

Слід зауважити, що в разі малої довжини остигання може порушуватися вихідне припущення про можливість знехтувати впливом електричного струму в тепловий потік електронів в (4.26), тобто справедливість виразу (4.27). Дійсно, умову переважання вкладу теплопровідності можна записати у вигляді

$$j_n \left/ \frac{\mathrm{d}\delta T_n}{\mathrm{d}x} \ll \kappa_n / \Pi_n \right.$$

що після підстановки виразів для струму і температури дає таку умову застосовності виразу (4.27):

$$\kappa_n / \Pi_n \gg \left| \frac{\lambda_n^2 \alpha_n \sigma_n - e\Gamma_T}{\lambda^2 - \lambda_T^2} \left(e^{(\lambda_T - \lambda)x} - 1 \right) + \frac{eI_{ph}}{\lambda_T \delta T_{n0}} e^{(\lambda_T - \lambda)x} \right|.$$
(4.36)

З (4.36) випливає, що при $\lambda_T > \lambda$ за рахунок експоненційних множників далеко від контакту умова малості впливу електричного струму на повний потік тепла в електронній підсистемі може порушуватися і вираз (4.27) стає некоректним. З іншого боку, в глибині зразка концентрація нерівноважних носіїв, як і пов'язані з нею потоки тепла, а також парціальні електронний і дірковий струми, стають малими і не надають помітного впливу на величину ЕРС. У той же час, для можливості знехтувати впливом електричного струму на транспорт тепла на контакті (де концентрація нерівноважних носіїв максимальна) досить, щоб виконувалося співвідношення $\delta T_{n0} \gg e \prod_n I_{ph} / (\kappa_n \lambda_T)$. Іншими словами, запропонована теорія справедлива в разі досить сильного розігріву. Проте, і при слабкому розігріві, буде мати місце вклад ЕРС Зеєбека і нерівноважної теплової генерації носіїв в повну величину фотоефекту.

Нарешті, за своїм фізичним змістом останній доданок в (4.35) є безпосередньо величиною EPC, що розвивається за рахунок нерівноважної теплової генерації електронно-діркових пар, і таким чином, відображає вплив енергетичної нерівноважності на концентраційну і дифузійно-дрейфову нерівноважність.

Цілком очевидно, що при малій довжині остигання $\lambda_T \gg \lambda$ цей вплив несуттєвий, оскільки скорочується обсяг напівпровідника, в якому відбувається нерівноважна теплова генерація в умовах, коли температури носіїв струму розрізняються. Однак, як зазначалося вище, в цьому випадку в усьому об'ємі напівпровідника, крім малої області, що безпосередньо прилягає до контакту ($x \approx 0$), порушується вихідне припущення про малість томсоновського тепла [142, 311, 312]. Тому, цей висновок, що здається цілком розумним з фізичної точки зору, повинен сприйматися з обережністю.

Навпаки, при великій довжині остигання електронів складаються найбільш сприятливі умови для прояву вкладу теплової генерації, який досягає свого максимального значення $e\Gamma_T \delta T_{n0}/(\lambda^2 \sigma_n)$.

Слід зазначити, що величина вкладу гарячих носіїв в фотоерс не залежить явно від темпу зовнішньої фотогенерації електронно-діркових пар. Це означає, що ЕРС за даним механізмом може утворюватися і при повній відсутності генерації носіїв падаючим світлом, тобто виключно за рахунок розігріву при поглинанні фотонів електронами провідності.

Також необхідно звернути увагу на той факт, що величина вкладу в ЕРС, що викликається тепловою генерацією, не визначається коефіцієнтом Зеєбека. Вираз для вкладу теплової генерації в ЕРС взагалі не містить доданків виду $\alpha_n \nabla T_n$ в густині електричного струму. Тому величина ЕРС, що розвивається завдяки даному фізичному механізму, може істотно перевищувати величину звичайної термоерс, яка визначається термоелектричними властивостями напівпровідника ($\alpha_{n,p}$). До того ж, ця ЕРС може з'являтися навіть при однорідному розігріві електронної підсистеми, коли $\nabla T_n \equiv 0$.

4.5 Концентраційна нерівноважність в багатокомпонентному середовищі

У попередніх підрозділах були розглянуті фізичні механізми і прояви енергетичної та рекомбінаційної нерівноважності, що обумовлені неоднорідністю температури або різницею температур різних підсистем носіїв струму. Ці нерівноважності приводять до порушення рівноважної концентрації носіїв струму (тобто до появи нерівноважних носіїв) опосередковано. Тепер розглянемо фізичні процеси, пов'язані з явним порушенням рівноважного розподілу концентрації носіїв, тобто концентраційну нерівноважність. Найбільш очевидними процесами такого роду є перерозподіл носіїв в об'ємі зразка в процесі дифузії і дрейфу в електричному полі, а також інжекція в дану область носіїв струму із сусіднього металевого або напівпровідникового середовища.

Стаціонарні транспортні процеси в однорідному біполярному напівпровіднику при малому рівні інжекції можуть бути описані в такий спосіб. При одноріднійї температурі і за відсутності зовнішньої генерації носіїв струму рівняння безперервності (4.2)-(4.3) можуть бути представлені у вигляді:

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_n = e\left(\frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p}\right),\tag{4.37}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_p = -e\left(\frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p}\right). \tag{4.38}$$

Система рівнянь (4.37)-(4.38) повинна бути доповнена рівнянням Пуассона. З (3.19) для рекомбінації за механізмом Шоклі-Ріда-Холла, використовуючи (3.57), отримаємо:

$$\operatorname{div}\delta\mathbf{E} = \frac{4\pi}{\epsilon}\delta\rho = -\frac{4\pi}{\epsilon}(\delta n - \delta p + \delta n_t) = \\ = -\frac{4\pi}{\epsilon} \left[\frac{\varrho_n \left(n_0 + n_1^0 + N_t - n_t^0\right) + \varrho_p \left(p_0 + p_1^0\right)}{\varrho_n \left(n_0 + n_1^0\right) + \varrho_p \left(p_0 + p_1^0\right)} \delta n - \frac{\varrho_n \left(n_0 + n_1^0\right) + \varrho_p \left(p_0 + p_1^0 + n_t^0\right)}{\varrho_n \left(n_0 + n_1^0\right) + \varrho_p \left(p_0 + p_1^0\right)} \delta p \right]. \quad (4.39)$$

В (4.37)-(4.39) фігурують не значення концентрацій і напруженості електричного поля, а їх відхилення від значень цих фізичних величин в стані термодинамічної рівноваги, тобто нерівноважні концентрації зарядів і пов'язане з ним поле. Такий підхід дозволяє відокремити і виключити внесок рівноважних носіїв. Так, електричне поле можна було б представити у вигляді $E = E_0 + \delta E$, де E_0 - вбудоване електричне поле, утворене термодинамічно рівноважним об'ємним зарядом ρ_0 . При цьому E_0 скорочується з ρ_0 в правій частині (4.39). Фізичний зміст цього обговорювався в підрозділі 2.3.

У загальному випадку, для невиродженого напівпровідника в лінійному наближенні концентрації нерівноважних носіїв можуть бути виражені в термінах варіацій хімічного потенціалу:

$$\delta n = \frac{n_0}{k_B T_0} \delta \mu_n, \qquad \delta p = \frac{p_0}{k_B T_0} \delta \mu_p. \tag{4.40}$$

Обидва рівняння (4.40) пов'язані з визначенням квазірівнів Фермі для електронів і дірок. Для простоти в цьому розділі обмежимося розглядом однорідно легованого напівпровідникового зразка. Слід підкреслити, що наявність зовнішніх контактів забезпечує наявність неоднорідності навіть в стані термодинамічної рівноваги. Ця неоднорідність залежить від вбудованого електричного поля і поширюється на відстані близько дебаєвсьного радіусу екранування. Якщо контактна різниця потенціалів досить мала, просторовою залежністю концентрації носіїв струму в стані термодинамічної рівноваги можна знехтувати. При цьому, хоча будь-які зовнішні впливи змінюють розподіл об'ємного заряду, але ця зміна, як показано нижче, не впливає на ВАХ напівпровідникового приладу.

Для спрощення розрахунків приймемо, що електричний струм протікає тільки в напрямку координатної осі Ox. Тоді густини електронного та діркового струму можуть бути визначені через варіації електрохімічних потенціалів носіїв струму в такий спосіб:

$$j_n = -\sigma_n \frac{\mathrm{d}\delta\psi_n}{\mathrm{d}x}, \qquad j_p = -\sigma_p \frac{\mathrm{d}\delta\psi_p}{\mathrm{d}x}.$$
 (4.41)

Використовуючи(4.41), перетворимо систему рівнянь (4.37)-(4.38) до виду:

$$-\sigma_n \frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_n}{\mathrm{d}x^2} = e \left(\frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p} \right), \qquad (4.42)$$

$$-\sigma_p \frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_p}{\mathrm{d}x^2} = -e \left(\frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p} \right). \tag{4.43}$$

Для невиродженого напівпровідника за допомогою (4.41) рівняння (4.42)-(4.43) можуть бути представлені в наступному вигляді:

$$-\sigma_n \frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_n}{\mathrm{d}x^2} = e \left(\frac{n_0 \delta \mu_n}{k_B T_0 \tau_n} + \frac{p_0 \delta \mu_p}{k_B T_0 \tau_p} \right), \qquad (4.44)$$

$$-\sigma_p \frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_p}{\mathrm{d}x^2} = -e \left(\frac{n_0 \delta \mu_n}{k_B T_0 \tau_n} + \frac{p_0 \delta \mu_p}{k_B T_0 \tau_p} \right).$$
(4.45)

З огляду на те, що, як було доведено в Розділі 3, для рекомбінації в стаціонарному випадку виконується рівність $\tau_n/\tau_p = n_0/p_0$, отримаємо замкнену систему рівнянь для квазірівнів Фермі нерівноважних носіїв струму:

$$\sigma_n \frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_n}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\epsilon}{4\pi \tau_n l_n^2} \left(\delta \psi_n - \delta \psi_p \right), \qquad (4.46)$$

$$\sigma_p \frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_p}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{\epsilon}{4\pi \tau_n l_n^2} \left(\delta \psi_n - \delta \psi_p\right),\tag{4.47}$$

де l_n -Дебаївський радіус екранування для електронів. Рівняння (4.46)-(4.47) можна переписати ще більш компактно, ввівши в розгляд максвеловский час

релаксації для електронів і дірок $au_{n,p}^M = \epsilon / \sigma_{n,p}$:

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_n}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\tau_n^M}{\tau_n l_n^2} \left(\delta \psi_n - \delta \psi_p \right), \qquad (4.48)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_p}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\tau_p^M}{\tau_n l_n^2} \left(-\delta \psi_n + \delta \psi_p \right). \tag{4.49}$$

Звідси випливає, що оскільки підсистема двох рівнянь для електрохімічних потенціалів не залежить явно від електричного потенціалу, рівняння Пуассона (4.39) відділяється від (4.46)-(4.47) і останні можна вирішувати незалежно.

Також цікаво відзначити, що в лінійному наближенні (навіть для неоднорідної системи) з системи рівнянь (4.46)-(4.47) для величини розщеплення квазірівнів Фермі $\Delta \psi = \psi_n - \psi_p$ можна отримати одне незалежне рівняння:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Delta\psi = \Lambda_-^2\Delta\psi,\tag{4.50}$$

де $\Lambda_{-}^{-2} = \tau_n l_n^2 / (\tau_n^M + \tau_p^M).$

Вирішивши (4.50), середнє положення рівня Фермі нерівноважних носіїв $\delta \psi_* = (\delta \psi_n + \delta \psi_p)/2$ може бути знайдено рішенням найпростішого лінійного неоднорідного диференціального рівняння

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\delta\psi_* = \Lambda_+^2\Delta\psi,\tag{4.51}$$

де $\Lambda_{+}^{-2} = 2\tau_n l_n^2 / (\tau_n^M - \tau_p^M).$

Можливість відокремити рівняння Пуассона від транспортних рівнянь вельми показова. Дійсно, згідно з (4.41), обчислення густини струму включає операції над похідними електрохімічних потенціалів, а не над ними самими. З рівнянь (4.48) і (4.49) випливає, що в лінійному наближенні електрохімічний потенціал для електронів і дірок можна отримати, ігноруючи просторові розподіли інших фізичних величин, зокрема, електричного потенціалу. Таким чином, ні рівняння Пуассона, ні його ГУ не є необхідними для знаходження електрохімічних потенціалів і, в кінцевому рахунку, густини струму. Слід зазначити, що цей важливий результат був отриманий без будь-яких додаткових припущень, таких як наближення квазінейтральності. Звичайно, щоб відновити просторові розподіли величин n, p і φ порізно, буде потрібно потім вирішити і рівняння Пуассона з відповідними ГУ.

Необхідно підкреслити, що всі зазначені величини самі по собі можуть сильно змінюватися на відстанях порядку дебаєвської довжини екранування. Проте, оскільки пари $n \le \varphi$ та $p \le \varphi$ однаковим чином залежать від координати на довжинах Дебая, ця координатна залежність взаємно компенсується при розрахунку електрохімічних потенціалів. В результаті об'ємний заряд на масштабах радіуса Дебая поблизу контакту не впливає на густину струму і опір напівпровідникового зразка. З фізичної точки зору, відсутність впливу шару об'ємного заряду на електричний і хімічний потенціали відбувається через взаємну компенсацію дрейфового і дифузійного струмів, що породжені нерівноважним вбудованим електричним полем і неоднорідністю концентрації носіїв струму в шарі об'ємного заряду.

Наведені вище результати були отримані для малих відхилень концентрацій носіїв від їх рівноважних значень. При сильній нерівноважності не можна виключати, що нерівноважний об'ємний заряд може вплинути на вигляд ВАХ напівпровідникового пристрою. У цих умовах, рівняння Пуассона необхідно вирішити разом з транспортними рівняннями для електронів і дірок.

На закінчення цього підрозділу потрібно підкреслити, що при вивченні інжекції як концентраційної нерівноважності, що пов'язана з наявністю контакту напівпровідника з іншим провідним середовищем, особливо важливим є правильне врахування поверхневої рекомбінації, що є визначальним фактором при моделюванні транспорту в напівпровідникових приладах. Моделювання сучасних напівпровідникових приладів, виконаних за технологією комплементарної структури метал-оксид-напівпровідник (КМОН) з нанометровими технологічними нормами, часто виконується з зневагою рекомбінації носіїв в області каналу МОН-транзистора, оскільки розмір пристрою, що моделюється, на кілька порядків менше дифузійної довжини і/або пристрої вважаються монополярними [313]. Щодо останнього слід зазначити, що це наближення не зовсім коректно. Наприклад, воно порушується в монополярних електронних пристроях на базі діркового монополярного напівпровідника. Незважаючи на монополярний характер провідності напівпровідника *p*-типу, електронний прилад в цілому з фізичної точки зору являє собою біполярний пристрій через наявність металевих контактів, на яких завжди має місце поверхнева електронно-діркова рекомбінація (яка, як обговорювалося в Розділі 3, і забезпечує провідність контакту "метал-дірковий напівпровідник"). Це ж зауваження повністю можна застосувати до таких приладів, як польовий транзистор МОН технології та ін.: MOSFET, MODFET, MESFET, які в строгому фізичному сенсі також не є монополярними пристроями.

Щоб проілюструвати вплив рекомбінації на концентраційну нерівноважність, а отже, на електричні характеристики зразка, розрахуємо опір однорідного напівпровідникового зразка довжиною 2a, укладеного між двома металевими електродами, в площині контакту яких з напівпровідником має місце поверхнева рекомбінація, що характеризується постійною швидкістю S (рис. 2.3). Використовуючи сформульовану вище математичну модель інжекційної нерівноважності носіїв, неважко отримати такий вираз для опору \mathcal{R} розглянутого приладу в присутності нерівноважних носіїв струму:

$$\mathcal{R} = \frac{2a}{\sigma_n + \sigma_p} \left(1 + \frac{\sigma_p / \sigma_n}{\lambda a \operatorname{cth}(\lambda a) + \lambda^2 \tau a S} \right), \tag{4.52}$$

де λ - зворотня дифузійна довжина, $\tau^{-1} = \tau_n^{-1} + \tau_p^{-1}$. Формула (4.52) і подробиці її виведення обговорюватимуться в Розділі 5 при розгляді проявів концентраційної нерівноважності в термоелектричних ефектах.

Множник перед дужками в виразі (4.52) являє собою класичний вираз для провідникового зразка, тоді як член в дужках пов'язаний з об'ємною

та поверхневою рекомбінацією. Фізичний механізм, який визначає цей член, що зв'язує опір і рекомбінацію, є тим же, що забезпечує перетворення електричного струму в дірковий (і навпаки) в p - n-переході в околиці межі розділу напівпровідників. Цей процес є саме рекомбінація: об'ємна або поверхнева. Як і в p - n -переході, за відсутності рекомбінації струм не може текти. Припускаючи, що рекомбінація повністю відсутня ($au o \infty, S o 0$, $\lambda \to 0$), отримаємо однаковий опір і для діркового, і для електронного напівпровідників, як показано в [133]: $\mathcal{R} \approx 2a/\sigma_n$. Однак цей результат не описує очікуване значення опору для резистора з напівпровідника р-типу. Причина цього криється в тому, що гіпотеза про можливість повністю знехтувати рекомбінацією в гетеропереході діркового напівпровідника і металу невірна і приводить до нефізічних результатів. Внаслідок цього омічні контакти і контакти Шоткі на основі діркового напівпровідника не можуть бути змодельовані так само, як і контакти з електронним напівпровідником (хоча в літературі часто мається на увазі повна фізична еквівалентність монополярних контактів будь-якого типу). У першому випадку, прилад слід завжди розглядати як біполярний і рекомбінацією нехтувати не можна.

4.6 Висновки до Розділу 4

У цьому розділі представлено опис і класифікацію механізмів нерівноважностей носіїв струму в плазмі біполярного напівпровідника, встановлений їхній взаємозв'язок і вказані обумовлені ними фізичні ефекти.

 Показано, що при гранично високій швидкості рекомбінації енергетична нерівноважність не здатна привести до утворення квазірівнів Фермі. У напівпровіднику залишається єдиний, але в загальному випадку, на відміну від стану термодинамічної рівноваги, просторово неоднорідний рівень Фермі. Остання обставина забезпечує можливість існування нерівноважних носіїв і протікання електричного струму в результаті зсуву динамічного балансу процесів дифузії і дрейфу носіїв струму в неоднорідній напівпровідниковій системі при гранично високій швидкості рекомбінації.

- 2. У біполярних напівпровідниках з гарячими носіями струму може проявлятися новий механізм нелінійності, викликаний порушенням динамічного генераційно-рекомбінаційного балансу між підсистемами носіїв струму, що мають відмінну температуру, і підсистемою зарядів на домішкових рівнях. Для притягуючого потенціалу розсіювачів даний механізм найбільш виражений у власних і компенсованих напівпровідниках, в разі монополярного напівпровідника його вплив дуже малий. При домінуванні відштовхуючого потенціалу розсіювачів носіїв струму, особливо при низьких температурах, механізм нелінійності, що розглядається, ігнорувати не можна незалежно від типу напівпровідника.
- 3. Енергетична нерівноважність, що пов'язана з появою гарячих носіїв, проявляє себе зміщенням генераційно-рекомбінаційної рівноваги таким чином, що нерівноважна теплова генерація носіїв виявляється повністю еквівалентною зовнішній генерації електрон-діркових пар. При цьому величина фотоефекту Дембера, розглянутого як приклад для встановлення взаємозв'язку різних типів нерівноважностей в біполярному напівпровіднику, може істотно відрізнятися від свого рівноважного (з енергетичної точки зору) значення.
- 4. Зсув балансу теплової генерації здатний приводити до виникнення термоерс завдяки фізичному механізму, подібному до механізму виникнення фотоерс, навіть при нульовому коефіцієнті Зеєбека або відсутності градієнта температури. ЕРС по розглянутому механізму може з'являтися навіть в тому випадку, коли не відбувається генерації елек-

трон-діркових пар (енергія фотонів не перевищує ширину забороненої зони), але має місце розігрів електронної підсистеми за рахунок поглинання світла вільними носіями (в силу цієї обставини в останньому випадку даний ефект методично правильніше класифікувати як термоелектричний).

5. Визначено зміни нерівноважного об'ємного заряду в біполярному напівпровіднику в рамках моделі Шоклі-Ріда-Холла. Встановлено, що об'ємний заряд на масштабах порядку дебаєвської довжини екранування не впливає на форму ВАХ напівпровідникового пристрою в лінійному режимі.

РОЗДІЛ 5

ТЕРМОЕЛЕКТРИКА В НЕРІВНОВАЖНИХ СИСТЕМАХ

5.1 Проблеми теорії термоерс в біполярному напівпровіднику

Як вказувалося в Розділі 1, широко представлений в літературі опис термоелектричного ефекту Зеєбека [83, 142, 150] у застосуванні до біполярних напівпровідників і інших багатокомпонентних плазмоподібних систем має істотні недоліки. Проаналізуємо їх детальніше. Класична теорія термоерс будується наступним чином. Типова електрична схема, яка використовується для дослідження термоелектрики, наведена на рис. 5.1.



Рисунок 5.1 — Схема експериментального дослідження ефекту Зеєбека. Цифрами позначено: 1-досліджуваний зразок; 2-нагрівач; 3-охолоджувач; 4-металеві з'єднувальні дроти; 5-навантажувальний опір; 6-вольтметр

Між торцями досліджуваного напівпровідникового зразка 1 за допомогою нагрівача 2 і охолоджувача 3 створюється контрольована постійна різниця температур. Зразок за допомогою металевих проводів 4 підключений до резистора, що імітує навантаження. Напруга на резисторі вимірюється за допомогою вольтметра 6.

Торці напівпровідникового зразка 1 довжиною 2a, що з точки зору теорії являють собою контакти "метал-біполярний напівпровідник", поміщені в термостати 2,3 з температурою T_1 і T_2 відповідно. За допомогою термостатів в об'ємі напівпровідника створено температурний розподіл з постійним градієнтом $\nabla T = \Delta T/2a$, де $\Delta T = T_1 - T_2$. Опір \mathcal{R}_L являє собою ефективний опір всього зовнішнього кола, тобто включає в себе як власне опір навантажувального резистора, так і опір вольтметра і з'єднувальних металевих провідників.

Контакти напівпровідника з металом для простоти будемо вважати ізотермічними, в їх площині відсутні скачки температури. Бічні поверхні напівпровідника адіабатично ізольовані, тому цю задачу можна розглядати як одновимірну. У даних умовах температурне поле в зразку можна записати в наступному вигляді:

$$T(x) = T^* - \frac{\Delta T}{2a}x, \qquad (5.1)$$

де $T^* = (T_1 + T_2)/2$. Для спрощення викладок зазвичай вважають різницю температур малої: $T/T^* \ll 1$. Також будемо вважати температури всіх підсистем квазічастинок, що беруть участь у формуванні термоерс (електрони провідності, дірки, фонони), однаковими.

У зазначених експериментальних умовах в стаціонарному режимі в колі виникає постійний термоелектричний струм. Відтворимо спочатку розрахунок термоерс в монополярному напівпровіднику. Густини парціальних струмів електронів для випадку напівпровідника *n*-типу і дірок для випадку напівпровідника *p*-типу в однорідному зразку в розглянутій одновимірної моделі записуються у вигляді [83, 142, 146, 148, 150, 151]:

$$j_{n,p} = \sigma_{n,p} \left(E - \alpha_{n,p} \nabla T \right), \qquad (5.2)$$

де *E* - напруженість термоелектричного поля, що виникає в напівпровіднику вздовж осі *Ox*.

Густини парціальних струмів $j_{n,p}$ підпорядковуються рівнянням безперервності:

$$\frac{\mathrm{d}j_n}{\mathrm{d}x} = eR_n, \qquad \frac{\mathrm{d}j_p}{\mathrm{d}x} = -eR_p. \tag{5.3}$$

Однак, в літературі, присвяченій ефекту Зеєбека, рекомбінацією традиційно зневажають: $R_n = R_p = 0$, вважаючи її несуттєвою супутньою обставиною, що лише змазує картину фізичного ефекту появи термоерс. Як буде показано нижче, ця зневага призводить до принципових суперечностей.

Густина електричного струму в колі j_0 , величина термоерс \mathcal{E} , опори зразка \mathcal{R}_s і зовнішнього електричного кола \mathcal{R}_L пов'язані законом Ома: $\mathcal{E} = j_0(\mathcal{R}_s + \mathcal{R}_L)$. Опір зразка при цьому вважається постійним: $\mathcal{R}_s = 2a/\sigma_0(T^*)\mathcal{S}$, де $\sigma_0(T^*)$ - провідність однорідного напівпровідника при температурі T^* , \mathcal{S} - площа поперечного перерізу зразка. У нехтуванні опором з'єднувальних проводів показання вольтметра $V = \mathcal{E} - j_0 \mathcal{R}_s = j_0 \mathcal{R}_L$.

У режимі розімкнутого кола $\mathcal{R}_L \to \infty$, $j_0 \to 0$. В електронному напівпровіднику $j_0 = j_n = 0$ і з (5.2), отримуємо $E = \alpha_n \nabla T$. Аналогічно для діркового напівпровідника: $j_0 = j_p = 0$, $E = \alpha_p \nabla T$.

З (5.2) робиться висновок, що величина термоерс і падіння напруги на напівпровіднику ідентичні:

$$V = \int_{-a}^{a} E dx = \int_{-a}^{a} \alpha_{n,p} \nabla T dx = \alpha_{n,p} (T_2 - T_1) = \mathcal{E}.$$
 (5.4)

У традиційній теорії термоелектрики у випадку біполярного напівпровідника розрахунок проводиться аналогічним чином. Вся відмінність зводиться до того, що тепер в протіканні струму беруть участь як електрони, так і дірки, тому в режимі розімкнутого кола в нуль звертається повний струм: $j_0 = j_n + j_p$, в той час як для парціальних струмів залишається можливість мати ненульову величину. Необхідно підкреслити, що така можливість входить в протиріччя з вихідним (найчастіше явно не декларованим) припущенням про неістотність рекомбінації: адже існування ненульових густин парціальних струмів носіїв можливо тільки при наявності хоча б одного з механізмів рекомбінації — поверхневого або об'ємного. Вже на цьому рівні виникає протиріччя.

Умова $j_0 = j_n + j_p$ означає $(\sigma_n + \sigma_p)E - (\sigma_n\alpha_n + \sigma_p\alpha_p)\nabla T = 0$. Звідси термоелектричне поле в біполярному напівпровіднику:

$$E_T = \frac{\alpha_n \sigma_n + \alpha_p \sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p} \nabla T.$$
(5.5)

Ототожнюючи різницю потенціалів термоелектричного поля між торцями зразка з ЕРС та зінтегрувавши (5.5) уздовж напівпровідника, отримуємо класичний вираз для величини термоерс в біполярному напівпровіднику [146, 148, 150, 151]:

$$\mathcal{E} = \frac{\alpha_n \sigma_n + \alpha_p \sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p} \left(T_2 - T_1 \right).$$
(5.6)

До викладеного розрахунку термоерс виникає кілька питань.

- Що слід розуміти під Е в (5.2): градієнт електричного E = −∇φ або електрохімічного E = −∇ψ = −∇[φ − (µ/e)] потенціалів? Це питання неодноразово піднімалося в літературі і відповідь на нього цілком відома: коректне визначення ЕРС вимагає оперувати електрохімічним потенціалом [150, 314].
- Яким чином викладену схему застосувати для розрахунку ЕРС в замкнутому колі, тобто при *j*₀. Адже величина ЕРС, що генерується в зразку, в загальному випадку може залежати від величини електричного струму, що протікає через нього.
- 3. У режимі розімкнутого кола в біполярному напівпровіднику і електрони, і дірки дифундують від гарячого торця зразка до холодного.

Якщо знехтувати рекомбінацією (як це зазвичай і роблять [142, 150]), то електрони і дірки накопичуються поблизу холодного краю зразка, створюючи градієнт концентрації, що перешкоджає подальшій термодифузії. У цьому випадку не тільки повний струм, але і парціальні струми носіїв звертаються в нуль. Однак, одночасне виконання рівностей $j_n = j_p = 0$ неможливо, якщо хімічні потенціали носіїв пов'язані рівноважним співвідношенням $\mu_p = -\epsilon_g - \mu_n$ [133], що означає існування єдиного рівня Фермі. Оскільки квазірівні Фермі електронів і дірок рівні $\psi_n = \varphi - \mu_n/e$ і $\psi_p = \varphi + \mu_p/e$, то $E_n = -\nabla \psi_n \neq E_p = -\psi_p$. Адже, яке з цих термоелектричних полів тепер потрібно використовувати для розрахунку термоерс?

Відповіді на друге і третє питання пропонує нова теорія термоелектрики, що викладена в наступному підрозділі.

5.2 Стаціонарна термоерс в біполярному напівпровіднику з нерівноважними носіями. Квазінейтральне наближення

Перш за все необхідно підкреслити, що труднощі традиційної теорії термоелектрики в застосуванні до біполярного напівпровідника пов'язані саме з існуванням нерівноважних носіїв. Дійсно, як було показано в Розділі 4, поява квазірівнів Фермі є причиню і прояви генераційно-рекомбінаційної нерівноважності в плазмі. З цієї точки зору традиційну теорію термоелектрики можна назвати теорією рівноважного термоелектричного ефекту. Також доречно зазначити, що в разі нескінченної рекомбінації (а не декларованої її відсутності!) традиційна теорія може бути застосовна для біполярного напівпровідника, так як розщеплення рівнів хімпотенціалів в цьому граничному наближенні дійсно не відбувається.
Ключовими моментами для побудови коректної теорії нерівноважних термоелектричних явищ в біполярному напівпровіднику є наступні. По-перше, необхідно оперувати електрохімічними потенціалами носіїв струму. Подруге, для обчислення EPC використовувати режим замкнутого електричного кола. Коректне обчислення EPC, яка виникає на ділянці кола за відсутності струму, можливо тільки в тому випадку, якщо нерівноважні носії відсутні поза ділянкою, що розглядається.

Дійсно, згідно з визначенням, ЕРС — це робота сторонніх сил по переміщенню заряду по замкнутому контуру (колу). Навіть якщо відомо, що поза розглянутої ділянки ЕРС не генерується, в загальному випадку робота по переміщенню негативного (електрона) і позитивного (дірки) зарядів може бути різною. Взагалі кажучи, останнє твердження справедливо і для різних груп носіїв струму навіть одного знака: іонів різної маси і заряду в газорозрядної плазмі, носіїв різних долин в напівпровіднику. Тому для коректного обчислення ЕРС необхідно знати внесок кожної групи носіїв, що генеруються, в ЕРС:

$$\mathcal{E} = \sum_{i} w_i \mathcal{E}_i$$

де \mathcal{E}_i -робота по переміщенню заряду (ЕРС) *i*-ої групи, w_i вага (відносний внесок) даної групи в сумарну ЕРС. Із загальних фізичних міркувань зрозуміло, що вагові коефіцієнти являють собою саме частку густини струму кожної групи носіїв в повному електричному струмі в колі: $w_i = j_i/j_0$.

Якщо ж область існування нерівноважних носіїв обмежена ділянкою кола, що досліджується, то на його кінцях рівень Фермі носіїв єдиний, роботи з переміщення заряду будь-якого типу по цій ділянці кола однакові, тому обчислення ЕРС різко спрощується [315].

По-третє, необхідно коректно враховувати особливості рекомбінації в сталому режимі. По-четверте, необхідно брати до уваги наявність контакту напівпровідника з металом: поверхневу рекомбінацію і різний тип провідності середовищ.

Щоб реалізувати зазначені принципи для побудови теорії термоерс в біполярному середовищі з нерівноважними носіями, скористаємося виразами (4.2)-(4.3), які для даної одновимірної моделі приймають вид:

$$j_n = -\sigma_n \left(\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}x} + \alpha_n \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x} \right), \qquad j_p = -\sigma_p \left(\frac{\mathrm{d}\psi_p}{\mathrm{d}x} + \alpha_p \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x} \right). \tag{5.7}$$

На відміну від традиційного підходу, врахуємо (5.3), беручи до уваги, що в стаціонарному випадку темп рекомбінації електронів і дірок єдиний і визначається виразом (3.32).

Як зазначалося в підрозділі 2.3, розподіл електричного та хімічного потенціалів сильно розрізняються залежно від того, чи має місце квазінейтральність (навіть при $\Delta T = 0$). Тому для визначеності і спрощення розрахунків надалі обмежимося розглядом термоерс в наближенні квазінейтральності.

Важливо розуміти двояку роль температурної неоднорідності для побудови теорії термоелектрики в нерівноважних системах. З одного боку, температурна неоднорідність є причиною неоднорідності електричного і хімічних потенціалів (як і концентрації носіїв струму) в однорідних напівпровідниках. Дійсно, концентрація носіїв і їх хімічний потенціал залежать від температури, тому неоднорідність останньої безпосередньо спричиняє неоднорідність хімічного потенціалу. У свою чергу, неоднорідність концентрації носіїв, що виникає, викликає їх перерозподіл, отже, викликає появу об'ємного заряду і вбудованого електричного поля, що компенсує дифузію носіїв.

З іншого боку, температура, точніше її градієнт, являє собою термодинамічну силу, що викликає рух частинки всередині зразка (члени $\alpha_{n,p}\nabla T$ в рівняннях (5.2)). Це розуміння дозволяє уявити собі процес формування термоерс і термоелектричного струму в кілька етапів, як це було зроблено в підрозділі 3.2.1 для опису фізичної картини формування контактної різниці потенціалів в стані термодинамічної рівноваги. На першому етапі вважаємо температуру однаковою і рівною T^* в усіх точках термоелектричного кола. На цьому етапі тільки контактна різниця потенціалів з'являється поблизу площин $x \pm a$. Ця ситуація детально описана в підрозділі 2.3.

На другому етапі припускаємо, що різниця температур ΔT створюється між площинами $x = \pm a$, при цьому просторовий розподіл температури задається функцією (5.1). Хімічний потенціал металу практично не залежить від температури і залишається незмінним, змінюються лише хімічний потенціал і концентрація носіїв в напівпровіднику. Початкові неоднорідні розподіли концентрацій і хімпотенціалів електронів і дірок формуються на цьому етапі:

$$\mu_{n,p} = \mu_{n,p}^{0}(T^{*}) + \delta \mu_{n,p}^{0}(x),$$

$$n_{0}(x) = n_{0}(T^{*}) + \delta n_{0}(x),$$

$$p_{0}(x) = p_{0}(T^{*}) + \delta p_{0}(x),$$

(5.8)

де $\delta \mu_{n,p}^0(x)$, $\delta n_0(x)$, $\delta p_0(x)$ - просторово неоднорідні добавки до термодинамічно рівноважних однорідних значень $\mu_{n,p}^0(T^*)$, $n_0(T^*)$, $p_0(T^*)$, заданих при температурі T^* . Ці добавки з'являються через неоднорідність температури в (5.1), проте поки вважаємо градієнт температури ∇T як термодинамічну силу "вимкненим", а носії — нерухомими.

На третьому етапі ∇T також вважаємо "вимкненим", але електрони і дірки тепер вільні і можуть перерозподілятися в процесі дифузії: з'являється вбудоване термоелектричне поле. Формується єдиний і постійний в просторі рівень електрохімічних потенціалів, встановлюється "рівноважний" стан. Тут використовуються лапки в визначенні стану як рівноважного, оскільки справжня термодинамічна рівновага неможлива в присутності неоднорідного температурного поля. Ситуація аналогічна формуванню неоднорідного хімічного потенціалу і концентрації в неоднорідному легованому напівпровіднику: в якийсь момент донорні домішки (наприклад) поставляють електрони в зону провідності і утворюють вихідний неодноріднй електронний розподіл. В наступний момент цей розподіл змінюється, через що виникає дифузія і дрейф у вбудованому електричному полі. В результаті утворюється рівноважний стан з неоднорідно розподіленими носіями струму. Основна відмінність цього прикладу від описаного вище уявного розподілу в неоднорідному температурному полі полягає в тому, що в неоднорідно легованому напівпровіднику розподіл є істинно рівноважним з точки зору термодинаміки. Процеси, віднесені до другого і третього етапів, були детально описані в роботі [316].

На цьому етапі концентрація носіїв струму являє собою початкову рівноважну концентрацію n_0 і p_0 , яка використовується для опису процесу рекомбінації в лінійному наближенні (3.32).

На останньому етапі "включаємо" термодинамічну силу — доданки $\alpha_{n,p}$ dT/dx, в результаті чого з'являються нові додаткові поправки до електричного і хімічного потенціалів і концентрації носіїв струму. У замкнутому колі з'являється термоелектричний струм.

Відповідно до описаної схеми концентрації носіїв струму і їх хімічні потенціали можна записати в такий спосіб:

$$\mu_{n,p} = \mu_{n,p}^{0}(T^{*}) + \delta \mu_{n,p}^{0}(x) + \delta \mu_{n,p}(x),$$

$$n_{0}(x) = n_{0}(T^{*}) + \delta n_{0}(x) + \delta n(x),$$

$$p_{0}(x) = p_{0}(T^{*}) + \delta p_{0}(x) + \delta p(x),$$

(5.9)

де [316]

$$\delta\mu_n^0(x) = -\delta\mu_p^0(x) = -\frac{\mathrm{d}\mu_n^0(T^*)}{\mathrm{d}T} \frac{\Delta T}{2a} x,$$

$$\delta n_0(x) = n_0(T^*) \left\{ \left[\frac{\mu_n^0(T^*)}{k_B T^*} - \frac{3}{2} \right] \frac{\Delta T}{T^*} \frac{x}{2a} + \frac{\delta\mu_n^0(x)}{k_B T^*} \right\},$$

$$\delta p_0(x) = p_0(T^*) \left\{ \left[\frac{\mu_p^0(T^*)}{k_B T^*} - \frac{3}{2} \right] \frac{\Delta T}{T^*} \frac{x}{2a} + \frac{\delta\mu_p^0(x)}{k_B T^*} \right\}.$$
(5.10)

Аналогічно для електричного потенціалу:

$$\varphi(x) = \varphi_0 + \delta\varphi_0 + \delta\varphi_1(x) + \delta\varphi(x), \qquad (5.11)$$

де [316]

$$\delta\varphi_0 = \frac{1}{e}\delta\mu_n(-a), \qquad \delta\varphi_1 = -\frac{1}{e}\left[\delta\mu_n^0(-a) - \delta\mu_n^0(x)\right]. \tag{5.12}$$

Для більш наочного порівняння термоерс на нерівноважних носіях з результатами традиційної теорії обмежимося розглядом випадку квазінейтральності, причому без урахування можливого нерівноважного заряду на домішкових рівнях (тобто у власному напівпровіднику або при виконанні спеціальних умов, див. підрозділи 2.3 і 3.2.2): $\delta n(x) = \delta p(x)$. Тоді

$$\delta\mu_p(x) = \frac{n_0(T^*)}{p_0(T^*)} \delta\mu_n(x), \qquad (5.13)$$

і, позначивши $au = au_n au_p / (au_n + au_p)$, приходимо до наступної системи рівнянь:

$$\frac{d^{2}\delta\varphi(x)}{dx^{2}} - \frac{1}{e}\frac{d^{2}\delta\mu_{n}(x)}{dx^{2}} = -e\frac{n_{0}(T^{*})}{k_{B}T^{*}}\frac{\delta\mu_{n}(x)}{\tau\sigma_{n}},$$

$$\frac{d^{2}\delta\varphi(x)}{dx^{2}} + \frac{1}{e}\frac{n_{0}(T^{*})}{p_{0}(T^{*})}\frac{d^{2}\delta\mu_{n}(x)}{dx^{2}} = e\frac{n_{0}(T^{*})}{k_{B}T^{*}}\frac{\delta\mu_{n}(x)}{\tau\sigma_{p}}.$$
(5.14)

Граничні умови для системи рівнянь (5.14) в даному випадку контакту металу з напівпровідником в термоелектричному колі вперше були представлені в роботі [316]:

$$j_n(\pm a) = j_0 \mp eR_s, \qquad j_p(\pm a) = \pm eR_s,$$

$$j_0 = \pm \sigma_n^s \left[\varphi_s(\pm a) - \varphi_m(\pm a)\right] \mp \frac{\sigma_n^s}{e} \left[\mu_n(\pm a) - \mu_m\right] \pm \frac{\sigma_n^s}{e} \Delta \varepsilon_c.$$
(5.15)

ГУ (5.15) припускають контакт з нормальним металом, який має виключно електронну провідність. Тому величини R_s в (5.15) повинні включати в себе "перехресну" рекомбінацію, як це описано в підрозділі 2.2.3. Доданок з $\varphi_s(\pm a) - \varphi_m(\pm a)$ враховує скачки електричного потенціалу в площині контакту в квазінейтральності (див. підрозділ 2.3), що викликані контактною різницею потенціалів. Так, в ситуації, що розглядається, стаціонарна поверхнева рекомбінація може бути представлена феноменологічним параметром s_r так, що $R_s^n = R_s^p = s_r \delta n = s_r \delta p$. Рішення системи рівнянь (5.14) з ГУ (5.15) не представляє математичних труднощів і після нескладних обчислень отримуємо такий вираз для повного термоелектричного струму в біполярному напівпровіднику:

$$j_{0}\left[\frac{2}{\sigma_{n}^{s}} + \frac{L_{m}}{\sigma_{m}} + \frac{2a}{\sigma_{n} + \sigma_{p}}\left(1 + \frac{\sigma_{p}/\sigma_{n}}{\lambda_{*}a \operatorname{cth}(\lambda_{*}a) + \lambda_{*}^{2}\tau as_{r}}\right)\right] = 2a\left(\frac{E_{1}}{\lambda_{*}a \operatorname{cth}(\lambda_{*}a) + \lambda_{*}^{2}\tau as_{r}} - E_{T}\right), \quad (5.16)$$

де L_m і σ_m - довжина і провідність металевих провідників,

$$\lambda_*^2 = \frac{\sigma_n + \sigma_p}{\sigma_n \sigma_p} \frac{n_0(T^*) p_0(T^*)}{n_0(T^*) + p_0(T^*)} \frac{e^2}{k_B T^* \tau}, \quad E_1 = \sigma_p \frac{\alpha_p - \alpha_n}{\sigma_n + \sigma_p} \nabla T.$$
(5.17)

Доданки $2/\sigma_n^s$ і L_m/σ_m описують контактний опір і опір металевої частини термоелектричного кола відповідно.

Зіставляючи вираз (5.16) з виразом для закону Ома для повного кола, знайдемо опір біполярного напівпровідника в неоднорідному температурному полі і термоерс, що виникає в цьому колі. Опір зразка складає:

$$\mathcal{R}_s = \frac{2a}{\sigma_n + \sigma_p} \left(1 + \frac{\sigma_p / \sigma_n}{\lambda_* a \operatorname{cth}(\lambda_* a) + \lambda_*^2 \tau a s_r} \right).$$
(5.18)

Опір розглянутого зразка істотно залежить від величини рекомбінації, графічно ця залежність зображена на рис. 5.2.

Для термоерс, що виникає в колі, отримуємо:

$$\mathcal{E} = 2a \left(\frac{E_1}{\lambda_* a \mathrm{ch}(\lambda_* a) + \lambda_*^2 \tau a s_r} - E_T \right).$$
(5.19)

Величина термоерс також виявляється залежною від об'ємної і поверхневої рекомбінації в напівпровіднику. Функціональна залежність термоерс від швидкості об'ємної рекомбінації за відсутністю поверхневих механізмів рекомбінації приведена на рис. 5.3.

Квазірівні електронів і дірок при цьому мають такі просторові залеж-



Рисунок 5.2 — Залежність опору біполярного напівпровідникового зразка від об'ємної рекомбінації за відсутності поверхневої рекомбінації

ності:

$$\psi_n = -a \left[\left(\frac{j_0}{\sigma_n + \sigma_p} + E \right) \frac{x}{a} - \frac{j_0 L_m}{2\sigma_m a} + \frac{j_0 \sigma_p \sigma_n^{-1} (\sigma_n + \sigma_p)^{-1} - E_1}{\lambda_* a \operatorname{cth}(\lambda_* a) + \lambda_*^2 \tau a s_r} \frac{\operatorname{sh}(\lambda_* x)}{\operatorname{sh}(\lambda_* a)} \right], \quad (5.20)$$

$$\psi_p = -a \left[\left(\frac{j_0}{\sigma_n + \sigma_p} + E \right) \frac{x}{a} - \frac{j_0 L_m}{2\sigma_m a} + \frac{j_0 (\sigma_n + \sigma_p)^{-1} - \sigma_n \sigma_p^{-1} E_1}{\lambda_* a \operatorname{cth}(\lambda_* a) + \lambda_*^2 \tau a s_r} \frac{\operatorname{sh}(\lambda_* x)}{\operatorname{sh}(\lambda_* a)} \right]. \quad (5.21)$$

З (5.20)-(5.21) можна побачити, що як і було припущено спочатку, градієнт температури дійсно приводить до появи квазірівні Фермі.

Концентрації нерівноважних носіїв при цьому визначаються наступним



Рисунок 5.3 — Залежність величини термоерс біполярного напівпровідникового зразка від об'ємної рекомбінації за відсутності поверхневої рекомбінації

чином:

$$\delta n(x) = \delta p(x) - \frac{eq}{k_B T^*} \frac{n_0(T^*) p_0(T^*)}{n_0(T^*) + p_0(T^*)} \frac{\sigma_n + \sigma_p}{\sigma_n} \times \frac{j_0(\sigma_n + \sigma_p)^{-1} - \sigma_n \sigma_p^{-1} E_1}{\lambda_* a \operatorname{cth}(\lambda_* a) + \lambda_*^2 \tau a s_r} \frac{\operatorname{sh}(\lambda_* x)}{\operatorname{sh}(\lambda_* a)}.$$
 (5.22)

Важливо підкреслити, що в запропонованому підході до вивчення термоелектричного транспорту величина термоерс залежить не тільки від електронних і віркових коефіцієнтів Зеєбека $\alpha_{n,p}$ і провідності, але також і від часу життя носіїв і швидкості поверхневої рекомбінації. Якщо процеси об'ємної і/або поверхневої рекомбінації досить інтенсивні $\left(s_r \gg s_r^0 \equiv \frac{n_0 + p_0}{\sigma_n + \sigma_p} \frac{k_B T^* \sigma_p^2}{e^2 a n_0 p_0}\right)$ і/або $\tau \ll \tau^0 \equiv \frac{e^2 a n_0}{k_B T^*} \frac{\sigma_n + \sigma_p}{\sigma_n \sigma_p}$, то величина термоерс виявляється рівною:

$$\mathcal{E}_{\infty} = -2a \frac{\alpha_n \sigma_n + \alpha_p \sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p} \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}$$

тобто ми повертаємося до добре відомого виразу для термоерс в біполярно-

му напівпровіднику [142, 150]. Цей граничний перехід підтверджує раніше зроблене твердження про те, що класична теорія термоерс в біполярному напівпровіднику є теорією рівноважного термоелектричного ефекту.

Навпаки, якщо об'ємна і поверхнева рекомбінації слабкі ($s_r \ll s_r^0, \tau \ll \tau^0$), отримуємо зовсім інший результат:

$$\mathcal{E}_0 = -2a\alpha_n \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}.\tag{5.23}$$

Важливо відзначити, що результат (5.23) відноситься як до електронних, так і до діркових напівпровідників. За відсутності рекомбінації в формуванні термоерс беруть участь тільки електрони. Фізичним поясненням цієї обставини є присутність в термоелектричному колі контакту біполярного напівпровідника з металом, в якому відсутні дірки. В цьому випадку, оскільки $j_p = 0$ при $R = R_s = 0$ (див. (5.3), (5.15)), повний струм в колі j_0 збігається з електричним струмом j_n . Таким чином, в напівпровіднику *p*-типу термоерс може змінити свій знак при зменшенні швидкості поверхневої і об'ємної рекомбінації (див. рис. 5.3).

Умову слабкої об'ємної рекомбінації $\tau \gg \tau_0$ і слабкої поверхневої рекомбінації $s_r \ll s_r^0$ можна переписати у вигляді:

$$a \ll \lambda_*^{-1}, \qquad s_r \ll \frac{l_\nu v_T}{a},$$

$$(5.24)$$

де l_{ν} - імпульсна довжина вільного пробігу, v_T - середня теплова швидкість руху носіїв струму.

Швидкість поверхневої рекомбінації в епітаксійних шарах $n-\mathrm{Cd}_{x}\mathrm{Hg}_{1-x}$ Те при кімнатній температурі становить порядку $s_{r} \approx 10^{3}$ cm/c. Оскільки $v_{T} \approx 10^{7}$ см/с [317], $l_{\nu} \approx 10^{-5} - 10^{-6}$ см, поверхнева рекомбінація стає неефективною з точки зору контролю над появою нерівноважних носіїв струму при $2a \ll 10^{-2}$ см. Якщо при цьому виконується умова $2a \ll \lambda_{*}^{-1}$, нерівноважні носії грають основну роль у формуванні термоерс. Слід ще раз звернути увагу на той факт, що опір біполярного напівпровідникового зразка і термоерс, що генерується в ньому, залежать не тільки від електропровідності електронів і дірок, так як це зазвичай вважають, а й від параметрів і механізмів рекомбінації.

Опір біполярного напівпровідникового зразка приймає звичну форму $\mathcal{R}_s^{\infty} = 2a(\sigma_n + \sigma_p)^{-1}$ тільки в разі сильної об'ємної і/або поверхневої рекомбінації. У разі неефективності рекомбінаційних механізмів опір біполярного зразка (включаючи граничний випадок - монополярний дірковий напівпровідник) визначається параметрами його електронної підсистеми (тобто неосновними носіями в напівпровіднику *p*-типу): $\mathcal{R}_s^0 = 2a\sigma_n^{-1}$.

Також варто відзначити, що в рамках моделі, що розглядається, опір біполярного напівпровідникового зразка в термоелектричній задачі має той же вигляд, що і для випадку транспорту нерівноважних носіїв за відсутності градієнту температури, але при наявності зовнішньої напруги. Це питання детально обговорювалося в літературі [125].

Вплив поверхневої і об'ємної рекомбінації на координатну залежність квазірівнів Фермі проілюстровано на рис. 5.4.

Як видно з рис. 5.4, квазірівень Фермі електронної підсистеми в дірковому напівпровіднику стає немонотонною функцією координат (див. криву (2)) при малих швидкостях об'ємної і поверхневої рекомбінації. Наскільки відомо, це єдина фізична ситуація, коли квазірівень Фермі залежить від координат у немонотонний спосіб.

Область застосування викладеної в цьому підрозділі теорії ширше і може охоплювати більш складні проблеми, ніж наведені тут модельні задачі. Її висновки можуть знайти застосування в практичних додатках. Так, з вищевикладеного випливає, що істотне підвищення температури в напівпровіднику *p*-типу з великими часом життя носіїв і слабкою поверхневою рекомбінацією не приводить до помітної зміни величини термоелектрично-



Рисунок 5.4 — Квазірівень фермі за відсутністю поверхневої рекомбінації в дірковому напівпровіднику. 1 - квазірівень Фермі дірок; 2,3,4 - квазірівні електронів при сильній (2), помірній (3) і слабкій (4) об'ємній рекомбінації

го ефекту. Це відбувається тому, що дірки не вносять вклад в формування термоерс, навіть якщо їх концентрація досить велика. Цей факт може мати суттєве значення для збільшення ефективності термоелектричних пристроїв (термогенератори, терморефріжератори).

5.3 Динамічна термоерс в однорідному біполярному напівпровіднику

Розглянутий вище опис відноситься до термоелектричного ефекту в стаціонарному випадку. Як вказувалося в Розділі 1, як з точки зору теорії, так і з точки зору практичного застосування великий інтерес представляють фізичні механізми формування ЕРС в нестаціонарному, динамічному режимі. Зрозуміло, що кінетичні процеси в цьому випадку будуть мати свої особливості, зокрема, свій внесок в величину ЕРС можуть давати й інші параметри термоелектричного приладу, ніж це має місце в стаціонарному режимі.

Необхідно також відзначити, що традиційний термоелектричний ефект можна назвати поздовжнім: напрямок формування термоерс (напрямок протікання термоелектричного струму) збігається з напрямком поширення теплової енергії (середнього теплового потоку, градієнта температури), що викликає утворення цієї термоерс. Нижче в цьому розділі будуть розглянуті термоелектричні ефекти, які, по-перше, є суто динамічними (тобто не мають аналогів в статичному температурному полі), а по-друге, можуть бути названі поперечними: термоелектричний струм, що виникає в колі, є ортогональним до напрямку потоку енергії від нагрівача до термостата. Іншими словами, середній тепловий потік в напрямку протікання термоелектричного струму дорівнює нулю.

З загальнофізичних міркувань зрозуміло, що будь-яка неоднорідність температури приводить до появи в цій точці плазмоподібного середовища неоднорідності концентрацій. У Розділах 3 і 4 це твердження було строго доведено для напівпровідникового середовища. Також було показано, що неоднорідність температури в біполярному напівпровіднику приводить до появи нерівноважних носіїв. Можна припустити, що динамічна неоднорідність температурного поля, деякий температурний профіль, що рухається в напівпровіднику, може захоплювати за собою носії струму, викликаючи появу електричного струму в цьому напрямку. При цьому, взагалі кажучи, зовсім необов'язково, що рухомому температурному профілю відповідає ненульовий середній тепловий потік в напрямку руху цього профілю. Під тепловим потоком будемо мати на увазі потік теплової енергії в кристалічній решітці (фононній підсистемі). Питання про перенесення тепла нерівноважними носіями, що утворюють термоелектричний струм в напрямку руху температурного профілю, поки залишимо за дужками.

Найпростішим прикладом динамічного температурного поля, що має



Рисунок 5.5 — Динамічний термоелектричний ефект в пластині однорідного напівпровідника. Контурні стрілки показують напрямок падіння модульованого теплового випромінювання, що нагріває зразок. Чорна стрілка показує напрямок руху температурної хвилі

зазначені характеристики, є розподіл температури у вигляді біжучої хвилі (рис. 5.5):

$$T(x, z, t) = T_0 + \delta T(z) \cos \Phi, \qquad (5.25)$$

де $\Phi = kx + \Omega t$, $k = 2\pi/\Lambda$, Λ -довжина температурної хвилі; $\Omega = kv$, v - швидкість руху температурної хвилі (температурного профілю). У напрямку Oyтемпература і всі фізичні характеристики напівпровідникового зразка однорідні. Як неважко переконатися, середній тепловий потік, що викликається температурним розподілом виду (5.25) в напрямку Ox дорівнює нулю, поширення тепла йде в напрямку осі Oz: потік тепла, що надходить в зразок з верхньої площини (z = h), проходить через пластину напівпровідника і передається до термостата, який лежить в площині z = 0.

5.3.1 Поперечні температурні хвилі в однорідному напівпровіднику

Для спрощення математичних викладок знехтуємо координатною залежністю амплітуди температурної хвилі в(5.25): $\delta T(z) = T_0 = \text{const:}$

$$T(x,t) = T_0 + \delta T_0 \cos \Phi. \tag{5.26}$$

Перш ніж звернутися до розгляду фізичних механізмів, відповідальних за прояв зазначених нових термоелектричних ефектів у даній геометрії задачі, необхідно переконатися в тому, що дійсно в обмеженому напівпровідниковому зразку можна створити змінне температурне поле виду (5.26). Покажемо, що в тонкій напівпровідниковій пластині (критерії товщини будуть отримані нижче), що нагрівається з одного боку ззовні, а з іншого боку має контакт з термостатом, при виконанні ряду умов розподіл температури може бути представлено у вигляді біжучої хвилі. При цьому не має значення спосіб нагріву. Нагрівання може здійснюватися, наприклад, множиною еквідистантно розташованих циліндричних нагрівачів, що мають безпосередній контакт з поверхнею зразка і рухаються уздовж нього. Також нагрів може бути здійснений і безконтактним чином, наприклад, за допомогою модульованого потоку інфрачервоного або мікрохвильового випромінювання, тощо.

Одним з найбільш зручних для реалізації варіантів такого нагріву може бути використання експериментальної методики, аналогічної тій, що використовується для одночасного вимірювання рухливості і часу життя носіїв методом рухливої решітки фото носіїв (MPG) [38], але з довжиною хвилі лазера, яка виключає фотогенерацію носіїв струму. У цьому випадку на верхній поверхні напівпровідникової пластини утворюються інтерференційні смуги, що рухаються в напрямку осі 0x, які і нагрівають напівпровідник.

Розподіл температури в напівпровідниковій пластині описується рівнян-

ням теплопровідності [318, 319]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_T \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \qquad (5.27)$$

де a_T - коефіцієнт температуропровідності напівпровідника. Як зазначалося вище, в задачі, що розглядається, температуру вздовж осі Oy вважаємо сталою.

ГУ до рівняння (5.27) в розглянутій геометрії є такі. Якщо верхня поверхня зразка (z = h) освітлена світлом з інтенсивністю $I = I_0 (1 + \cos \Phi)$, який повністю поглинається в нескінченно тонкому приповерхневому шарі зразка без утворення фотоносіїв, то відповідна ГУ має такий вигляд:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=h} = \frac{g_0 I_0}{\kappa} \left(1 + \cos \Phi \right), \tag{5.28}$$

де κ - теплопровідність напівпровідника, g_0 - коефіцієнт, що характеризує ефективність нагріву напівпровідника світлом. За відсутності відбиття для одномодового лазерного випромінювання можна вважати $g_0 = \hbar \omega_0$, де ω_0 частота лазерного випромінювання.

На протилежному боці зразка (z = 0), яка представляє собою інтерфейс з підкладкою, що є термостатом, ГУ запишеться у вигляді [318, 319]:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{\chi}{\kappa} (T - T_0), \tag{5.29}$$

де χ - коефіцієнт поверхневої теплопровідності.

По осі *Ox* скористаємося циклічними ГУ, поклавши, що довжина зразка кратна довжині хвилі:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=a}.$$
(5.30)

Рішення рівняння (5.27) будемо шукати у вигляді:

$$T(x, z, t) = A_1(z)\sin\Phi + A_2(z)\cos\Phi + A_3(z).$$
(5.31)

$$A_1''(z) - k^2 A_1(z) + \frac{\Omega}{a^2} A_2(z) = 0, \qquad (5.32)$$

$$A_2''(z) - k^2 A_2(z) - \frac{\Omega}{a^2} A_1(z) = 0, \qquad (5.33)$$

$$A_3''(z) = 0, (5.34)$$

з ГУ

$$A_1'(h) = 0, \quad A_2'(h) = A_3'(h) = \frac{g_0 I_0}{\kappa},$$
 (5.35)

$$A_{1,2}'(0) = \frac{\chi}{\kappa} A_{1,2}(0), \quad A_3'(0) = \frac{\chi}{\kappa} (A_3(0) - T_0).$$
(5.36)

Загальне рішення системи рівнянь (5.32)-(5.34) має наступний вигляд:

$$A_{1}(z) = \frac{1}{2}(C_{1} + iC_{3})\operatorname{ch}(k_{1}z) + \frac{1}{2}(C_{1} - iC_{3})\operatorname{ch}(k_{2}z) + \frac{ig_{0}I_{0}}{2k_{1}k_{2}}[k_{2}\operatorname{sh}(k_{1}z) - k_{1}\operatorname{sh}(k_{2}z)], \quad (5.37)$$

$$A_{2}(z) = \frac{i}{2}(C_{1} - iC_{3})\operatorname{ch}(k_{2}z) - \frac{i}{2}(C_{1} + iC_{3})\operatorname{ch}(k_{1}z) + \frac{g_{0}I_{0}}{2k_{1}k_{2}}[k_{2}\operatorname{sh}(k_{1}z) - k_{1}\operatorname{sh}(k_{2}z)], \quad (5.38)$$

$$A_3 = C_5 z + C_6, (5.39)$$

де $k_1^2 = k^2 + i\Omega/a_T, \, k_2^2 = k^2 - i\Omega/a_T, \, C_{1-6}$ - константы інтегрування.

Для термічно тонкого зразка $|k_{1,2}|h \ll 1$ вирази (5.37)-(5.38) приймають простий вигляд:

$$A_1(z) = C_1 + C_2 z, \quad A_2(z) = C_3 + C_4 z.$$
 (5.40)

Визначивши константи інтегрування, отримаємо наступний температурний розподіл:

$$T = T_0 + \frac{g_0 I_0}{\kappa \chi} \left(\chi z + \kappa\right) \left(1 + \cos \Phi\right).$$
(5.41)

Як видно з виразу (5.41), якщо напівпровідникова пластина слабо пов'язана з підкладкою ($\chi h \ll \kappa$), то розподіл температури в зразку набирає вигляду:

$$T = T_0 + \frac{g_0 I_0}{\chi} \left(1 + \cos \Phi\right), \qquad (5.42)$$

що формально відповідає виразу (5.26) с заміною T_0 на $T_0 + g_0 I_0 / \chi$, $\delta T_0 = g_0 I_0 / \chi$.

5.3.2 Динамічний термоелектричний ефект в умовах квазінейтральності

Розглянемо пластину однорідного біполярного напівпровідника довжиною a, в якій зовнішнім нагрівом підтримується стаціонарний розподіл температури у вигляді "біжучої хвилі" (5.26), див. рис. 5.5. Для спрощення розрахунків вважатимемо довжину зразка кратною довжині температурної хвилі, тобто нехай $ka/(2\pi)$ буде цілим числом.

Нехай виконуються зазначені в підрозділі 5.3.1 умови генерації поперечних біжучих температурних хвиль, тобто зразок є термічно тонким і слабо пов'язаним з підкладкою:

$$|k_{1,2}|h \ll 1, \qquad \frac{\chi h}{\kappa} \ll 1.$$
 (5.43)

Обмежуючись розглядом одновимірної моделі, тобто вважаючи усі величини однорідними в напрямках, перпендикулярних руху температурної хвилі, в рамках дифузійно-дрейфової моделі можна записати наступні рівняння безперервності для електронного та діркового струмів:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} - R_n, \qquad (5.44)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} - R_p, \qquad (5.45)$$

причому

$$j_n = eu_n nE + k_B T u_n \frac{\partial n}{\partial x} + eu_n \alpha_n^* n \frac{\partial T}{\partial x}, \qquad (5.46)$$

$$j_p = eu_p p E - k_B T u_p \frac{\partial p}{\partial x} + eu_p \alpha_p^* p \frac{\partial T}{\partial x}.$$
(5.47)

Введені в (5.46)-(5.47) феноменологічні коефіцієнти термоерс електронів і дірок $\alpha_{n,p}^*$ пов'язані з коефіцієнтами Зеєбека $\alpha_{n,p}$, що раніше використовувалися, наприклад, в (4.2)-(4.2), такими співвідношеннями:

$$\alpha_{n,p}^* = \alpha_{n,p} \pm \frac{1}{e} \frac{\partial \mu_{n,p}}{\partial T}, \qquad (5.48)$$

де знак "+" відповідає электронам, а знак "-" відповідає діркам. Другий доданок в правій частині (5.48) виникає завдяки явній температурній залежності електрохімічного потенціалу з $\nabla \delta \psi_{n,p}$ в (4.2)-(4.3).

Як і для стаціонарної термоерс, обмежимося наближенням квазінейтральності, зажадавши, щоб радіус Дебая був найменшим параметром завдання розмірності довжини, а максвелівський час релаксації — найменшим параметром розмірності часу [13, 82, 320, 321]. При виконанні цих умов об'ємний заряд в напівпровіднику відсутній: $\rho = e(p + n_t - n) = 0$.

Нехай домінуючим механізмом рекомбінації є міжзонна рекомбінація (при такому допущенні викладки виходять менш громіздкими): $R_n = R_p = R = \rho_{ib} (np - n_0p_0)$. Концентрації n_0 і p_0 являють собою концентрації електронів і дірок в стані термодинамічної рівноваги при температурі T_0 . В силу специфіки формування температурної хвилі з використанням інтерференційної техніки $T_0 > T_S$, де T_S - температура термостата (підкладки). Цей факт пов'язаний з тим, що випромінюванням можна нагріти зразок, але неможливо його остудити, тому середня температура хвилі завжди більше температури підкладки. Однак ця відмінність є несуттєва з фізичної точки зору. Припущення про домінування міжзонних переходів в розглянутій динамічній задачі означає, що концентрація заряджених домішок (які, можливо, присутні в зразку) не змінюється, тобто нерівноважний об'ємний заряд відсутній. Тоді нерівноважні концентрації електронів і дірок дорівнюють один одному: $\delta n = \delta p$ (див. [13] і розділ 2.3).

При квазінейтральності з (5.44)-(5.45) витікає $\partial j/\partial x = 0$, де $j = j_n + j_p$ -густина електричного струму. Складаючи (5.46) і (5.47), отримаємо:

$$j(t) = \sigma E + k_B T \left(u_n - u_p \right) \frac{\partial \delta n}{\partial x} + \left(\alpha_n^* \sigma_n + \alpha_p^* \sigma_p \right) \frac{\partial T}{\partial x}.$$
 (5.49)

Систему диференціальних рівнянь (5.44)-(5.45) необхідно доповнити ГУ. Щоб виключити вплив процесів на контакті, в якості ГУ виберемо періодичні ГУ. З фізичної точки зору такий вибір еквівалентний з'єднанню кінців пластини між собою, тобто формуванню циліндра або кільця. Таким чином ми отримуємо однотипне (що не містить інших середовищ, крім напівпровідника) замкнуте коло. Тоді:

$$n(0,t) = n(a,t), \quad \frac{\partial n(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial n(a,t)}{\partial x},$$
 (5.50)

$$E(0,t) = E(a,t), \quad \varphi(0,t) = \varphi(a,t).$$
 (5.51)

Слід врахувати, що для розглянутого температурного поля також тотожно виконується умова T(0,t) = T(,t).

Останню ГУ в (5.51) зручно переписати в вигляді:

$$\int_{0}^{a} E \,\mathrm{d}x = 0. \tag{5.52}$$

Тоді, виразивши з (5.49) електричне поле E і підставивши його в (5.52), отримаємо:

$$j(t) = \left[k_B(u_n - u_p)\int_0^a \frac{T}{\sigma} \frac{\partial \delta n}{\partial x} dx + \int_0^a \frac{\alpha_n^* \sigma_n + \alpha_p^* \sigma_p}{\sigma} \frac{\partial T}{\partial x} dx\right] / \int_0^a \sigma^{-1} dx.$$
(5.53)

З вигляду (5.53), яке є точним (до сих пір ніде не робилося припущень про малість нерівноважних концентрацій), можна зробити два важливих висновки.

- 1. Першим ненульовим членом розкладання j(t) в ряд за ступенями малого параметра $\delta T/T_0$ ($\delta T = T T_0$) є квадратичний.
- 2. Для визначення j(t) з точністю до величин порядку $(\delta T/T_0)^2$ необхідно і достатньо знайти δn і E з точністю до $\delta T/T_0$, тобто досить вирішити лінеаризовану систему рівнянь (5.44)-(5.45).

З урахуванням вищесказаного, струм в колі може бути записаний в наступному вигляді:

$$j(t) = \frac{k_B(u_n - u_p)}{a} \int_0^a \delta T \frac{\partial \delta n}{\partial x} dx - \frac{e^2 u_n u_p(\alpha_p^* - \alpha_n^*)(p_0 - n_0)}{\sigma_0 a} \int_0^a \delta n \frac{\partial T}{\partial x} dx,$$
(5.54)

де σ_0 - провідність напівпровідника при температурі T_0 . При виведенні (5.54) опущені складові, що представляють собою повний диференціал в підінтегральних виразах, а також малі вищих порядків.

Лінеаризована система рівнянь (5.44)-(5.47) з урахуванням припущення квазінейтральності $\delta p = \delta n \ (\delta n \ll n_0, \ \delta n \ll p_0)$ має наступний вигляд:

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} - R, \qquad (5.55)$$

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x} - R, \qquad (5.56)$$

$$j_n = e u_n n_0 E + T_0 u_n \frac{\partial \delta n}{\partial x} + e u_n \alpha_n^* n_0 \frac{\partial \delta T}{\partial x}, \qquad (5.57)$$

$$j_p = eu_p p_0 E - T_0 u_p \frac{\partial \delta n}{\partial x} + eu_p \alpha_p^* p_0 \frac{\partial \delta T}{\partial x}, \qquad (5.58)$$

а вираз для міжзонної рекомбінації запишеться у вигляді:

$$R = \frac{1}{\tau} \left(\delta n - \varsigma \frac{n_0 p_0}{n_0 + p_0} \frac{\delta T}{T_0} \right), \qquad (5.59)$$

де $\tau^{-1} = \varrho_{ib}(n_0 + p_0)$; параметр ς , що описує температурну залежність швидкості теплової генерації, для невиродженого електронного газу дорівнює $\varsigma = 3 + \varepsilon_g/(k_B T_0).$

У наближенні першої гармоніки рішення системи рівнянь (5.55)-(5.57) будемо шукати в наступному вигляді:

$$\delta n = \delta n_0 + \delta n_s \sin \Phi + \delta n_c \cos \Phi, \qquad (5.60)$$

де $\delta n_{0,s,c}$ - константи, що підлягають визначенню, причому $\delta n_{0,s,c} \ll n_0$. Неважко переконатися, що ГУ (5.50) виконуються тотожно, а з ГУ (5.51) випливає, що $\delta n_0 = 0$.

Підставляючи (5.60) в (5.57)-(5.58) і виключивши E, отримаємо такий вираз для постійного електричного струму j_{dc} в колі:

$$j_{dc} = \frac{k}{2} \left[k_B (u_n - u_p) + \frac{e^2 u_n u_p (\alpha_p^* - \alpha_n^*) (p_0 - n_0)}{\sigma_0} \right] \delta n_s \delta T_0.$$
(5.61)

Той факт, що в однорідному ізотропному напівпровіднику в напрямку, перпендикулярному середньому тепловому потоку під дією змінного температурного поля з нульовим середнім градієнтом може з'явитися постійний термоелектричний струм, вкрай цікавий сам по собі. Відсутність в спектрі термоелектричного струму основної гармоніки, як і наявність постійної складової, є несподіваним і нетривіальним результатом, оскільки поява змінної складової здається природним наслідком періодичного перехідного процесу в колі. Тому є сенс докладно зупинитися на дослідженні постійної складової струму короткого замикання в даному термоелектричному колі.

5.3.3 Постійний термоелектричний струм в змінному періодичному температурному полі

Підставляючи (5.60) в (5.55)-(5.59), отримуємо систему алгебраїчних рівнянь. Вирішуючи останню, після нескладних, але досить громіздких перетворень отримуємо наступні вираження для концентрації нерівноважних носіїв:

$$\delta n_s = \frac{n_0 p_0}{n_0 + p_0} \frac{\left[e(\alpha_p^* - \alpha_n^*)\bar{k}^2 + \varsigma\right]\bar{\Omega}}{\bar{\Omega}^2 + \left(\bar{k}^2 + 1\right)^2} \frac{\delta T_0}{T_0},\tag{5.62}$$

$$\delta n_c = \frac{n_0 p_0}{n_0 + p_0} \frac{\left[e(\alpha_p^* - \alpha_n^*)\bar{k}^2 + \varsigma\right] \left(\bar{k}^2 + 1\right)}{\bar{\Omega}^2 + \left(\bar{k}^2 + 1\right)^2} \frac{\delta T_0}{T_0},\tag{5.63}$$

де введені нормалізовані хвильовий вектор і довжина температурної хвилі: $\bar{k} = kL_D, \bar{\Omega} = \Omega \tau; L_D = \sqrt{D_a \tau}$ - дифузійна довжина, $D_a = T_0 (n_0 + p_0) u_n u_p / \sigma_0$ - коефіцієнт амбіполярної дифузії.

З (5.61) з урахуванням (5.62) видно, що струм короткого замикання (і відповідна йому термоерс) містить внесок від двох механізмів. Перший, що за своєю формою аналогічний демберівский фотоерс, обумовлений різницею рухливості електронів і дірок та не залежить від $\alpha_{n,p}$. Слід підкреслити, що наявність цього доданка є нехарактерною для відомих механізмів термоерс. Друга складова динамічної термоерс залежить від коефіцієнтів Зеєбека напівпровідника. Однак, і тут є цікаві відмінності від статичної термоерс.

Так, цей доданок є пропорційним різниці коефіцієнтів Зеєбека електронів і дірок, а не ефективному коефіцієнту Зеєбека $(\alpha_n^* \sigma_n + \alpha_p^* \sigma_p) / \sigma_0$, як це зазвичай має місце в біполярному напівпровіднику. Варто звернути увагу, що подібного роду доданок з'являється і для статичної термоерс з урахуванням нерівноважних носіїв, див. E_1 (5.17).

По-друге, згідно з (5.61) внесок в термоелектричний струм, що залежить від різниці коефіцієнтів Зеєбека, є пропорційним різниці рівноважних концентрацій електронів і дірок. У свою чергу, це означає, що цей внесок для електронного та діркового напівпровідника має різні знаки, а у власному або компенсованому напівпровіднику взагалі не проявляє себе явно (проте, залежність від $\alpha_p^* - \alpha_n^*$ і в цьому випадку впливає на величину нерівноважної концентрації носіїв, див. (5.62)).

Також звернемо увагу, що струм в колі не залежить від довжини напівпровідника. Цей факт має просте пояснення. Кожен просторовий період температурної хвилі вносить свій адитивний внесок у формування ЕРС. При збільшенні довжини напівпровідника збільшується кількість періодів температурної хвилі, що вміщується в напівпровіднику, тому зростає сумарна термоерс. З іншого боку, зі зростанням довжини напівпровідника пропорційно зростає і його опір. В результаті, струм короткого замикання виявляється незалежним від довжини напівпровідника.

Проаналізуємо залежність концентрації нерівноважних носіїв і термоелектричного струму короткого замикання від параметрів температурної хвилі. Нагадаємо, що в рамках методу, який використовується, δn_c позначає амплітуду хвилі концентрації нерівноважних електронів і дірок, синфазної з температурною хвилею, а δn_s - зрушеної по фазі на $\pi/2$ (ортогональної) хвилі. Як видно з виразу (5.61), струм короткого замикання визначається величиною тільки ортогональної складової концентрації нерівноважних носіїв.

Зникнення струму при гранично високій швидкості руху температурної хвилі $j_{dc} \sim \Omega^{-1}$ при $\Omega \to \infty$ також цілком зрозуміло. В цьому випадку система не встигає слідувати за зміною температури, і ефективно ми маємо подобу статичній ситуації.

Таким чином, існує деяка оптимальна швидкість руху температурної хвилі, при якій величина даного ефекту максимальна. Неважко визначити величину швидкості температурної хвилі, при якій динамічний термоелектричний ефект виражений найбільшою мірою. Знаходячи екстремум δn_s в

виразі (5.62) як функції Ω, отримаємо:

$$v_{max} = \frac{1 + k^2 L_D^2}{k\tau}.$$
 (5.64)

Звертає на себе увагу гранично простий вигляд функціональної залежності (5.64). Цей факт дозволяє запропонувати використовувати розглянутий ефект для експериментального визначення дифузійної довжини і часу життя нерівноважних носіїв. Дійсно, знаходячи при різному просторовому періоді температурного розподілу (при різній довжині температурної хвилі) його швидкість руху, при якій струм в колі є максимальним, неважко розрахувати L_D і τ за формулою (5.64). Особливо просто і зручно це здійснюється при використанні експериментальної техніки рухомої інтерференційної картини, коли швидкість її руху і просторовий період можуть контролюватися незалежно: період — кутом нахилу зразка, швидкість — розладом частоти лазера щодо опорного пучка[38].

Проаналізуємо залежність величини термоелектричного струму короткого замикання від довжини температурної хвилі. Природно, що при $k \to 0$ термоелектричний струм лінійно зменшується і при k = 0 звертається в нуль, тому що в цьому випадку має місце однорідний розігрів напівпровідника. В протилежному граничному випадку $k \to \infty$ термоелектричний струм зникає як k^{-1} : при гранично малій довжині температурної хвилі розігрів можна вважати ефективно однорідним. Відповідно, так само має місце оптимальне значення довжини температурної хвилі, при якій динамічний термоелектричний ефект виражений найбільш сильно. Однак, на жаль, отримати настільки ж простий аналітичний вираз для оптимальної довжини температурної хвилі в загальному випадку неможливо, тому розглянемо деякі граничні випадки. Якщо для матеріалу зразка виконується умова $[3 + \varepsilon_g/(k_BT_0)]/[e(\alpha_p^* - \alpha_n^*)] \ll k^2L_D^2$, оптимальне значення довжини температурної хвилі визначається наступним виразом:

$$k_{max} = \frac{1}{L_D} \sqrt{1 + \sqrt{4 + 3\Omega^2 \tau^2}}.$$
 (5.65)

В протилежному граничному випадку $[3 + \varepsilon_g/(k_B T_0)]/[e(\alpha_p^* - \alpha_n^*)] \gg k^2 L_D^2$ (наприклад, в широкозонних напівпровідниках при низьких температурах) оптимальне значення довжини температурної хвилі дещо відрізняється:

$$k_{max} = \frac{\sqrt{3}}{3L_D} \sqrt{\sqrt{4 + 3\Omega^2 \tau^2} - 1}.$$
 (5.66)

Варто зазначити, що вищенаведений аналіз залежності величини термоелектричного струму короткого замикання від довжини температурної хвилі зроблений в припущенні про постійну величину $\Omega = kv$ (а не про постійну швидкість температурної хвилі v). Саме така ситуація характерна для інтерференційної методики створення неоднорідного нагрівання, в якій швидкість температурної хвилі зменшується зі зменшенням її довжини, тобто з ростом k ($v = \Lambda \Delta f$, де Δf - зсув частоти між двома променями лазера, див. [39]). При фіксованій же швидкості руху температурної хвилі ситуація виявляється дещо іншою. Зокрема, при $k \to \infty$ динамічний термоелектричний ефект не зникає, тому можливо таке поєднання параметрів напівпровідника, коли залежність струму від довжини хвилі стає монотонної. Звичайно, до граничного випадку $k \to \infty$ треба ставитися обережно, оскільки при цьому легко порушуються умови можливості генерації поперечної біжучої температурної хвилі в зразку (5.43). Проте, при виконанні умови $[3+\epsilon_g/(k_BT_0)]/[e(\alpha_p^*-\alpha_n^*)] \gg k^2 L_D^2$ екстремум у функціональній залежності $j_{dc}(k)$, як і раніше, має місце, а оптимальне значення довжини хвилі дається виразом $k_{max} = 1/L_D$.

Розглянутий динамічний термоелектричний ефект має ще одну цікаву властивість. Як видно з (5.62), якщо $\alpha_n^* > \alpha_p^*$, то при зміні k термоелектричний струм короткого замикання змінює знак при

$$k_{0} = \frac{1}{L_{D}} \sqrt{\frac{3 + \varepsilon_{g}/(k_{B}T_{0})}{e(\alpha_{n}^{*} - \alpha_{p}^{*})}}.$$
(5.67)

Фізичний сенс зміни знака полягає в наступному. При наявності в спочатку однорідному напівпровіднику температурної хвилі в ньому одночасно протікають два конкуруючі процеси: теплова генерація надлишкових носіїв (його інтенсивність визначається параметром ς і амплітудою температурної хвилі) і їх винесення в більш холодні області за рахунок градієнта температури (поки не будемо брати до уваги дифузію носіїв). Інтенсивність другого процесу визначається коефіцієнтами Зеєбека і градієнтом температури, а значить, як амплітудою, так і довжиною температурної хвилі. Можна підібрати таку довжину температурної хвилі $(k = k_0)$, що ці процеси компенсують один одного (звичайно, це вірно тільки в лінійному наближенні і гармонійному профілі температури). При цьому нерівноважні носії не виникають взагалі (множник $e(\alpha_p^* - \alpha_n^*)\bar{k}^2 + \varsigma$ в (5.62)-(5.63) звертається в нуль). По різні боки цього значення k_0 переважає то генерація носіїв, то їх винесення. Таким чином в точці максимуму температури має місце то мінімум, то максимум концентрації нерівноважних носіїв, що відповідає зрушенню фази на π , тобто означає різний знак термоерс.

Звернення струму в нуль при певному значенні довжини температурної хвилі дає можливість в одному експерименті, поряд з дифузійної довжиною і часом життя носіїв, визначати за допомогою (5.67) ширину забороненої зони напівпровідника (при відомих коефіцієнтах Зеєбека) або різницю коефіцієнтів Зеєбека для електронів і дірок (при відомій ширині забороненої зони).

На закінчення оцінимо величину термоелектричного струму короткого замикання. Вибравши оптимальну швидкість руху температурної хвилі згідно (5.64) для довжини хвилі порядку 1 мкм, вважаючи $\mu_n \sim 1500 \text{ см}^2/\text{B·c}$, $\mu_n \sim 500 \text{ см}^2/\text{B} \cdot \text{с}, n_0 \sim p_0 \sim 10^{11} \text{ см}^{-3}$, коефіцієнтів Зеєбека $\alpha_{n,p} \sim 1 \text{ мB/K}$, довжини амбіполярной дифузії близько 1 мкм, ширини забороненої зони напівпровідника 1 eB, при кімнатній температурі і $\delta T_0 \sim 1$ K, отримаємо густину постійного термоелектричного струму короткого замикання близько 10⁻⁷ A/см². Досить мала величина густини струму обумовлена вибором досить низької концентрації носіїв, близької до значення власної концентрації носіїв в кремнії. Такий вибір обумовлений тим, що співмножник $n_0 p_0 / (n_0 + p_0)$ в (5.62) швидко зменшується в міру зростання ступеня монополярності напівпровідника (тому що $n_0 p_0 = \text{const} [83, 105]$). У компенсованих напівпровідниках, де можна домогтися одночасно високої концентрації і електронів, і дірок, можна було б очікувати істотного збільшення величини термоелектричного струму. Однак, в цьому випадку під питанням опиняється вірність припущення про домінування міжзонної рекомбінації, найімовірнішою виявляється рекомбінація через домішкові центри, типу моделі Шоклі-Ріда-Холла [97, 100]. Цей випадок вимагає окремого дослідження. Також перспективними для прояву даного ефекту можуть бути вузькозонні напівпровідники з високим значенням власної концентрації носіїв струму.

Необхідно також зауважити, що отримана оцінка термоелектричного струму набагато перевищує характерні струми в експериментах по нестаціонарній фотоерс. Наведена вище груба оцінка свідчить, що даний ефект слід швидше розглядати як можливий спосіб експериментального вивчення напівпровідників, а не в якості основи для термоперетворювача. З іншого боку, термоелектричний струм, викликаний класичною термоерс в напівпровіднику з зазначеними вище параметрами при перепаді температури в 1 К і довжині зразка 1 см має на порядок менше значення.

5.4 Динамічна термоерс в тонкоплівкових напівпровідникових приладах

Розглянутий вище поперечний термоелектричний ефект проявляється в однорідному напівпровіднику малої товщини в змінному температурному полі. Ці умови якраз характерні для роботи сучасних пристроїв напівпровідникової електроніки. Тому, логічно припустити, що даний ефект може впливати на роботу напівпровідникового пристрою. Як випливає з (5.61)-(5.62), в монополярному напівпровіднику ефект виражений слабо, а у більшості сучасних електронних приладів активні ділянки мають саме монополярну провідність. Однак, даний висновок був отриманий в наближенні квазінейтральності (тобто для досить масивних зразків), яке може виявитися непридатним для аналізу роботи мікроелектронного пристрою. Тому необхідно визначити, чи можливий прояв подібного динамічного поперечного термоелектричного ефекту в однорідному монополярному напівпровіднику поза умов квазінейтральності. Відповідний розгляд наведено нижче.

За аналогією з попереднім підрозділом, досліджуємо формування термоерс в пластині однорідного монополярного напівпровідника *n*-типу, в якій зовнішнім нагрівом підтримується стаціонарний розподіл температури типу "біжучої хвилі" (5.26), як показано на рис. 5.5.

Електронна підсистема описується рівнянням безперервності (5.44) електричного струму, визначеного в (5.46).

Величина електричного поля *E* може бути знайдена з рівняння Пуассона:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{4\pi e}{\epsilon} \left(n_t - n \right), \qquad (5.68)$$

де для електронного напівпровідника n_t являє собою концентрацію позитивно заряджених донорних домішок У свою чергу, концентрація домішок n_t описується рівнянням безперервності:

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = -R_n. \tag{5.69}$$

Для визначення темпу рекомбінації скористаємося раніше розглянутої в Розділі 3 моделлю Шоклі-Ріда-Холла [97, 100], записавши її швидкість в нестаціонарних умовах у вигляді:

$$R_n = \rho_{SRH} \left[n \left(N_t - n_t \right) - n_t n_1 \right], \tag{5.70}$$

де ρ_{SRH} - коефіцієнт захоплення електронів провідності домішковими рівнями, інші позначення як в (3.20)-(3.22).

Як і раніше, доповнимо систему диференціальних рівнянь (5.44)-(5.69) періодичними ГУ, виключивши тим самим вплив контактуючих середовищ і процесів на контакті:

$$n(0,t) = n(a,t), \quad \frac{\partial n(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial n(a,t)}{\partial x},$$
 (5.71)

$$n_t(0,t) = n_t(a,t), \quad \frac{\partial n_t(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial n_t(a,t)}{\partial x},$$
 (5.72)

$$E(0,t) = E(a,t), \quad \varphi(0,t) = \varphi(a,t), \tag{5.73}$$

Фізично еквівалентний даній математичній моделі зразок можна представити у вигляді нескінченно довгого тонкостінного напівпровідникового циліндра з товщиною стінки h, радіусом $a/2\pi$, вісь Oz спрямована по радіусу циліндра, вісь Ox йде по його окружності, всередині циліндра знаходиться термостат, а на зовнішню поверхню падає модульований потік випромінювання, що гріє.

Знайти аналітичне рішення системи рівнянь (5.44)-(5.69) в загальному випадку неможливо, тому, як і раніше, скористаємося методом послідовних наближень, ввівши в розгляд нерівноважні концентрації $\delta n = n - n_0, \, \delta n_t = n_t - n_{t0}; \, \delta n \ll n_0, \, \delta n_t \ll n_{t0}.$

Теплова хвиля може породжувати в замкнутому колі електричний струм, що містить крім основної гармоніки Ω ще й вищі гармоніки, і постійну складову. Для порівняння з попереднім ефектом зосередимо увагу на вивченні постійної складової струму.

Оцінимо необхідний порядок розкладання в ряд, для знаходження величини постійного електричного струму в колі. Записавши умову $\varphi(0,t) = \varphi(L,t)$ як $\int_0^L E dx = 0$ і підставивши в неї E з (5.46), отримаємо:

$$\int_{0}^{a} \frac{j_n(x,t)}{n(x,t)} dx = k_B u_n \int_{0}^{a} \frac{T(x,t)}{n(x,t)} \frac{\partial \delta n(x,t)}{\partial x} dx.$$
(5.74)

При виведенні (5.74) були знехтувані члени, тотожно рівні нулю в силу періодичності ГУ (5.71)-(5.73).

З аналізу виразу (5.74) можна зробити висновок, що як і в біполярному напівпровіднику в умовах квазінейтральності, в монополярному напівпровіднику довільних розмірів першим ненульовим членом розкладання j_n в ряд за ступенями малого параметра $\delta T_0/T_0$ є квадратичний. Як і раніше, для визначення j_n з точністю до величин порядку ($\delta T_0/T_0$)² необхідно і достатньо знайти нерівноважні концентрації і електричне поле з точністю до $\delta T_0/T_0$, тобто вирішити лінеаризовану систему рівнянь такого вигляду:

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} - R_n, \qquad (5.75)$$

$$\frac{\partial \delta n_t}{\partial t} = -R_n. \tag{5.76}$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{4\pi e}{\epsilon} \left(\delta n_t - \delta n\right), \qquad (5.77)$$

де

$$j_n = e u_n n_0 E + k_B T_0 u_n \frac{\partial \delta n}{\partial x} + e u_n \alpha_n^* n_0 \frac{\partial \delta T}{\partial x}, \qquad (5.78)$$

а лінеаризований вираз для темпу рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла може бути представлений як:

$$R_n = \frac{\delta n}{\tau_n} - \eta_t \frac{\delta n_t}{\tau_n} - \varsigma_t \frac{n_0}{\tau_n} \frac{\delta T}{T_0}, \qquad (5.79)$$

где $\tau_n^{-1} = \varrho_{SRH}(N_t - n_{t0}), \ \eta_t = N_t/(N_t - n_0), \ \varsigma_t = \epsilon_t/T_0 + 3/2.$

Записавши нерівноважні концентрації у вигляді:

$$\delta n(\Phi) = \delta n_0 + \delta n_s \sin \Phi + \delta n_c \cos \Phi, \qquad (5.80)$$

$$\delta n_t(\Phi) = \delta n_{t0} + \delta n_{ts} \sin \Phi + \delta n_{tc} \cos \Phi, \qquad (5.81)$$

будемо шукати термоелектричний струм короткого замикання в вигляді:

$$j_n(\Phi) = j_{dc} + \frac{1}{2} \left\{ j_{ac} e^{i\Phi} + j_2 e^{2i\Phi} + \text{c.c.} \right\},$$
(5.82)

де с.с. позначають відповідні комплексно-спряжені члени, j_{dc} - постійна складова термоелектричного струму, j_{ac} - амплітуда основної гармоніки струму, j_2 - амплітуда гармоніки струму подвоєною частоти.

Підставляючи (5.80)-(5.81) в (5.46) і враховуючи (5.77), отримаємо такий вираз для постійного електричного струму в колі:

$$j_{dc} = \frac{k_B u_n k}{2} \left(\frac{1}{k^2 l_n^2} \frac{T_0}{n_0} (\delta n_s \delta n_{tc} - \delta n_c \delta n_{ts}) + (1 - e k_B^{-1} \alpha_n^*) \delta n_s \delta T_0 \right).$$
(5.83)

Підставляючи(5.80)-(5.81) в (5.75)-(5.79), отримуємо систему алгебраїчних рівнянь, рішення якої не представляє складнощів. Після ряду громіздких перетворень, отримуємо такий вираз для постійного струму в колі:

$$j_{dc} = \frac{\sigma_0 \bar{k} \bar{\Omega} k_B \delta T_0^2}{2e L_D T_0 F} \Biggl\{ e^2 \alpha_n^{*2} \bar{l}_n^4 \bar{k}^2 \left[(\eta_t + 1) \eta_t + \bar{\Omega}^2 \right] - ek_B^{-1} \alpha_n^* \bar{l}_n^2 \left\{ \varsigma_t (1 - \eta_t) - \bar{k}^2 \left[1 - \bar{l}_n^2 \left(\bar{\Omega}^2 + \eta_t (\eta_t - \varsigma_t + 1) \right) \right] + \varsigma_t \bar{l}_n^2 \bar{\Omega}^2 \right\} + \varsigma_t \left\{ 1 + \bar{l}_n^2 \left[\bar{k}^2 \left(1 - \eta_t \bar{l}_n^2 \right) + \bar{l}_n^2 \bar{\Omega}^2 - \varsigma_t \right] \Biggr\} \Biggr\}, \quad (5.84)$$

де $\bar{l}_n = l_n/L_D$, $\bar{k} = kL_D$, $L_D^2 = k_B T_0 u_n \tau_n/e$ - дифузійна довжина електронів, $\bar{\Omega} = \tau_n \Omega$, $\sigma_0 = e \mu_n n_0$ - повна провідність монополярного електронного напівпровідника (що збігається з провідністю електронної підсистеми),

$$F = \bar{\Omega}^2 \left\{ \bar{l}_n^4 \left[(\eta_t + 1)^2 + (\bar{k}^2 + 1)^2 - 1 \right] + 2\bar{l}_n^2 \bar{k}^2 + 1 \right\} + \left[\eta_t (1 + \bar{l}_n^2 \bar{k}^2) + 1 \right]^2 + \bar{l}_n^4 \bar{\Omega}^4.$$

З вигляду виразу (5.84) випливає, що є три джерела формування динамічного термоелектричного ефекту в однорідному монополярному напівпровіднику поза наближенням квазінейтральності. Перший — це класичне термоелектричне поле (цей внесок описується складовою, пропорційною α_n^*). Решта два обумовлені появою надмірної концентрації нерівноважних носіїв при неоднорідному нагріванні напівпровідника. У свою чергу, існує два шляхи виникнення нерівноважних носіїв: їх перерозподіл під впливом термоелектричного поля (член, пропорційний α_n^{*2}) і теплова генерація (член, що не залежить від α_n^*). Теплова генерація нерівноважних носіїв і лежить в основі на перший погляд парадоксального результату: величина динамічного термоелектричного ефекту може взагалі не залежати від коефіцієнта Зеєбека напівпровідника. Більш того, в колі може текти постійний електричний струм навіть при $\alpha_n^* = 0$.

Як і для біполярного напівпровідника, в ситуації, що розглядається, струм в колі не залежить від довжини напівпровідника з тієї ж причини.

З рівняння (5.84) видно, що якщо знехтувати рекомбінацією ($\rho_{SRH} \to 0$, тобто $\tau_n \to \infty$), то $\bar{\Omega} \to \infty$ і струм в колі прагне до нуля як $\bar{\Omega}^{-1}$. З цієї точки зору розглянутий ефект є аналогічним до фотоелектричних явищ, де критично важливе значення мають кінцеві часи життя і дифузійні довжини носіїв струму.

Розглянутий термоелектричний ефект також є суто динамічним. Термоелектричний струм в колі стає нулем, якщо швидкість руху температурної хвилі прагне до нуля ($j_{dc} \sim \Omega$ при $\Omega \to 0$). Також струм зникає при гранично високій швидкості руху температурної хвилі ($j_{dc} \sim \Omega^{-1}$ при $\Omega \to \infty$): система не встигає слідувати за зміною температури, ситуація ефективно подібна статичному випадку. Таким чином, і в монополярному напівпровіднику існує деяка оптимальна швидкість руху температурної хвилі, при якій величина даного ефекту максимальна.

Аналогічний висновок є вірним і для залежності величини термоелектричного струму від просторового періоду температурної хвилі. Природно, що при $k \to 0$ постійний струм лінійно зменшується, стаючи нулем при k = 0, тому що в цьому випадку має місце однорідний розігрів напівпровідника. В протилежному граничному випадку $k \to \infty$ термоелектричний струм прагне до нуля як k^{-1} : при гранично малій довжині температурної хвилі розігрів можна вважати ефективно однорідним. Відповідно, також має місце оптимальне значення періоду температурної хвилі, при якій динамічний термоелектричний ефект у монополярному напівпровідниках з довільним відношенням характерних розмірів до довжині екранування виражений в максимальному ступені.

На жаль, отримати загальний аналітичний вираз для оптимальних значень Ω і k важко, тому проаналізуємо декілька важливих граничних випадків.

5.4.1 Дифузійне наближення

Розглянемо випадок, коли найменшим просторовим параметром є довжина екранування. Зокрема, виконується співвідношення $l_n \ll L_D$, тобто $\bar{l}_n \ll 1$. У літературі цей випадок також називають режимом часу життя, оскільки при цьому $\tau_n \gg \tau_M$, де $\tau_M = \epsilon/(4\pi\sigma_0)$ - максвелівський час релаксації. В цьому випадку вираз (5.84) істотно спрощується:

$$j_{dc} = \frac{\sigma_0 k_B T_0 \varsigma_t (N_t - n_0)^2 k \tau_n \Omega}{2e \left(n_0^2 + (N_t - n_0)^2 \tau_n^2 \Omega^2\right)} \left(\frac{\delta T_0}{T_0}\right)^2.$$
(5.85)

Як видно з виразу (5.85), постійний електричний струм в колі в даному випадку взагалі не залежить від величини коефіцієнта Зеєбека напівпровідника α_n^* . Цей дивний на перший погляд результат має просте фізичне пояснення. Як можна побачити, наприклад, з виразу (5.74), поява електричного струму в колі обумовлено наявністю зсуву фази між температурної хвилею і хвилями концентрацій електронів і домішкових зарядів. Причиною ж цього зсуву фаз є інерційність процесів теплової генерації нерівноважних носіїв з їх наступними дифузією і дрейфом в термоелектричному полі. З іншого боку, умова $l_n \ll L_D$ означає застосовність наближення квазінейтральності. З фізичної точки зору це означає, що в напівпровіднику відсутній об'ємний заряд: $\delta n = \delta n_t$. Таким чином, принципово відсутній зсув фаз між хвилями концентрацій електронів і концентрацією заряджених домішок. Однак, заряджені домішки нерухомі і не піддаються дрейфу в термоелектричному полі. Отже, зрушення фази їх концентраційної хвилі (а значить, і концентраційної хвилі заряджених домішок) не залежить від величини термоелектричного поля, тобто від α_n^* .

У дифузійному режимі залежність постійного струму від швидкості руху температурної хвилі має максимум при:

$$v_{max} = \frac{kn_0}{N_t - n_0} \frac{1}{\tau_n}.$$
(5.86)

При цьому максимальна величина постійного струму в колі дорівнює:

$$j_{dc}^{max} = \frac{k_B \varsigma_t k u_n (N_t - n_0)}{4T_0} \delta T_0^2.$$
 (5.87)

З (5.87) видно, що підвищення температури пригнічує розглянутий ефект, як через наявність T_0 в знаменнику (5.87), так і через наявність в чисельнику концентрації неіонізованної домішки $N_t - n_0$. При досить високій температурі всі донорні домішки виявляються іонізованими і динамічний термоелектричний ефект зникає.

Оцінимо величину розглянутого ефекту в дифузійному режимі. Так, вважаючи для сильно легованого кремнію з $N_t \sim 10^{18}$ см⁻³ (половина з яких іонізована) $u_n \sim 300$ см²/В·с, $\varsigma_t \sim 1$, і вибравши оптимальні параметри температурної хвилі з $k \sim 10^4$ см⁻¹, при кімнатній температурі і $\delta T_0 \sim 1$ К густина постійної складової струму становить близько 10 мA/cm².

Що стосується залежності густини постійного струму від просторового періоду, то в дифузійному режимі вона є монотонно зростаючою функцією *k*. Строго кажучи, максимум струму досягається при

 $k_{max} = 2l_n^{-1}\sqrt{((\eta_t + 1)\eta_t + \tau_n^2\Omega^2)/(\eta_t^2 + \tau_n^2\Omega^2)}$, коли порушується початкове положення дифузійного режиму про малість довжини екранування в порівнянні з іншими просторовими параметрами завдання, включаючи k^{-1} .

Спеціальне дослідження випадку дифузійного режиму, коли довжина температурної хвилі виявляється менше довжини екранування навряд становить інтерес, оскільки із зменшенням довжини температурної хвилі розглянутий ефект зменшується. Те ж вірно і для випадку, коли період температурної хвилі виявляється менше часу релаксації.

5.4.2 Наближення часу релаксації

Тепер розглянемо випадок, коли довжина екранування набагато перевищує довжину дифузії $l_n \gg L_D$, при цьому $\tau_M \gg \tau_n$. Цю ситуацію також можна назвати режимом об'ємного заряду, оскільки тепер весь напівпровідник охоплений шаром об'ємного заряду, і нерівноважні носії рекомбінують, не встигнувши сформувати квазінейтральний розподіл концентрації.

Вираз для постійної складової електричного струму в цьому режимі, як і раніше, залишається занадто громіздким для того, щоб їм можна було

легко оперувати. Тому розглянемо два окремих випадки: випадки високої і низької температур.

У разі досить високої температури практично усі донорні домішки іонізовані: $n_0 = n_{t0} \approx N_t$, тобто $\eta \gg 1$. Тоді постійний струм описується виразом:

$$j_{dc} = \frac{\sigma_0 \alpha_n^* (ek_B^{-1} \alpha_n^* - 1) \bar{k}^3 \bar{\Omega}}{2L_D (\bar{k}^4 + \bar{\Omega}^2)} \frac{\delta T_0^2}{T_0}.$$
(5.88)

Як видно з виразу (5.88), величина постійного електричного струму в колі пропорційна коефіцієнту Зеєбека напівпровідника, а при $\alpha_n^* = 0$ струм зникає. В даному граничному випадку динамічний термоелектричний ефект цілком визначається вищезгаданими механізмами, заснованими на термоелектричному полі. Відсутність доданка, пов'язаного з тепловою генерацією, є зрозумілим: оскільки спочатку усі домішки вже іонізовані, додатковий нагрів не приводить до виникнення нових носіїв.

З аналізу виразу (5.88) видно, що в цьому режимі при високих температурах існують оптимальні значення просторового періоду і швидкості руху температурної хвилі, при яких динамічний термоелектричний ефект виражений максимально: $v_{max} = k_B T_0 u_n k/e$, $k_{max} = 3^{1/4} \sqrt{e\Omega/k_B T_0 u_n}$. Оптимальне значення і швидкості хвилі, і її просторового періоду визначаються виключно коефіцієнтом дифузії електронів (тобто при відомій температурі рухливістю електронів). Таким чином, розглянутий ефект може бути використаний для прямого виміру рухливості носіїв. Максимальне значення струму в колі, що досягається при оптимальній швидкості температурної хвилі, складає:

$$j_{dc}^{max} = \frac{\sigma_0 k \alpha_n^* (e k_B^{-1} \alpha_n^* - 1)}{4T_0} \delta T_0^2.$$
(5.89)

Цікаво відзначити, що в цьому режимі, хоча величина струму зменшується з ростом температури (T_0 в знаменнику вираження (5.89)), на відміну від випадку квазінейтральності факт іонізації всіх домішок не призводить до придушення ефекту (пор. з виразом (5.87), що містить співмножник
$N_t - n_0$ в чисельнику).

Оцінимо величину динамічного термоелектричного ефекту в цьому випадку. Слід зазначити, що режим наближення часу релаксації більш характерний для некристалічних напівпровідників, що мають дуже низьку рухливістю носіїв, тому не слід очікувати появи значних величин термоелектричного струму. Взявши для прикладу параметри аморфного кремнію $\sigma_0 \sim 10^{-9}$ Ом⁻¹см⁻¹ для $k = 10^4$ см⁻¹ і $\delta T_0 = 1$ К при кімнатній температурі отримуємо густину струму близько 10^{-12} A/см², тобто того ж порядку, що і для ефекту нестаціонарної фотоерс в цих матеріалах [38].

При низьких температурах, навпаки, іонізована лише частина донорних домішок: $n_{t0} = n_0 \ll N_t$, тобто $\eta_t \gg 1$. Однак не можна забувати, що ми розглядаємо монополярний напівпровідник і наведений аналіз для низьких температур справедливий доти, поки концентрація електронів провідності істотно перевищує власну концентрацію носіїв в цьому напівпровіднику при даній температурі.

Постійний термоелектричний струм при низьких температурах дорівнює:

$$j_{dc} = \frac{\sigma_0 k_B (1 - ek_B^{-1} \alpha_n^*) \left[\varsigma_t \bar{k}^2 - (e\alpha_n^* \bar{k}^2 - \varsigma_t) \bar{\Omega}\right] \bar{k} \bar{\Omega}}{2L_D \left[\bar{k}^4 + (\bar{k}^2 + 2) \bar{k}^2 \bar{\Omega}^2 + \bar{\Omega}^4\right]} \frac{\delta T_0^2}{T_0}.$$
 (5.90)

Структура виразу (5.90) показує, що тепер вклад в формування струму вносить і теплова генерація носіїв. Динамічний термоелектричний ефект, як і раніше, відсутній у нерухомому температурному полі, а також зникає при гранично малому просторовому періоді температурної хвилі або занадто великий її фазової швидкості. Таким чином, як і раніше, існують оптимальні значення швидкості і просторового періоду температурної хвилі, що забезпечують максимальну величину термоелектричного постійного струму в колі. На жаль, екстремуми в виразі (5.90) вже не приймають простої форми, як це мало місце в попередніх випадках, тому навряд динамічний термоелектричний ефект в цьому режимі може бути використаний для експериментального знаходження параметрів напівпровідника.

Для грубої оцінки величини ефекту використовуємо експериментальні дані для легованого донорними домішками а – Si: H[39]: $\sigma_0 = 4.4 \cdot 10^{-9} \text{ Om}^{-1} \text{ cm}^{-1}, \tau_n = 5 \cdot 10^{-6} \text{ c}, L_D \sim 3 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$ при $T_0 = 120 \text{ K}$. Тоді для $\alpha_n^* \sim 10^{-3} \text{ B/K}, \varsigma_t \sim 100, \delta T_0 \sim 1 \text{ K}$, просторового періоду температурної хвилі порядку 10^4 cm^{-1} і її швидкості близько 0.1 см/с отримуємо густину постійного струму порядку 10^{-6} A/cm^2 , що знову-таки збігається по порядку величини з даними роботи [39] для динамічної фотоерс в цьому матеріалі.

Такий збіг на перший погляд різних за своєю природою ефектів можна пояснити наступним чином. Незважаючи на відмінність зовнішніх впливів, обидва ефекти мають споріднену природу: вони принципово неможливі в статиці. Причиною появи струму в колі є виникнення нерівноважних носіїв, розподіл яких має фазовий зсув по відношенню до зовнішнього впливу. Величина ж цього зсуву в першу чергу визначається загальними для обох механізмів параметрами — дифузійної довжиною і часом життя нерівноважних носіїв.

5.4.3 Змінний термоелектричний струм в динамічному термоелектричному ефекті

Проаналізуємо першу гармоніку змінного термоелектричного струму в колі, умови її існування та оцінимо її величину. Слід зазначити, що результати рішення системи рівнянь (5.75)-(5.79) можуть бути використані для отримання величини амплітуди змінного струму в колі тільки в першому порядку малості за $\delta T_0/T_0$.

Важливо відзначити, що при квазінейтральності змінної складової струму немає взагалі (як і в розглянутому вище випадку біполярного напівпровідника). Дійсно, як випливає з (5.44) і (5.69), при $\delta n = \delta n_t$ струм не залежить від координати: $\partial j_n / \partial x = 0$. Однак, в даній задачі всі фізичні величини залежать не від координати x, а від фази температурної хвилі $\Phi = kx + \Omega t$. Отже, при виконанні умови $\partial j_n / \partial x = 0$, тотожно виконується умова $\partial j_n / \partial t = 0$, тобто в колі існує тільки постійний струм. Точний розрахунок показує, що в дифузійному режимі амплітуда змінного струму зі зменшенням довжини екранування зникає як $(l_n/L_D)^2$.

У режимі об'ємного заряду амплітуда змінної складової дорівнює:

$$j_{ac} = \frac{\sigma_0 k_B \bar{l}_n^2 \bar{k} \bar{\Omega} \delta T_0}{e L_D \sqrt{F}} \sqrt{\left(e k_B^{-1} \alpha_n^* (\eta_t + 1) - \varsigma_t\right)^2 + e^2 k_B^{-2} \alpha_n^{*2} \bar{\Omega}^2}.$$
 (5.91)

Амплітуда змінного струму, як і постійний струм, звертається в нуль при нерухомій температурної хвилі, при однорідному нагріванні або при занадто малій її довжині. У той же час, на відміну від постійної складової, амплітуда змінного струму насичується з ростом швидкості руху температурної хвилі, досягаючи значення $\sigma_0 k \alpha_n^* \delta T_0$.

Оптимальна довжина температурної хвилі, при якій компонента першої гармоніки змінного струму як функція довжини хвилі досягає свого максимуму, дорівнює:

$$k_{ac}^{max} = \frac{1}{L_D} \sqrt[4]{\frac{\Omega^2 \tau_n^2 + (\eta_t + 1)^2}{\Omega^2 \tau_n^2 + \eta_t^2}} \Omega^2 \tau_n^2.$$
(5.92)

Проста форма виразу (5.92) дає принципову можливість використовувати розглянутий ефект для експериментального дослідження рухливості, часу життя і ступеня іонізації домішкових станів в напівпровіднику при низьких температурах. Як зазначалося вище, в цих умовах отримати таку інформацію за величиною постійного термоелектричного струму важко.

Оцінимо величину змінної складової для а – Si : Н при 120 К, поклавши $\eta_t = 1$. Для довжини хвилі з $k = 10^4$ см⁻¹ оптимальною частотою згідно (5.92) є $\Omega = 600$ Гц (фазова швидкість хвилі 0.6 мм/с). Тоді при $\sigma_0 = 4.4 \cdot 10^{-9}$ Ом⁻¹см⁻¹, $\tau_n = 5 \cdot 10^{-6}$ с, $L_D \sim 3 \cdot 10^{-7}$ см, $\alpha_n^* \sim 10^{-3}$ В/К, $\varsigma_t \sim 10$ и $\delta T_0 \sim 1$ К отримуємо амплітуду густини змінного струму порядку $4 \cdot 10^{-6}$ А/см². Таким чином, в режимі об'ємного заряду компонента змінного струму навіть перевершує постійну складову.

Незважаючи на те, що в силу дуже малої провідності аморфних напівпровідників (для яких наведені оцінки в режимі об'ємного заряду) абсолютна величина густини термоелектричного струму досить мала (хоча цілком достатня для надійної реєстрації в експерименті), супутні ефекту термоелектричні поля досить істотні. Використовуючи для дуже грубої оцінки співвідношення $j = \sigma_0 E$, отримуємо оцінку термоелектричного поля порядку $E \sim 10^3$ В/см.

5.5 Загальні властивості поперечного динамічного термоелектричного ефекту в напівпровідниках

Поширення біжучою температурної хвилі в однорідному напівпровіднику, незалежно від співвідношення концентрацій основних і неосновних носіїв, супроводжується появою електричного струму, що протікає в напрямку руху температурної хвилі. При цьому струм короткого замикання має як змінну, так і постійну складову. В умовах квазінейтральності змінна складова зникає, і в колі тече лише постійний електричний струм. Цей результат є досить незвичайним: адже в кожній точці напівпровідника має місце осцилююча температура, зовнішнє зміщення відсутне, а система не має випрямляючих властивостей на статичній ВАХ зразку.

Фізичною причиною розглянутого ефекту є поява фазового зсуву між хвилею концентрації нерівноважних носіїв і температурної хвилею в напівпровіднику. Даний фазовий зсув формується сукупним впливом ряду механізмів: інерційністю генераційно-рекомбінаційних процесів, а також дифузії і дрейфу в нерівноважному термоелектричному полі. Це обумовлює незвичайну властивість розглянутого динамічного термоелектричного ефекту: в загальному випадку величина термоелектричного струму короткого замикання містить доданок, що взагалі не залежить від коефіцієнта Зеєбека напівпровідника. Більш того, в умовах квазінейтральності цей доданок є домінуючим. Навпаки, в режимі об'ємного заряду при високих температурах $(L_D \ll l_n, n_0 \approx N_t)$ в монополярному напівпровіднику струм короткого замикання пропорційний коефіцієнту Зеєбека напівпровідника (хоча, присутній і додатковий внесок, що пропорційний квадрату коефіцієнта Зеєбека).

Величина постійної складової струму короткого замикання пропорційна квадрату амплітуди температурної хвилі. Амплітуда змінної складової термоелектричного струму лінійно залежить від амплітуди температурної хвилі. При цьому величина струму абсолютно не залежить від довжини напівпровідника.

Має місце суттєва немонотонна залежність величини ефекту від довжини температурної хвилі. Термоелектричний струм зникає при гранично малих $(\Lambda \to 0)$ і гранично великих $(\Lambda \to \infty)$ довжинах хвиль. Ефект також сильно залежить від швидкості руху температурної хвилі, звертаючись в нуль для нерухомого температурного розподілу. При гранично великій швидкості температурної хвилі постійна складова струму короткого замикання також звертається в нуль, в той час як амплітуда змінного струму виходить на насичення. Таким чином, мають місце оптимальні значення довжини температурної хвилі і швидкості її руху, при яких динамічний термоелектричний ефект проявляється найбільшою мірою. В умовах квазінейтральності, а також в режимі об'ємного заряду при високій температурі оптимальні значення довжини температурної хвилі і швидкості її руху визначаються простими виразами, що містять малу кількість параметрів напівпровідника. Ця обставина дає можливість при подальшому експериментальному розвитку використовувати розглянутий ефект для вимірювання параметрів напівпровідника (рухливості електронів, часу їх життя, ступеня іонізації домішкових

рівнів).

В біполярному напівпровіднику в разі, якщо коефіцієнти Зеєбека електронів і дірок задовольняють умові $\alpha_n^* > \alpha_p^*$, величина термоелектричного струму короткого замикання в колі змінює свій знак у міру зменшення довжини температурної хвилі. Значення довжини температурної хвилі, при якій відбувається зміна полярності, не залежить від швидкості руху температурної хвилі. Даний факт відкриває можливість вимірювання в єдиному експерименті ширини забороненої зони або коефіцієнтів Зеєбека одночасно з вимірюванням дифузійної довжини і часу життя носіїв струму.

Важливо відзначити, що в розглянутій модельній задачі тепловий потік з напівпровідника в термостат є ортогональним напрямку поширення температурної хвилі, а значить, термоелектричного струму і компоненті градієнта температури, що створює цей струм. Така конфігурація дозволяє припустити, що ефективність термоперетворювача на основі динамічного термоелектричного ефекту може бути вище традиційних термопар. Однак, на жаль, отримати коректну оцінку ефективності динамічного термоелектричного перетворювача в рамках використовуваної одновимірної моделі не можливо. Дійсно, по-перше, в даній моделі для виключення крайових ефектів використані періодичні граничні умови, тобто відсутні контакти, до яких можна було б підключити навантаження, що споживає генеровану в зразку термоелектричну енергію. По-друге, в режимі короткого замикання, в якому отримані теоретичні результати, в принципі електрична потужність, що передається в навантаження, дорівнює нулю. По-третє, не враховуються фізичні механізми, які відповідають за відбір теплової енергії, що надходить для перетворення її в електричну. У моделі весь потік тепла, що надійшов в напівпровідникову плівку, без втрат проходить через неї і в подальшому може бути утилізований традиційним термоперетворювачем. Амплітуда температурної хвилі є фіксованою і не залежить від струму в колі. Тим часом, наявність контактів і потоку електронів через них являє собою перший механізм відбору теплової енергії в процесі її перетворення в електричну. Другим фізичним механізмом, який може забезпечити споживання тепла (охолодження напівпровідника) при генерації термоелектричного струму є ефекти Томсона і ефект Пельтьє на контактах з металевими електродами в реальному термоперетворювачі.

Поперечний динамічний термоелектричний ефект проявляється навіть в однорідному напівпровіднику і не вимагає наявності контакту двох середовищ з різними значеннями коефіцієнта Зеєбека (більш того, величина ефекту може взагалі не залежати від коефіцієнта Зеєбека матеріалу), тобто в умовах, абсолютно нетипових для прояву звичайних термоелектричних ефектів. Тому, є можливим його прояв в абсолютно несподіваних ситуаціях. Беручи до уваги той факт, що функціонування великого числа сучасних мікропроцесорів супроводжується поширенням по кристалу температурних хвиль, контрольованих тактовою частотою і періодичністю навантаження, поява термоелектричних полів даної природи може служити серйозним джерелом шумів та перешкод в нормальному функціонуванні напівпровідникових пристроїв, зокрема, мікропроцесорів і мікросхем пам'яті. Тому може виявитися важливим враховувати розглянутий ефект при проектуванні нових високопродуктивних обчислювальних мікроелектронних приладів.

5.6 Висновки до Розділу 5

На підставі викладених в цьому розділі досліджень кінетичних явищ в неоднорідних температурних полях можна зробити наступні висновки.

 Традиційна теорія термоелектрики може бути застосовна для аналізу біполярних напівпровідників тільки в рівноважних умовах. У загальному випадку неможливо зробити розрахунок опору біполярного напівпровідникового зразка незалежно від розрахунку повного струму в замкнутому колі і величини термоерс. При наявності нерівноважних носіїв є необхідним коректне врахування відмінності електрохімічного потенціалу електронів і дірок та особливостей стаціонарної рекомбінації і контактних явищ на межі напівпровідника з металом, Викладена в цьому розділі теорія вирішує всі зазначені проблеми. Обчислені за новою теорією величини термоерс і опору напівпровідникового зразка збігаються з результатами традиційної теорії тільки в граничному випадку сильної рекомбінації. При кінцевої швидкості рекомбінації термоерс біполярного напівпровідникового зразка визначається не тільки коефіцієнтами Зеєбека електронів і дірок, а й параметрами рекомбінаційних механізмів. Опір зразка в цьому випадку також залежить від швидкості об'ємної і поверхневої рекомбінації.

- 2. У термоелектричному приладі, що включає в себе контакт діркового напівпровідника з нормальним металом, в разі слабкої рекомбінації величина термоерс і опір термоперетворювача визначаються неосновними носіями. При цьому термоерс слабо залежить від параметрів діркової підсистеми і середньої температури напівпровідника. Квазірівень Фермі електронів в такому випадку може бути немонотонною функцією координат. При певному поєднанні параметрів напівпровідника величина термоерс може змінювати знак з зростанням швидкості рекомбінації.
- 3. В однорідному напівпровіднику в нестаціонарному температурному полі можливий поперечний динамічний термоелектричний ефект, що полягає в появі ЕРС і електричного струму в напрямку фазової швидкості температурної хвилі. Ефект можливий як в біполярному, так і монополярному напівпровіднику. В ізотропному середовищі вектор термо-

електричного струму є ортогональним вектору середнього теплового потоку в напівпровіднику.

- 4. Величина динамічної термоерс немонотонним чином залежить від характеристик температурного поля: є оптимальні значення довжини і швидкості температурної хвилі, при яких поперечний динамічний термоелектричний ефект проявляється найбільшою мірою. Простий функціональний вид зв'язку екстремальних значень довжини і швидкості температурної хвилі з часом життя і рухливістю носіїв струму спрощує розробку на основі даного ефекту експериментальної методики одночасного вимірювання зазначених величин.
- 5. Термоелектричний струм в умовах поперечного динамічного термоелектричного ефекту в тонкоплівкових зразках містить основну гармоніку температурної хвилі, її вищі гармоніки і постійну складову. Амплітуда основної гармоніки пропорційна амплітуді температурної хвилі, величина постійної складової пропорційна квадрату амплітуди температурної хвилі. Термоелектричний струм не залежить від довжини напівпровідника. Вираз, що визначає його величину, містить доданок, який не залежить від коефіцієнтів Зеєбека електронів і дірок.
- 6. У тонкоплівковому монополярному термоперетворювачі домінує змінна складова термоелектричного струму. При переході до квазінейтральності основна гармоніка термоелектричного струму зникає, постійна складова зберігається. Величина поперечного динамічного термоелектричного ефекту залежить від ступеня монополярності напівпровідника, найбільш сприятливим для нього є власний або компенсований напівпровідник.
- При
 α^{*}_p > *α*^{*}_p величина динамічної термоерс змінює знак з зростанням довжини температурної хвилі.

РОЗДІЛ 6 ФОТОТЕРМІЧНІ ПРОЦЕСИ В БІПОЛЯРНИХ НАПІВПРОВІДНИКАХ

6.1 Вивчення властивостей провідних середовищ фотоакустичним методом

Опромінення зразка модульованим світловим потоком приводить до виникненню температурного поля, що періодично змінюється в зразку. Ці поля сильно нагадують біжучі хвилі, що послужило причиною говорити про них як про температурні хвилі. Однак, процес поширення періодично повторюваних теплових імпульсів, при всій зовнішній подобі, ні в якому разі не є хвильовим процесом в строгому розумінні цього слова (див. докладніше [289, 322, 323]). Проте, цей термін досить зручний і прижився в літературі. В цьому розділі, як і в попередніх підрозділах, присвячених динамічному термоелектричного ефекту, він буде застосовуватися до залежних від часу температурних полів, просторово-часовий профіль яких нагадує хвильовий процес, в тому числі до тих, що не є правильною біжучою хвилею.

Як було показано вище, змінне температурне поле в складному плазмоподібному середовищі, наприклад, в біполярному напівпровіднику, приводить до появи нерівноважних носіїв струму, що служить причиною прояву ряду ефектів: генерації термоерс, зміни опору зразка, тощо. Однак, змінне температурне поле в першу чергу впливає на фононну підсистему твердого тіла, породжуючи в ній і/або в навколишньому газоподібному середовищі збудження, що реєструються акустичними або іншими методами.

На відміну від термоелектричних ефектів, в яких кінетичні процеси в підсистемах носіїв струму проявляються безпосередньо, в ФАЕ носії струму виступають додатковим механізмом перенесення тепла і впливають на вимірюваний акустичний відгук побічно. Проте, в кількісній оцінці цей вплив може бути досить помітним. В зв'язку з цим представляється вкрай важливим досягнення максимальної відповідності фізичної моделі, що використовується для інтерпретації фотоакустичних вимірювань, реальним процесам поширення тепла в твердих тілах, і, в першу чергу, в напівпровідниках.

У напівпровідникових матеріалах ФАЕ є набагато більш складним і багатофакторним явищем, ніж в діелектриках, оскільки супроводжується інтенсивною взаємодією фононів з носіями заряду — електронами і дірками. Розглянемо процеси, які протікають в напівпровідниках, що опромінюються періодичним імпульсним світловим потоком. Схема типового експерименту з вивчення ФАЕ приведена на рис. 6.1. Світловий потік, що створюється потужним джерелом світла "1" (лазер, ксенонова лампа з монохроматізатором, тощо), модулюється по амплітуді модулятором "2" (в ролі якого може виступати механічний переривник-обтюратор) і потрапляє в фотоакустичну комірку "3" (див. рис. 6.1б). Фотоакустична комірка заповнена інертним газом (якщо вивчаються властивості твердого зразка), або газоподібним середовищем, що досліджується (в цьому випадку в ролі зразка виступає еталонне тверде тіло з відомими властивостями). У фотоакустичній комірці світло, пройшовши через прозоре для довжини хвилі обраного світла вікно "4", поглинається в твердому зразку "5", нагріваючи його, і як наслідок, викликаючи нагрівання і збільшення тиску газу "6" на поверхні зразка. Породжувана при цьому акустична хвиля реєструється мікрофоном "7". Сигнал з мікрофона, після синхронного детектування і посилення (блок "8") передається на реєструючий пристрій "9".

Якщо в якості зразка виступає біполярний напівпровідник, то взагалі кажучи, відмінність параметрів підсистем електронів і дірок, різна їх взаємодія з падаючим світлом приводять до того, що принаймні поблизу поверхні (на довжині остигання [119]) температури носіїв струму і фононів розрізняються. Як наслідок, за зразком поширюються одночасно три температурні хвилі (електронної, діркової та фононної температур), кожна зі своїми характеристиками.

У свою чергу, взаємодія підсистем носіїв, перш за все генераційно-рекомбінаційні процеси, являють собою додатковий механізм поширення тепла. Саме тому, в напівпровідниках вкрай важливим є врахування генерації і рекомбінації носіїв, особливо у випадках опромінення зразка випромінюванням, що сильно поглинається в напівпровіднику. Дійсно, в цьому випадку крім безпосереднього нагріву зразка світловим випромінюванням має місце практично поверхнева генерація електронно-діркових пар, які, дифундуючи вглиб зразка, вдалині від його поверхні через рекомбінацію виділяють поглинену енергію. Зрозуміло, що якщо теплопровідність кристалічної решітки невелика, а рухливість носіїв висока, то саме цей механізм поширення тепла може виявитися домінуючим.

Вперше роль рекомбінації в теорії ФАЕ була вивчена в роботах [324, 325]. Однак, в зазначених роботах не враховується зміна темпу теплової генерації носіїв при поширенні теплового імпульсу (теплової хвилі) в напівпровіднику і формуванні неоднорідного температурного розподілу [2, 6, 9]. Як було показано в Розділі 4.3, останній фактор є важливим фізичним механізмом нелінійності, що здатний істотно змінити концентрацію нерівноважних носіїв, а значить, і величину фотоакустичного відгуку. Детально стан і проблеми теорії ФАЕ були викладені в Розділі 1. Матеріали даного розділу розширюють і доповнюють існуючу теорію ФАЕ, дозволяючи підвищити точність фотоакустичних вимірювань і їх застосовність для біполярних напівпровідників в умовах слабкого збудження періодичним амплітудно-модульованим монохроматичним випромінюванням.



Рисунок 6.1 — Експериментальне дослідження ФАЕ. а). Схема експерименту. б). Конструкція фотоакустичної комірки. Цифрами позначено: 1 - джерело світла, 2 - модулятор, 3 - фотоакустична комірка, 4 - прозоре вікно, 5 - зразок, 6 - газ, 7 - мікрофон, 8 - синхронний детектор-підсилювач, 9 реєстратор

6.2 Фотоакустичний ефект в однотемпературному наближенні

6.2.1 Фізична модель ФАЭ

Перш за все необхідно відзначити, що в даній геометрії фотоакустичних досліджень, амплітуда і фаза акустичного сигналу пропорційні температурі на поверхні зразка, що опромінюється. Тому досить зосередити свою увагу на вивченні фототермічних процесів в зразку. Спочатку розглянемо фототермічні процеси в однорідному біполярному полупроводнике в одновимірному наближенні, вважаючи все фізичні величини в напрямках, перпендикулярних напрямку падіння світлового пучка, однорідними.

Модульоване по інтенсивності лазерне випромінювання падає на ліву

поверхню зразка x = 0, викликаючи як його нагрівання, так і генерацію електронно-дірковіх пар (якщо енергія фотонів перевищує ширину забороненої зони). Для спрощення аналізу припустимо, що випромінювання поглинається напівпровідником в шарі, значно більш тонкому, ніж товщина зразка і дифузійна довжина, тобто має місце практично поверхнева генерація носіїв і поверхневий безпосередній нагрів. Природно, при цьому мається на увазі, що частота лазерного випромінювання ω задовольняє умові фотогенерації: $\hbar \omega > \varepsilon_q$.

Якщо довжина остигання багато менше товщини зразка, то температури всіх трьох підсистем в кожній точці збігаються [120], а під дією освітлення в напівпровіднику поширюється єдина температурна хвиля (однотемпературна модель). Випадок термічно тонкого зразка (товщина напівпровідника менше або порядку довжини остигання) буде розглянуто нижче в підрозділі 6.4.

Поширення тепла в напівпровіднику в одновимірній задачі описується наступним добре відомим рівнянням [318, 319]:

$$\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{a_T} \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} + \frac{W_r(x,t)}{\kappa},\tag{6.1}$$

в якому доданок $W_r(x,t)$ описує виділення тепла в об'ємі зразка в результаті рекомбінації. Для звичайних (не безщілинних) напівпровідників $W_r(x,t) = \varepsilon_g R$, де R - темп рекомбінації електронно-діркових пар. Для напівпровідників з малою шириною забороненої зони і безщілинних напівпровідників замість ε_g в даному виразі з'являється більш складна функція температури.

Наведене співвідношення має на увазі, що енергія, яка виділяється в результаті рекомбінації, передається фононам безпосередньо в місці рекомбінації. Це з очевидністю має місце для безвипромінювальної рекомбінації, яка, як правило, домінує в широко поширених напівпровідниках. Однак і для випромінювальної рекомбінації, враховуючи зроблене припущення про вкрай сильне поглинанні світла напівпровідником, дане співвідношення залишається вірним.

Кінетика носіїв струму в сталому режимі описується в загальному випадку системою рівнянь перенесення (5.44)-(5.47) спільно з рівнянням Пуассона. В розглянутій геометрії задачі останнє має такий вигляд:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{4\pi e}{\epsilon} (p - n + n_t). \tag{6.2}$$

У рівнянні (6.2) вважається, що домішкові центри є донорами.

Для більшості відомих матеріалів в разі термічно товстого зразка також виконуються і умови квазінейтральності. Нюанси використання цього наближення в біполярних напівпровідниках в неоднорідному температурному полі були обговорені в Розділі 2.3. Для спрощення обмежимося розглядом міжзонної генерації носіїв струму при досить високих температурах, так, щоб домішкові рівні залишалися практично в рівноважному стані, тобто, щоб їх нерівноважна концентрація була мала в порівнянні з нерівноважною концентрацією носіїв струму. Як неодноразово підкреслювалося вище, в цьому випадку рівняння Пуассона стає зайвим, а нерівноважні концентрації носіїв пов'язані між собою алгебраїчним співвідношенням $\delta n = \delta p$. Тоді, виключаючи електричне поле з рівнянь для густини парціальних струмів (5.46)-(5.47) і враховуючи, що повний електричний струм в колі відсутній $(j = j_n + j_p = 0)$, можна отримати наступні вирази:

$$j_p = -j_n = -eD_a \frac{\partial \delta p}{\partial x} - A_a \frac{\partial T}{\partial x}, \qquad (6.3)$$

i

$$-\frac{\partial\delta p}{\partial t} + D_a \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} + \frac{A_a}{e} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - R(\delta p) = 0.$$
(6.4)

де введені амбіполярні характеристики напівпровідника:

$$D_a = (\sigma_p D_n + \sigma_n D_p) / (\sigma_n + \sigma_p), \ A_a = \sigma_n \sigma_p (\alpha_n^* - \alpha_p^*) / (\sigma_n + \sigma_p).$$

Третя складова в (6.4) враховує вплив термоелектричного поля на рух амбіполярного пакета носіїв. Раніше в задачах, що описуються в рамках наближення амбіполярної дифузії, цей доданок, як правило, не виписувався. Як зазначалося вище, слід звернути особливу увагу на коректне врахування процесу рекомбінації в умовах ФАЕ (тобто при поширенні температурної хвилі), так як цей механізм перенесення тепла в напівпровіднику може домінувати. Для опису рекомбінації скористаємося виразом (3.68). Слід зазначити, що вираз (3.68) був отриман при розгляді транспортних процесів в напівпровідниках при неоднорідній температурі в стаціонарних умовах і мав вирішити дві проблеми: забезпечити тотожне виконання умови div $\mathbf{j} = 0$ і врахувати зміну темпу термічної генерації електрон-діркових пар. Проте, вираз (3.68) отримано на підставі точного розгляду мікроскопічної моделі рекомбінації, тому він коректно враховує температурну залежність темпу теплової генерації і залишається придатним для нестаціонарної теорії транспортних процесів в лінійному наближенні за концентрацією нерівноважних носіїв.

Вперше ідея про можливий вплив розігріву зразка на темп теплової генерації була висловлена в роботі [324]. Однак, автори даної роботи обмежилися побудовою теорії ФАЕ в нехтуванні зазначеною обставиною, привівши недостатньо коректну оцінку значущості цього ефекту. До того ж вони знехтували впливом термоелектричного поля (другий доданок в рівнянні (6.4)), не давши відповідної оцінки (Хоча, як буде показано нижче, для більшості напівпровідників цим вкладом дійсно можна знехтувати).

З урахуванням квазінейтральності вираз (3.68) для даної задачі перепишемо в наступному вигляді:

$$R_n = R_p = R = \frac{\delta p}{\tau} + \beta_0 \delta T.$$
(6.5)

Підставляючи (6.5) в рівняння (6.1) і (6.4), отримаємо наступну систему рівнянь, що описує ФАЕ:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\varepsilon_g}{\kappa \tau} \delta p + \frac{\beta_0 \varepsilon_g}{\kappa} (T - T_0) = \frac{1}{a_T} \frac{\partial T}{\partial t}, \tag{6.6}$$

$$D_a \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} + \frac{A_a}{e} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\delta p}{\tau} + \beta_0 (T - T_0) = \frac{\partial \delta p}{\partial t}.$$
 (6.7)

Рівняння (6.6)-(6.7) повинні бути доповнені відповідними ГУ. Припускаючи, що вся теплова енергія падаючого випромінювання поглинається на поверхні x = 0, витрачаючись як на поверхневий нагрів напівпровідника, так і на поверхневу генерацію носіїв, отримаємо наступні ГУ на цій поверхні:

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=0} = Q_0 + \Delta Q_0 \mathrm{e}^{i\Omega t},\tag{6.8}$$

$$-D_a \frac{\partial \delta p}{\partial x}\Big|_{x=0} - \frac{A_a}{e} \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=0} = eg_I \left(I_0 + \Delta I_0 e^{i\Omega t}\right), \qquad (6.9)$$

де Q_0 - середнє значення енергії світлового потоку, що йде на безпосереднє нагрівання зразка; I_0 - середнє значення інтенсивності світлового потоку, що викликає фотогенерацію носіїв, а ΔQ_0 і ΔI_0 - амплітуди вказаних величин.

Взагалі кажучи, досить важко теоретично визначити значення частки енергії світлового випромінювання, що витрачаються на фотогенерацію носіїв і на безпосереднє нагрівання напівпровідника. Більш того, в загальному випадку ця пропорція може бути функцією температури поверхні зразка. Однак, в першому наближенні це відношення можна вважати постійним, оцінивши його з таких міркувань. Будемо вважати домінуючим механізмом поглинання світла міжзонне поглинання. При генерації електрон-діркової пари електрону провідності, що виникає, передається енергія фотона $\hbar\omega$. Далі електрон досить швидко термалізуєтся, віддаючи надлишкову енергію порядка $\hbar\omega - \varepsilon_g$ всій електронній підсистемі. В рамках однотемпературної моделі, що зараз розглядається, надлишкова енергія електронного газу негайно передається решітці. Таким чином, інтенсивність світлового випромінювання розподіляється між фотогенерацією носіїв і безпосереднім нагріванням наступним чином:

$$Q_0 = (\hbar\omega - \varepsilon_g)I_0, \quad \Delta Q_0 = (\hbar\omega - \varepsilon_g)\Delta I_0 \tag{6.10}$$

Необхідно також звернути увагу на те, що в реальних напівпровідниках, як правило, присутні механізми поверхневої рекомбінації носіїв. Вони є одним з факторів, що визначають, яка частка випромінювання йде на генерацію, а яка на нагрів зразка. Зокрема, при вкрай високій швидкості поверхневої рекомбінації всі згенеровані фотоносії рекомбінують безпосередньо на поверхні, віддаючи енергію кристалу. Це міркування відноситься до безвипромінювального механізму рекомбінації. Для випромінювальної рекомбінації, в силу припущення про сильне поглинання випромінювання зразком, маємо ефективно ту ж саму ситуацію: фотони, що випромінюються, поглинаються в місці їх виникнення з трансформацією енергії в теплову. Таким чином, в цьому граничному випадку $I_0 = \Delta I_0 = 0$ і вся енергія світлового потоку йде на нагрів зразка.

На межі x = a для досить товстого зразка, коли його товщина перевищує дифузійну довжину носіїв ($a \gg L_D = \sqrt{D_a/\tau}$), представляється очевидною наступна ГУ для концентрації носіїв:

$$\delta p|_{x=a} = 0. \tag{6.11}$$

Як теплову ГУ на цій поверхні приймемо стандартну умову для контакту зразка з термостатом [119]:

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=a} = \chi \left(T\big|_a - T_0\right). \tag{6.12}$$

Слід зауважити, що в ряді робіт у якості теплової ГУ використовується рівність температури в напівпровіднику температурі термостата. Такий вибір теплових ГУ представляється невиправданим, оскільки він передбачає нескінченну швидкість поверхневої теплопровідності, що є досить спірним з експериментальної точки зору.

Важливо підкреслити наявність в правій частині ГУ (6.8) на поверхні x = 0 статичної частини теплового потоку, що описує середню інтенсивність падаючого випромінювання (докладніше см. [322, 323, 326]). Саме цей вклад не був врахований в роботах [324, 325], що ускладнює зіставлення результатів, отриманих в зазначених роботах, з експериментальними даними,

тому що середня інтенсивність будь-якого модульованого світлового потоку завжди позитивна.

6.2.2 Просторово-часовий розподіл носіїв струму в умовах ФАЕ

У фототермічних експериментах найбільш поширеним механізмом створення теплових хвиль є поглинання зразком модульованого світлового пучка. При цьому статична частина теплового потоку на поверхні зразка, що пропорційна І₀, формує в зразку статичний температурний розподіл. Прямого впливу на реєструючий пристрій (мікрофон "7" на рис. 6.1) ця складова не робить. Однак, ця частина може впливати на розподіл носіїв струму, швидкість теплової генерації електрон-діркових пар, ефективно роблячи досліджуваний зразок неоднорідним. Саме тому *а priori* ігнорувати цю складову при побудові теорії ФАЕ недоцільно. Динамічна частина теплового потоку, яка породжена модуляцією світлового пучка $\Delta I_0 \exp(i\Omega t)$, безпосередньо породжує акустичні хвилі в газовому середовищі фотоакустичної комірки і залежне від часу температурне поле в зразку. У лінійному наближені температурне поле в зразку представляє собою суперпозицію статичної (обумовленої середньою інтенсивністю світлового потоку) і динамічної (обумовленої модуляцією світлового потоку) частин. Аналогічне твердження справедливе і для концентрації нерівноважних носіїв току:

$$T(x,t) = T_s(x) + T_d(x)e^{i\Omega t}, \qquad \delta p(x,t) = \delta p_s(x) + \delta p_d(x)e^{i\Omega t}, \qquad (6.13)$$

де індексами *s* и *d* позначені відповідно статична і динамічна частина відповідних величин.

Знайдемо спочатку статичну частину температурного поля в зразку.

Для подальших обчислень зручно перейти до безрозмірних величин. поклавши $X = x/L_D$, $p_s = \delta p_s/p_0$, $\theta_s = (T_s - T_0)/T_{\alpha}$, $\tilde{a} = a/L_D$ і ввівши параметри $b_T = T_{\alpha}/T_{\gamma}$, $T_{\alpha} = D_a \varepsilon_g p_0/\kappa$, $T_{\gamma} = p_0/\beta_0 \tau$, для статичної частини отримаємо наступну систему рівнянь:

$$\frac{\mathrm{d}^2 p_s}{\mathrm{d}X^2} - p_s + b_T \theta_s = 0, \tag{6.14}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta_s}{\mathrm{d}X^2} + p_s - b_T\theta_s = 0. \tag{6.15}$$

Зазвичай $A_a \varepsilon_g / e \kappa \ll 1$, що дозволяє знехтувати впливом термоелектричного поля в рівняннях (другий доданок в рівнянні (6.4)). Безрозмірний параметр b_T враховує внесок теплової генерації і визначається температурною залежністю власної концентрації напівпровідника. При $\beta_0 \to 0 \ T_{\gamma} \to \infty$ і $b_T \to 0$.

ГУ для статичної частини мають такий вигляд:

$$\frac{\mathrm{d}p_s}{\mathrm{d}X}\Big|_{X=0} = -\tilde{I}_0; \qquad p_s|_{X=\tilde{a}} = 0; \tag{6.16}$$

$$\frac{\mathrm{d}\theta_s}{\mathrm{d}X}\Big|_{X=0} = -\tilde{Q}_0; \qquad \frac{\mathrm{d}\theta_s}{\mathrm{d}X}\Big|_{X=\tilde{a}} = -\tilde{\chi} \;\theta_s|_{X=\tilde{a}}, \tag{6.17}$$

де

$$\tilde{I}_0 = \frac{I_0 L_D}{D_a p_0}, \qquad \tilde{Q}_0 = \frac{Q_0 L_D}{\kappa T_\alpha}, \qquad \tilde{\chi} = \frac{\chi L_D}{\kappa}.$$

Система рівнянь (6.14)-(6.15) вирішується елементарно стандартними методами. Її рішення має такий вигляд:

$$p_s = C_{s1} + C_{s2}X + C_{s3}e^{\lambda_s X} + C_{s4}e^{-\lambda_s X}, \qquad (6.18)$$

$$\theta_s = b_T^{-1} C_{s1} + b_T^{-1} C_{s2} X - C_{s3} e^{\lambda_s X} - C_{s4} e^{-\lambda_s X}, \qquad (6.19)$$

де $\lambda_s^2 = \sqrt{b_T + 1}$, а константи інтегрування C_{s1-s4} дорівнюють:

$$C_{s1} = \frac{\left[b_T \lambda_s \tilde{a} \operatorname{sh}(\lambda_s \tilde{a}) + (1 + \tilde{\chi} \lambda_s^2 \tilde{a}) \operatorname{ch}(\lambda_s \tilde{a})\right] (\tilde{I}_0 + \tilde{Q}_0) - \tilde{I}_0 + b_T \tilde{Q}_0}{\lambda_s^3 \left[b_T \operatorname{sh}(\lambda_s \tilde{a}) + \tilde{\chi} \lambda_s \operatorname{ch}(\lambda_s \tilde{a})\right]} b_T,$$

$$C_{s2} = -\frac{\tilde{I}_0 + \tilde{Q}_0}{1 + b_T} b_T,$$

$$C_{s3} = \frac{\left[b_T (1 - e^{\lambda_s \tilde{a}}) - \tilde{\chi} \lambda_s\right] \tilde{I}_0 - b_T \left[e^{\lambda \tilde{a}} - 1 - \lambda_s (\tilde{\chi} - \lambda_s)\right] \tilde{Q}_0}{2\lambda_s^3 e^{\lambda_s \tilde{a}} \left[b_T \operatorname{sh}(\lambda_s \tilde{a}) + \tilde{\chi} \lambda_s \operatorname{ch}(\lambda_s \tilde{a})\right]},$$

$$C_{s4} = \frac{\left[b_T (e^{\lambda_s \tilde{a}} - 1) + \tilde{\chi} \lambda_s e^{\lambda_s \tilde{a}}\right] \tilde{I}_0 + b_T \left[e^{\lambda_s \tilde{a}} - 1 - \lambda_s e^{\lambda_s \tilde{a}} (\tilde{\chi} + \lambda_s)\right] \tilde{Q}_0}{2\lambda_s^3 \left[b_T \operatorname{sh}(\lambda_s \tilde{a}) + \tilde{\chi} \lambda_s \operatorname{ch}(\lambda_s \tilde{a})\right]}.$$

Розглянемо тепер динамічну частину температурного поля, яка безпосередньо формує фотоакустичний відгук. Для її опису неважко отримати наступну систему рівнянь:

$$\frac{\mathrm{d}^2 p_d}{\mathrm{d}X^2} - p_d - \imath \frac{\Omega}{\Omega_\tau} p_d + b_T \theta_d + \imath \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}} b_T \theta_d = 0, \qquad (6.20)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta_d}{\mathrm{d}X^2} + p_d - b_T\theta_d - \imath \frac{D_a}{a_T} \frac{\Omega}{\Omega_\tau} \theta_d = 0, \qquad (6.21)$$

де $\Omega_{\tau} = 1/\tau$, $\tilde{\Omega} = ea_T \beta_0 / A_a$. Вирази (6.20)-(6.21) є комплексними, *і* позначає уявну одиницю. Необхідно відзначити, що на відміну від електродинамічних систем, частота $\tilde{\Omega}$ не має чіткої фізичної інтерпретації в силу дифузійної природи системи, що розглядається.

ГУ для динамічної частини температурного розподілу мають такий вигляд:

$$\left. \frac{\mathrm{d}p_d}{\mathrm{d}X} \right|_{X=0} = -\Delta \tilde{I}_0; \qquad p_d|_{X=\tilde{a}} = 0; \tag{6.22}$$

$$\frac{\mathrm{d}\theta_d}{\mathrm{d}X}\Big|_{X=0} = -\Delta \tilde{Q}_0; \qquad \frac{\mathrm{d}\theta_d}{\mathrm{d}X}\Big|_{X=\tilde{a}} = -\tilde{\chi} \;\theta_d|_{X=\tilde{a}} \,, \tag{6.23}$$

де

$$\Delta \tilde{I}_0 = \frac{\Delta I_0 L_D}{D_a p_0}, \qquad \Delta \tilde{Q}_0 = \frac{\Delta Q_0 L_D}{\kappa T_\alpha}.$$

Аналогічно обчисленню статичної частини, для динамічної частини за стандартною методикою рішення систем лінійних диференціальних рівнянь отримаємо такі координатні залежності концентрації носіїв і температури в зразку:

$$p_d = C_{d1} e^{\lambda_{d1}X} + C_{d2} e^{-\lambda_{d1}X} + C_{d3} e^{\lambda_{d2}X} + C_{d4} e^{-\lambda_{d2}X}, \qquad (6.24)$$

$$\theta_d = F_1 C_{d1} e^{\lambda_{d1} X} + F_1 C_{d2} e^{-\lambda_{d1} X} + F_2 C_{d3} e^{\lambda_{d2} X} + F_2 C_{d4} e^{-\lambda_{d2} X}, \quad (6.25)$$

$$F_{1,2} = \left[b_T + i \frac{D_a}{a_T} \frac{\Omega}{\Omega_\tau} - \lambda_{d1,d2}^2 \right]^{-1}, \qquad (6.26)$$

$$\lambda_{d1,d2}^{2} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + b_{T} + i \left(1 + \frac{D_{a}}{a_{T}} \right) \frac{\Omega}{\Omega_{\tau}} \pm \sqrt{\left[1 - b_{T} + i \left(1 - \frac{D_{a}}{a_{T}} \right) \frac{\Omega}{\Omega_{\tau}} \right]^{2} + 4b_{T} \left(1 + i \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}} \right)} \right\}, \quad (6.27)$$

а константы інтегрування дорівнюють:

$$C_{d1} = \left\{ \left[\left(\tilde{\chi}(F_1 - F_2) - F_1 \lambda_{d1} \right) \operatorname{ch}(\lambda_{d2} \tilde{a}) - F_2 \lambda_{d2} \operatorname{sh}(\lambda_{d2} \tilde{a}) \right] \left(F_2 \Delta \tilde{I}_0 - \Delta \tilde{Q}_0 \right) + F_2 \lambda_{d1} \exp(\lambda_{d1} \tilde{a}) \left(F_1 \Delta \tilde{I}_0 - \Delta \tilde{Q}_0 \right) \right\} / \left(\lambda_{d1} C_5 \exp(\lambda_{d1} \tilde{a}) \right), \quad (6.28)$$

$$C_{d2} = \left\{ \left[\left(\tilde{\chi} (F_1 - F_2) + F_1 \lambda_{d1} \right) \operatorname{ch} (\lambda_{d2} \tilde{a}) - F_2 \lambda_2 \operatorname{sh} (\lambda_{d2} \tilde{a}) \right] \exp(\lambda_{d1} \tilde{a}) \times \left(\Delta \tilde{Q}_0 - F_2 \Delta \tilde{I}_0 \right) - F_2 \lambda_{d1} \left(\Delta \tilde{Q}_0 - F_1 \Delta \tilde{I}_0 \right) \right\} / \left(\lambda_{d1} C_5 \right) \right\}$$

$$(6.29)$$

$$C_{d3} = \left\{ \left[(\tilde{\chi}(F_1 - F_2) + F_2 \lambda_{d2}) \operatorname{ch}(\lambda_{d1} \tilde{a}) + F_1 \lambda_{d1} \operatorname{sh}(\lambda_{d1} \tilde{a}) \right] \left(\Delta \tilde{Q}_0 - F_1 \Delta \tilde{I}_0 \right) - \right.$$
(0.29)

$$-\exp(\lambda_{d2}\tilde{a})F_1\lambda_{d2}\left(\Delta\tilde{Q}_0 - F_2\Delta\tilde{I}_0\right)\right\} / \left(\lambda_{d2}C_5\,\exp(\lambda_{d2}\tilde{a})\right),\tag{6.30}$$

$$C_{d4} = \left\{ \left[\left(\tilde{\chi} (F_1 - F_2) - F_2 \lambda_{d2} \right) \operatorname{ch} (\lambda_{d1} \tilde{a}) + F_1 \lambda_{d1} \operatorname{sh} (\lambda_{d1} \tilde{a}) \right] \exp(\lambda_{d2} \tilde{a}) \times \right. \\ \left. \left. \left. \left(F_1 \Delta \tilde{I}_0 - \Delta \tilde{Q}_0 \right) + F_1 \lambda_{d2} \left(F_2 \Delta \tilde{I}_0 - \Delta \tilde{Q}_0 \right) \right\} \right] / \left(\lambda_{d2} C_5 \right),$$

$$(6.31)$$

$$C_{44} = \left. \left\{ \left[\left(\tilde{\chi} (F_1 - F_2) - F_2 \lambda_{d2} \right) + F_1 \lambda_{d2} \left(F_2 \Delta \tilde{I}_0 - \Delta \tilde{Q}_0 \right) \right] \right\} \right] / \left(\lambda_{d2} C_5 \right),$$

$$(6.31)$$

$$C_{5} = 2(F_{1} - F_{2}) \{F_{1} \operatorname{ch}(\lambda_{d2}\tilde{a}) [\tilde{\chi} \operatorname{ch}(\lambda_{d1}\tilde{a}) + \lambda_{d1} \operatorname{sh}(\lambda_{d1}\tilde{a})] - F_{2} \operatorname{ch}(\lambda_{d1}\tilde{a}) [\tilde{\chi} \operatorname{ch}(\lambda_{d2}\tilde{a}) + \lambda_{d2} \operatorname{sh}(\lambda_{d2}\tilde{a})]\}.$$
(6.32)

У граничному випадку ідеального теплового контакту зразка з задньою стінкою фотоакустичної комірки $(\chi \to \infty)$ вираз для динамічної частини температурного поля істотно спрощуються:

$$\theta_d = \frac{\Delta Q_0(b_T + \phi^2 - \lambda_{d2}^2) - \Delta I_0}{\lambda_{d1}(\lambda_{d1}^2 - \lambda_{d2}^2)} \operatorname{sch}(\lambda_{d1}\tilde{a}) \operatorname{sh}(\lambda_{d1}(\tilde{a} - X)) - \frac{\Delta Q_0(b_T + \phi^2 - \lambda_{d1}^2) - \Delta I_0}{\lambda_{d2}(\lambda_{d1}^2 - \lambda_{d2}^2)} \operatorname{sch}(\lambda_{d2}\tilde{a}) \operatorname{sh}(\lambda_{d2}(\tilde{a} - X)),$$

де

$$\phi^2 = i \frac{D_a}{a_T} \frac{\Omega}{\Omega_\tau},$$

$$\lambda_{d1,d2} = 2^{1/4} \left(1 + b_T + \phi^2 \pm \sqrt{(1 - b_T - \phi^2)^2 + 4b_T} \right)^{1/2}.$$

Подальше спрощення можливо в разі $b_T = 1$ и $\phi^2 \gg 1$. Тоді $\lambda_{d1} = \phi$, $\lambda_{d2} = 0$, а температура дорівнює:

$$\theta_d = \frac{\tilde{a} - X}{\phi^2} (\Delta I_0 - b_T \Delta Q_0) + \frac{\operatorname{sch}(\phi \tilde{a}) \operatorname{sh}(\phi (\tilde{a} - X))}{\phi^3} (\phi^2 \Delta Q_0 - \Delta I_0).$$

Неважко помітити, що розподіл електронної температури суттєво залежить від розміру зразка. Щоб проаналізувати цю залежність, введемо комплексні дифузійні довжини носіїв $l_D^2 = D_a \tau / (1 + i\Omega \tau)$ і фононів $l_T^2 = -ia_T / \Omega$. Тоді особливості прояву ФАЕ задаються співвідношеннями між довжиною зразка *a* і дифузійними довжинами L_D , l_D и l_T . Наприклад, якщо довжина дифузії порядку довжини зразка, але істотно перевищує довжину термодифузії ($a \sim L_D \sim l_D \gg l_T$), отримаємо:

$$T_d(x) = \frac{l_T}{\kappa} \mathrm{e}^{-x/l_T} \Delta Q_0 + \frac{l_T^2}{L_D^2} \left(a \operatorname{sch}(1) \operatorname{sh}(1 - x/a) - l_T \operatorname{e}^{-x/l_T} \right) \frac{\varepsilon_g}{\kappa} \Delta I_0. \quad (6.33)$$

Звертає на себе увагу той факт, що формула для розподілу температури складається з двох членів. Один з них враховує енергію пучка модульованого падаючого випромінювання, що перетворюється в тепло на поверхні зразка. Другий пов'язаний з густиною теплової енергії, що генерується в напівпровіднику за рахунок рекомбінації електронно-діркових пар.

Як видно з (6.33), складова температури, яка пов'язана з теплотою, що генерується на поверхні зразка, швидко зменшується до нуля зі збільшенням відстані від поверхні твердого тіла в порівнянні з компонентою, викликаної виділенням тепла при рекомбінації електрон-діркових пар.

Якщо довжина дифузії і довжина термодифузії одного порядку і істот-

де

но перевищують довжину зразка $(l_D \approx l_T \gg a)$, то:

$$T_d(x) = \frac{l_T}{\kappa} \left(\frac{a}{l_T} \operatorname{ch}(x/l_T) - \operatorname{sh}(x/l_T) \right) \Delta Q_0 + \frac{l_T^2}{2L_D^2} \frac{\varepsilon_g}{\kappa} \left(l_T x \operatorname{ch}(x/l_T) - (ax - l_T^2) \operatorname{sh}(x/l_T) \right) \Delta I_0. \quad (6.34)$$

У цьому наближенні коливання температури так само залежать і від модуляції потоку тепла, що безпосередньо надходить на поверхню напівпровідника, і від густини джерел тепла, які представлені рекомбінацією електронно-діркових пар, що дрейфують від освітленого торця напівпровідника. Це дає можливість в фотоакустичних експериментах отримати інформацію як про теплопровідність напівпровідника, так і про параметри дифузії носіїв струму.

Більш наочно проаналізовані вище закономірності можна побачити на рис. 6.2-6.4, які демонструють вплив розмірів зразка, поверхневої теплопровідності і частки енергії, що припадає на фотогенерацію носіїв, на величину фотоакустичного сигналу. Верхні рисунки(з індексом "а") відображають амплітудно-частотну характеристику (АЧХ) ФАЭ. Під амплітудою фотоакустичного сигналу (нормованою) на приведених рисунках розуміється величина $\tilde{\Theta} = \Theta/(\Delta \tilde{Q}_0 + \Delta \tilde{I}_0)$, де $\Theta = \sqrt{\text{Re}^2[\theta_d(0)] + \text{Im}^2[\theta_d(0)]}$. Нижні рисунки (з індексом "б") відображають фазово-частотну характеристику (ФЧХ) ФАЕ, при цьому фаза фотоакустичного сигналу визначена як $\vartheta = \arccos(\text{Re}[\theta_d(0)]/\Theta)/\pi$.

З виразів (6.24)-(6.32) випливає, що концентрація носіїв, а також розподіл температури істотно залежать від співвідношення між розміром зразка та довжиною термічного загасання $L_T = \sqrt{2a_T/\Omega}$. Наприклад, якщо товщина напівпровідника *a* менше L_T (квазістатична апроксимація), розподіл температури вздовж зразка є майже сталим. У цій ситуації час, що необхідний для нагрівання зразка є пропорційним його товщині, тому фаза сигналу монотонно збільшується зі збільшенням частоти модуляції (див. рис. 6.2).



Рисунок 6.2 — Частотна характеристика ФАЕ в зразках різної товщини. 1 - $\tilde{a} = 0.1, 2$ - $\tilde{a} = 1, 3$ - $\tilde{a} = 10$ ($b_T = 0, \tilde{\chi} = 1, \Delta \tilde{Q}_0 = \Delta \tilde{I}_0, D_a/a_T = 10^3$)



Рисунок 6.3 — Вплив поверхневої теплопровідності на частотну характеристику ФАЕ. 1 - $\tilde{\chi} = 0.2, 2 - \tilde{\chi} = 1, 3 - \tilde{\chi} = 5(b_T = 0, \tilde{a} = 1, \Delta \tilde{Q}_0 = \Delta \tilde{I}_0, D_a/a_T = 10^3)$

З іншого боку, при гранично високій частоті модуляції $L_T \ll a$ коливання температури експоненційно зменшуються в міру віддалення від поверхні напівпровідника. В цьому випадку час релаксації енергії системи залежить від частоти: $t_s \sim L_T \sim \Omega^{-1/2}$. При цьому фаза фотоакустичного відгуку зростає в міру збільшення частоти модуляції до тих пір, поки не досягне максимуму при деякій частоті, потім залишаючись практично незмінною. Таким чином, в тонких зразках в цілому ФАЕ є менш інерційним, причому ФЧХ є більш чутливою до частоти модуляції.

На рис. 6.3 нормалізований амплітудний і фазовий сигнал показані як функція нормованої частоти модуляції в випадках низької, середньої і високої поверхневої теплопровідності задньої стінки зразка в нехтуванні температурною залежністю швидкості теплової генерації носіїв. Як видно, амплітуда проявляє експонентну залежність від частоти, тоді як фаза має виражений максимум в низькочастотній області при малій поверхневій теплопровідності. Цей максимум зникає при гранично високій поверхневій теплопровідності. Збільшення поверхневої теплопровідності задньої стінки зразка робить його ефективно більш тонким, зменшуючи фазову затримку ФАЕ відгуку.

Нарешті, на рис. 6.4 наведено порівняння амплітудного і фазового сигналу для різних співвідношень між енергією випромінювання, що йде на нагрів і на фотогенерацію електрон-діркових пар. При вибраних параметрах задачі амплітуда теплової хвилі є найбільшою, а фаза сигналу має найменшу затримку в тому випадку, коли фотогенерація відсутня: $\Delta I_0 = 0$.

З фізичної точки зору абсолютно ясно, що зсув фази ФАЕ сигналу відрізняється в разі переважання безпосереднього поверхневого нагріву від випадку переважання поверхневої генерації носіїв. Природно, другий механізм збудження ФАЕ відгуку є більш інерційним, тому що потрібен додатковий час на передачу енергії фотоносіїв кристалічній решітці. Причина немонотонності фазової характеристики, яка характерна для випадку без-



Рисунок 6.4 — Вплив поверхневої генерації електрон-діркових пар на частотну характеристику ФАЕ. 1 - $\Delta \tilde{I}_0 = 0$, 2 - $\Delta \tilde{Q}_0 = \Delta \tilde{I}_0$, 3 - $\Delta \tilde{Q}_0 = 0$ $(b_T = 0, \tilde{a} = 1, \tilde{\chi} = 1, D_a/a_T = 10^3)$

посереднього поверхневого нагріву, також досить прозора. При підвищенні частоти модуляції зростає запізнювання ФАЕ відгуку, але одночасно зменшується "глибина проникнення" температурної хвилі в зразок. При деякій частоті, що відповідає максимуму фазової затримки ФАЕ відгуку, "глибина проникнення" температурної хвилі порівнюється з довжиною зразка. При подальшому підвищенні частоти модуляції світлового потоку вже тільки частина зразка бере активну участь у формуванні ФАЕ відгуку, що приводить до деякого зменшення фазової затримки з подальшим виходом на постійне значення.

6.2.3 Псевдо-резонансний ефект

Наведена вище теорія ФАЕ в біполярному напівпровіднику демонструє важливу роль неоднорідності термоелектричного поля і рекомбінації, що викликаються температурною хвилею. Величина і частотна характеристика ефекту істотно залежать від параметра b_T . Вирази (6.24)-(6.32), куди входить цей параметр, відрізняються однією цікавою властивістю. Як неважко переконатися, при виконанні умови $b_T = 1$ (тобто $\beta_0 = \kappa/D_a \varepsilon_g$) рішення має особливість на частоті $\Omega_R = 2a_T \Omega_{\tau}/(D_a - a_T) = 2a_T/(D_a - a_T)\tau$. Сам по собі факт появи такого роду резонансного ефекту в дифузійних системах є цікавим і вимагає додаткового дослідження. При виконанні зазначених резонансних умов можна було б очікувати зростання температури і амплітуди фотоакустичного сигналу, появи піку на АЧХ і ФЧХ ефекту. Однак таких явищ не відбувається в типових фотоакустичних експериментах. Щоб з'ясувати причину цього протиріччя, знайдемо розподіли температури і концентрації носіїв струму в резонансних умовах. Для простоти знехтуємо впливом термоелектричного поля ($A_a = 0$). Тоді:

$$p_r = (C_{r1} + C_{r2}X)e^{\lambda_r X} + (C_{r3} + C_{r4}X)e^{-\lambda_r X},$$
 (6.35)

$$\theta_r = -i(C_{r1} - 2i\lambda_r C_{r2} + C_{r2}X)e^{\lambda_r X} -$$

$$-\imath (C_{r3} + 2\imath\lambda_r C_{r4} + C_{r4}X) \mathrm{e}^{-\lambda_r X}, \tag{6.36}$$

$$\lambda_r^2 = 1 + \frac{\imath}{2} \left(1 + \frac{D_a}{a_T} \right) \frac{\Omega_R}{\Omega_\tau} = 1 + \imath \frac{D_a + a_T}{D_a - a_T}, \tag{6.37}$$

де константы інтегрування дорівнюють:

$$C_{r1} = -\left\{ \left[(\lambda_r \tilde{a} + 1 - 2i\tilde{\chi}\lambda_r)(i\Delta\tilde{Q}_0 - \Delta\tilde{I}_0) + 2i\lambda_r^2\Delta\tilde{I}_0 \right] \lambda_r \tilde{a} \exp(\lambda_r \tilde{a}) + \left[(i + 2\lambda_r^2)\operatorname{sh}(\lambda_r \tilde{a}) + 2\tilde{\chi}\lambda_r \operatorname{ch}(\lambda_r \tilde{a}) \right] \times (6.38) \times \left[(i + 2\lambda_r^2)\Delta\tilde{I}_0 + \Delta\tilde{Q}_0 \right] \right\} / \left[C_{r5}\lambda_r \exp(\lambda_r \tilde{a}) \right],$$

$$C_{r2} = \left\{ \left[\operatorname{sh}(\lambda_r \tilde{a}) - 2i\tilde{\chi}\lambda_r \operatorname{ch}(\lambda_r \tilde{a}) + \lambda_r \tilde{a} \exp(\lambda_r \tilde{a}) \right] \left(i\Delta\tilde{Q}_0 - \Delta\tilde{I}_0 \right) + 2i\lambda_r^2 \left[i\Delta\tilde{Q}_0 \operatorname{ch}(\lambda_r \tilde{a}) + \Delta\tilde{I}_0 \operatorname{sh}(\lambda_r \tilde{a}) \right] \right\} / \left[C_{r5} \exp(\lambda_r \tilde{a}) \right],$$

$$(6.39)$$

$$C_{r3} = \left\{ \left[(i+2\lambda_r^2) \operatorname{sh}(\lambda_r \tilde{a}) + 2\tilde{\chi}\lambda_r \operatorname{ch}(\lambda_r \tilde{a}) \right] \left[(i+2\lambda_r^2)\Delta \tilde{I}_0 + \Delta \tilde{Q}_0 \right] \exp(\lambda_r \tilde{a}) + \lambda_r \tilde{a} (1-\lambda_r \tilde{a} + 2i\tilde{\chi}\lambda_r) (i\Delta \tilde{Q}_0 - \Delta \tilde{I}_0) + 2i\lambda_r^3 \tilde{a}\Delta \tilde{I}_0 \right\} / (C_{r5}\lambda_r), \quad (6.40)$$

$$C_{r4} = \left(\left\{ \left[(2i\lambda_r^2 - 1)\Delta \tilde{I}_0 + i\Delta \tilde{Q}_0 \right] \operatorname{sh}(\lambda_r \tilde{a}) + 2 \left[\tilde{\chi}\lambda \left(i\Delta \tilde{I}_0 + \Delta \tilde{Q}_0 \right) + \lambda_r^2 \Delta \tilde{Q}_0 \right] \operatorname{ch}(\lambda_r \tilde{a}) \right\} \exp(\lambda_r \tilde{a}) + i\lambda_r \tilde{a} \left(i\Delta \tilde{I}_0 + \Delta \tilde{Q}_0 \right) \right) / C_{r5}, \quad (6.41)$$

$$C_{r5} = 2\lambda_r^2 \left[2i\lambda_r \tilde{a} + 4\tilde{\chi}\lambda_r \operatorname{ch}^2(\lambda_r \tilde{a}) + (i + 2\lambda_r^2)\operatorname{sh}(2\lambda_r \tilde{a}) \right].$$
(6.42)

Як можна переконатися, розглянута сингулярність не проявляється на частотній залежності амплітуди температури і в фотоакустичних експериментах не виявляється резонансний пік сигналу. Це пов'язано з тим, що рівняння (6.35)-(6.42) описують дифузійний процес, а не хвилеве явище. Проте, існування даної сингулярності є цікавим і гідним згадки.

6.3 Вплив теплової генерації носіїв струму на фотоакустичний відгук напівпровідника

Проаналізуємо вплив теплової генерації носіїв струму на фототермічні процеси в твердотільної плазмі. У напівпровідниках з низьким значенням концентрації власних носіїв (наприклад, в широкозонних напівпровідниках, аморфних напівпровідниках), якщо виконується критерій $n_i \ll k_B \kappa T_0^2 / D_a \varepsilon_g^2$, то температурною залежністю темпу теплової генерації носіїв можна знехтувати: $b_T \ll 1$.

У цьому разі вирази для констант інтегрування C_{s1} - C_{s4} переходять в добре відомі:

$$C_{s1} = \frac{(1 + \tilde{\chi}\tilde{a})(\tilde{I}_0 + \tilde{Q}_0)\mathrm{ch}\tilde{a} - \tilde{I}_0}{\tilde{\chi}\,\mathrm{ch}\tilde{a}}\tilde{a},$$

$$C_{s2} = -(\tilde{I}_0 + \tilde{Q}_0)\tilde{a},$$

$$C_{s3} = -\frac{\tilde{I}_0}{1 + \mathrm{e}^{2\tilde{a}}},$$

$$C_{s4} = \frac{\mathrm{e}^{2\tilde{a}}\tilde{I}_0}{1 + \mathrm{e}^{2\tilde{a}}}.$$

Аналогічне спрощення можна зробити і для динамічної частини температурного поля в біполярному напівпровідниковому зразку. Тоді вирази (6.26)-(6.32) приймають такий вигляд:

$$C_{d1} = -\frac{\Delta \tilde{I}_0}{\left[1 + \exp(2\lambda_{d1}\tilde{a})\right]\lambda_{d1}}, \qquad C_{d2} = \frac{\exp(2\lambda_{d1}\tilde{a})\Delta \tilde{I}_0}{\left[1 + \exp(2\lambda_{d1}\tilde{a})\right]\lambda_1},$$

$$C_{d3} = \frac{(\lambda_{d2} - \tilde{\chi})\mathrm{ch}(\lambda_{d1}\tilde{a}) \left(\Delta \tilde{Q}_0 - F_1 \Delta \tilde{I}_0\right) + F_1 \lambda_{d2} \exp(\lambda_{d2}\tilde{a}) \Delta \tilde{I}_0}{2F_2 \mathrm{ch}(\lambda_{d1}\tilde{a}) \left[\tilde{\chi} \mathrm{ch}(\lambda_{d2}\tilde{a}) + \lambda_{d2} \mathrm{sh}(\lambda_{d2}\tilde{a})\right] \lambda_{d2} \exp(\lambda_{d2}\tilde{a})},$$

$$C_{d4} = \frac{(\lambda_{d2} + \tilde{\chi})\mathrm{ch}(\lambda_{d1}\tilde{a}) \exp(\lambda_{d2}\tilde{a}) \left(\Delta \tilde{Q}_0 - F_1 \Delta \tilde{I}_0\right) + F_1 \lambda_{d2} \Delta \tilde{I}_0}{2F_2 \mathrm{ch}(\lambda_{d1}\tilde{a}) \left[\tilde{\chi} \mathrm{ch}(\lambda_{d2}\tilde{a}) + \lambda_{d2} \mathrm{sh}(\lambda_{d2}\tilde{a})\right] \lambda_{d2}},$$

$$\lambda_{d1}^2 = 1 + i \frac{\Omega}{\Omega_{\tau}}, \qquad \lambda_{d2}^2 = i \frac{D_a}{a_T} \frac{\Omega}{\Omega_{\tau}}.$$

У нехтуванні температурною залежністю теплової генерації ($b_T = 0$) температурне поле в зразку описується наступним виразом:

$$T_d(x) = \frac{l_T}{\kappa} \operatorname{sch}(a/l_T) \operatorname{sh}((a-x)/l_T) \Delta Q_0 + \frac{\varepsilon_g}{\hbar \omega} \frac{l_D^2 l_T^2}{L_D^2 \kappa (l_D^2 - l_T^2)} \Delta I_0 \times \\ \times \left[l_D \operatorname{sch}(a/l_D) \operatorname{sh}((a-x)/l_d) - l_T \operatorname{sch}(a/l_T) \operatorname{sh}((a-x)/l_T) \right], \quad (6.43)$$

Концентрація нерівноважних носіїв при цьому дорівнює:

$$\delta p_d = \frac{l_D \operatorname{sh}((a-x)/l_D)}{D_a \operatorname{ch}(a/l_D)} \frac{\Delta I_0}{\hbar \omega}$$

При порушенні критерію $n_i \ll k_B \kappa T_0^2 / D_a \varepsilon_q^2$ температурною залежністю темпу теплової генерації носіїв знехтувати не можна. Результати розгляду цього випадку представлені графічно на рис. 6.5. На ньому приведені частотні характеристики амплітудного і фазового сигналів, отримані з рівнянь (6.24)-(6.32) для різних значень температурної залежності темпу теплової генерації. Крива "1" відображає результати відомих теорій по тепловому транспорту в умовах ФАЕ [214, 215], які не враховують теплової генерації і термоелектричного поля. На рис. 6.5 наочно видно істотний вплив параметра b_T в низькочастотній області. При цьому, як випливає з рис. 6.5а, амплітуда фотоакустичного сигналу збільшується зі зменшенням температурної залежності швидкості теплової генерації носіїв в низькочастотному діапазоні, в високочастотній області амплітуда сигналу при цьому практично не змінюється. Фазова характеристика фотоакустичного сигналу (рис. 6.5b) має максимум при постійній швидкості теплової генерації в області низьких частот. Цей максимум пригнічується зі збільшенням параметра b_T . Таким чином, зміна темпу термічної генерації найбільш сильно впливає на фотоакустичний відгук в низькочастотній області, причому для фазової характеристики ця область частот дещо ширша і зміщена вгору по частоті модуляції світлового потоку. Значна температурна залежність коефіцієнта міжзонної рекомбінації приводить до придушення немонотонності ФЧХ ФАЕ в біполярному напівпровіднику.



Рисунок 6.5 — Вплив теплової генерації на амлітуду (a) і фазу (b) фотоакустичного сигналу. 1 - $b_T = 0, 2 - b_T = 0.1, 3 - b_T = 0.5, 4 - b_T = 1$ ($\tilde{a} = 1, \tilde{\chi} = 1, \Delta \tilde{Q}_0 = \Delta \tilde{I}_0, D_a/a_T = 10^3$)

6.4 Двотемпературна модель фотоакустичного ефекту

Інтенсивні імпульси лазерного випромінювання з енергією фотонів істотно більше ширини забороненої зони напівпровідника генерують значну кількість нерівноважних електронів і дірок. У міру дифузії вглиб зразка електрон-діркові пари рекомбінують, в результаті виступаючи другим джерелом тепла у напівпровіднику. Якщо $\nu \gg \nu_{ee} \gg \tilde{\nu}$ (тут ν - імпульсна частота релаксації, ν_{ee} - частота міжелектронних зіткнень, $\tilde{\nu}$ - енергетична частота релаксації), нерівноважна електронна підсистема може бути описана розподілом Фермі-Дірака з температурою T_n [114, 266]. Аналогічним чином можна ввести нерівноважну температуру дірок T_p і фононів T_{ph} . Температури підсистем можуть бути знайдені за допомогою рівнянь теплового балансу для кожної підсистеми [113, 114, 266]:

$$\operatorname{div}\mathbf{Q}_n + P_{n-ph}(T_n - T_{ph}) + P_{n-p}(T_n - T_p) = -\rho_s c_n \frac{\partial T_n}{\partial t} + W_n, \qquad (6.44)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{Q}_{p} + P_{p-ph}(T_{p} - T_{ph}) - P_{p-n}(T_{n} - T_{p}) = -\rho_{s}c_{p}\frac{\partial T_{p}}{\partial t} + W_{p}, \qquad (6.45)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{Q}_{ph} + P_{ph-n}(T_n - T_{ph}) + P_{ph-p}(T_{ph} - T_p) = -\rho_s c_{ph} \frac{\partial T_{ph}}{\partial t} + W_{ph}, \quad (6.46)$$

де \mathbf{Q}_i - потоки тепла в *i*-ій підсистемі; P_{i-j} - параметр, що враховує обмін енергією між підсистемами *i* і *j*. Цей параметр пропорційний відповідній частоті релаксації енергії. W_i - густина джерела тепла рекомбінаційного походження в *i*-ій підсистемі квазічастинок.

Для спрощення викладок, обмежимося розглядом гранично сильної взаємодії між підсистемою дірок і фононів. Фізично це означає, що розсіювання дірок на фононах є непружним і більш ефективними в сенсі релаксації енергії, ніж розсіювання енергії всередині фононної підсистеми. У цьому наближенні $T_{ph} = T_p$ і рівняння (6.44)-(6.46) зводяться до наступних виразів:

$$-\frac{1}{\kappa_n} \operatorname{div} \mathbf{Q}_n - k_n^2 (T_n - T_{ph}) = \frac{1}{a_T^{(n)}} \frac{\partial T_n}{\partial t} - \zeta_n \frac{\varepsilon_g}{\kappa_n} R, \qquad (6.47)$$

$$-\frac{1}{\kappa}\operatorname{div}\mathbf{Q}_p - \frac{1}{\kappa}\operatorname{div}\mathbf{Q}_{ph} + k_l^2(T_n - T_p) = \frac{1}{a_T}\frac{\partial T_p}{\partial t} - (1 - \zeta_n)\frac{\varepsilon_g}{\kappa}R,\qquad(6.48)$$

де $a_T^{(n)}$ и κ_n - відповідно коефіцієнти температуропровідності і теплопровідності електронної підсистеми, $k_n^2 = (P_{n-p} + P_{n-ph})/\kappa_n$, $k_l^2 = (P_{n-p} + P_{n-ph})/\kappa$, ζ_n - частка енергії, що виділяється в акті рекомбінації в електронній підсистемі: $W_n = \zeta_n W_r$, $W_p + W_{ph} = (1 - \zeta_n) W_r$, $W_r = \varepsilon_g R$.

Потоки тепла в електронній і дірковій підсистемах можна виразити таким чином:

$$\mathbf{Q}_{n,p} = -\kappa_{n,p} \nabla T_{n,p} + \Pi_{n,p} \mathbf{j}_{n,p}, \qquad (6.49)$$

де П_{*n,p*} - коефіцієнт Пельтьє електронів і дірок. На відміну від носіїв струму, вираз для фононної підсистеми не містить доданків, що описують потік тепла Пельтьє:

$$\mathbf{Q}_{ph} = -\kappa \nabla T_p. \tag{6.50}$$

Рішення рівнянь (6.47) і (6.48) при відповідних ГУ дають розподіл електронної та фононної температур і повно описують транспорт тепла в напівпровіднику в нерівноважному стані. Для їх вирішення необхідно конкретизувати вид рекомбінаційного члена. У свою чергу, при цьому буде потрібно замкнути систему рівняннями безперервності для знаходження нерівноважних концентрацій носіїв струму. Для розглянутої двотемпературної моделі ФАЕ ці рівняння набувають такий вигляд:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n - R, \qquad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_p - R, \tag{6.51}$$

$$\mathbf{j}_n = \sigma_n \mathbf{E} + e D_n \nabla n + \sigma_n \alpha_n^* \nabla T_n, \qquad (6.52)$$

$$\mathbf{j}_p = \sigma_p \mathbf{E} - e D_p \nabla p + \sigma_p \alpha_p^* \nabla T_p.$$
(6.53)

На жаль, отримати строге аналітичне рішення системи рівнянь (6.47)-(6.53) неможливо. Тому обмежимося лінійним наближенням, вважаючи інтенсивність лазерного випромінювання малої. В геометрії задачі по рис. 6.1 (одновимірна задача), для квазінейтральності при досить високих температурах ($\delta n = \delta p$), в нехтуванні ефектом Томсона (внесок якого проявляється в вищих порядках теорії), для розімкнутого кола $\mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p = 0$, виключивши електричне поле, отримуємо наступне рівняння для діркового струму в колі:

$$j_p = -eD_a \frac{\partial \delta p}{\partial x} - \alpha_n^* \sigma_a \frac{\partial T_n}{\partial x} + \alpha_p^* \sigma_a \frac{\partial T_p}{\partial x}, \qquad (6.54)$$

де $\sigma_a = \sigma_n \sigma_p (\sigma_n + \sigma_p)^{-1}$.

Вираз (6.54) являє собою рівняння для густини амбіполярного струму, якому підпорядковуються нерівноважні концентрації електронів і дірок. Як видно, цей струм містить три складових: одна з них забезпечується дифузією носіїв, а дві інші відповідають градієнту температури в кожній підсистемі квазічастинок (електронів і дірок).

Після нескладних перетворень отримаємо наступну систему рівнянь:

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = D_a \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} + \frac{\alpha_n \sigma_a}{e} \frac{\partial^2 T_n}{\partial x^2} - \frac{\alpha_p \sigma_a}{e} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - R, \qquad (6.55)$$

$$\frac{\kappa_n^*}{\kappa_n}\frac{\partial^2 T_n}{\partial x^2} + \frac{\kappa_n^{(r)}}{\kappa_n}\frac{\partial^2 T_p}{\partial x^2} + \frac{\kappa_n^{(s)}}{\kappa_n}\frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} - k_n^2(T_n - T_p) = \frac{1}{a_T^{(n)}}\frac{\partial T_n}{\partial t} - \zeta_n\frac{\varepsilon_g}{\kappa_n}R, \quad (6.56)$$

$$\left(1 + \frac{\kappa_p^*}{\kappa}\right)\frac{\partial^2 T_p}{\partial x^2} + \frac{\kappa_p^{(r)}}{\kappa}\frac{\partial^2 T_n}{\partial x^2} - \frac{\kappa_p^{(s)}}{\kappa}\frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} + k_l^2(T_n - T_p) = \frac{1}{a_T}\frac{\partial T_p}{\partial t} - (1 - \zeta_n)\frac{\varepsilon_g}{\kappa_n}R, \quad (6.57)$$

де $\kappa_{n,p}^* = \kappa_{n,p} - \sigma_{n,p} \alpha_{n,p} \Pi_{n,p} + \sigma_{n,p} \sigma_a \alpha_{n,p} \Pi_{n,p} / \sigma_{p,n}, \ \kappa_{n,p}^{(r)} = \alpha_{n,p}^* \sigma_a \Pi_{n,p}, \ \kappa_{n,p}^{(s)} = -e \Pi_{n,p} D_a.$

З урахуванням зазначених вище припущень вираз для міжзонної ре-
комбінації в двотемпературній моделі (3.71) приймає наступний вигляд:

$$R_{n} = R_{p} = R = \frac{\delta p}{\tau} - \beta_{0}(T_{p} - T_{0}) + \beta_{n}(T_{n} - T_{p}) =$$
$$= \frac{\delta p}{\tau} - \beta_{0}^{*}(T_{p} - T_{0}) + \beta_{n}(T_{n} - T_{0}), \quad (6.58)$$

де введено параметр $\beta_0^* = \beta_0 + \beta_n$, що дозволяє виразити $(T_n - T_p)$ через $(T_n - T_0)$ і $(T_p - T_0)$.

Як і в однотемпературній теорії ФАЕ, в розглянутій задачі рівняння (6.55)-(6.57) необхідно доповнити фізично коректними ГУ на поверхнях зразка при x = 0 і x = a. При цьому необхідно мати на увазі, що тепер поверхневі теплофізичні параметри, що визначають перенесення тепла через поверхню напівпровідника, для підсистем носіїв струму і фононів розрізняються. Тому ГУ для кожної системи цих квазічастинок повинні бути призначені окремо. Таким чином, приходимо до наступних ГУ для даної геометрії фототермічної задачі:

$$Q_n|_{x=0} = \zeta_s \left(Q_0 + \Delta Q_0 e^{i\Omega t} \right), \qquad (6.59)$$

$$Q_{ph}|_{x=0} + Q_p|_{x=0} = (1 - \zeta_s) \left(Q_0 + \Delta Q_0 e^{i\Omega t} \right), \qquad (6.60)$$

$$T_n|_{x=a} = T_0, \qquad T_p|_{x=a} = T_0,$$
(6.61)

$$j_p|_{x=0} = e \left(I_0 + \Delta I_0 e^{i\Omega t} \right), \qquad \delta p|_{x=a} = 0.$$
 (6.62)

ГУ (6.59)-(6.62) можна зрозуміти таким чином. Кількість тепла, що виділяється на поверхні зразка, розподіляється в між підсистемами квазічастинок. Безрозмірний параметр ζ_s являє собою тепловий вихід для процесу нагрівання електронного газу (частку енергії лазерного випромінювання, що припадає на безпосереднє нагрівання електронної підсистеми). При цьому квантовий вихід для генерації електрон-діркових пар при поглинанні модульованого лазерного випромінювання становить одиницю. Для спрощення виразів, на відміну від вищевикладеного розгляду однотемпературної моделі, в (6.62) закладений ідеальний тепловий контакт всіх підсистем з термостатом і нескінченна поверхнева рекомбінація при x = a.

6.5 Електрон-фононна взаємодія в фотоакустичному ефекті

В невироджених напівпровідниках співвідношення між електронною і фононною теплопровідністю задовольняє співвідношенню $\kappa_n/\kappa_p \sim 10^{-3}$, тому електронна температуропровідність набагато більше, ніж діркова: $a_T^{(n)}/a_T^{(p)} \sim 10^4$ –10⁶ (див. [327]). Для подальшого спрощення виразів і більш наочного виділення фізичних наслідків відмінності температур носіїв струму, нижче обмежимося розглядом граничного випадку, коли нагріванню піддається тільки одна підсистема квазічастинок ($\zeta_s = 0$ або $\zeta_s = 1$), а уся температурна залежність темпу рекомбінації обумовлена саме різною температурою електронів і фононів ($\beta_n \gg \beta_0$). У цих наближеннях можна отримати явні аналітичні вирази для флуктуацій температур і концентрацій носіїв в двотемпературній моделі ФАЕ, однак, ці вирази дуже складні і візуально малоінформативні. Тому зручніше проаналізувати фізичні особливості ФАЕ в двотемпературному наближенні графічно.

На рис. 6.6 показана частотна залежність амплітуди флуктуацій температури на поверхні зразка для електронної і фононної підсистем при різних значеннях електрон-фононної енергетичної взаємодії. Частота модуляції лазерного випромінювання на рис. 6.6-6.8 нормована на час життя носіїв: $\Omega \tau$. Величина електрон-фононної енергетичної взаємодії може бути охарактеризована відношенням довжин дифузії L_D і енергетичної довжини остигання l_{ε} — безрозмірним параметром $b_f = L_D^2/l_{\varepsilon}^2$. Температурна залежність темпу рекомбінації, що задається параметром $b_{2T} = (\beta_n \varepsilon_g / \kappa_n) L_D^2$ є фіксованою, прямому нагріванню модульованим лазерним випромінюванням піддається тільки кристалічна решітка напівпровідника ($\zeta_s = 0$). Як можна помітити,



Рисунок 6.6 — Низькочастотна АЧХ ФАЕ при різній величині електронфононної взаємодії в відсутності прямого розігріву електронного газу. 1 амплітуда фононної температурної хвилі, 2–4 - амплітуда електронної температурної хвилі при 2 - $b_f = 100$, 3 - $b_f = 10$, 4 - $b_f = 1$ ($b_{2T} = 1$, $\zeta_s = 0$)

амплітуда фотоакустичного відгуку фононної підсистеми в цьому випадку монотонно зменшується з ростом частоти модуляції. Цей факт спрощує отримання інформації про електронні і фононні параметри напівпровідника в експериментах з ФАЕ. Необхідно підкреслити, що амплітуда фононної температури залишається практично незмінною при різних значеннях електронфононної енергетичної взаємодії. З іншого боку, амплітуда теплової хвилі в електронній підсистемі збільшується з ростом електрон-фононного зв'язку при фіксованому параметрі теплової генерації b_{2T} . Як і очікувалося, при досить сильному зв'язку фононної та електронної підсистем їх температури мало відрізняються, а ФАЕ задовільно описується вищевикладеною однотемпературною теорією.

На рис. 6.7 приведена частотна залежність амплітуди електронної та фононної температурних хвиль в граничному випадку, коли вся теплова енергія випромінювання передається електронній підсистемі ($\zeta_s = 1$). При цій умові флуктуації температури електронів і фононів майже незалежні від



Рисунок 6.7 — Високочастотна АЧХ ФАЕ при різній величині електронфононної взаємодії при прямому розігріві електронного газу. 1 - амплітуда фононної температурної хвилі, 2–4 - амплітуда електронної температурної хвилі при 2 - $b_f = 100$, 3 - $b_f = 10$, 4 - $b_f = 1$ ($b_{2T} = 1$, $\zeta_s = 1$)

частоти амплітудної модуляції лазерного випромінювання. Амплітуда температурної хвилі фононів, значно менше ніж амплітуда електронної температури в граничному випадку слабкої взаємодії електронів і фононів. Однак в разі сильної електрон-фононної енергетичної взаємодії вони стають однаковими.

Більш докладно залежність амплітуд електронної та фононної температурних хвиль від величини теплового виходу збудження ζ_s для фіксованої частоти модуляції наведена на рис. 6.8 при різних значеннях електрон-фононної енергетичної взаємодії. Як можна помітити, в цьому окремому випадку амплітуда електронної температурної хвилі, взагалі кажучи, перевищує амплітуду температурної хвилі в підсистемі фононів. Однак, ця ситуація змінюється в області малих значень параметра ζ_s на обраній фіксованій низькій частоті модуляції. Зокрема, існує критичне значення густини потоку теплової енергії, що передається підсистемі квазічастинок, нижче якого теплова хвиля, що розповсюджується в напівпровіднику, може буди описана в одно-



Рисунок 6.8 — Амплітуда фотоакустичного сигналу в залежності від перерозподілу енергії між підсистемами носіїв струму. 1 - амплітуда фононної температурної хвилі, 2–4 - амплітуда електронної температурної хвилі при 2 - $b_f = 1, 3 - b_f = 10, 4 - b_f = 100$ ($b_{2T} = 1, \Omega \tau = 0.001$)

температурному наближенні. Тому фотоакустичні експерименти при малій інтенсивності світлового потоку дають інформацію тільки про ефективні теплові параметри зразка, оскільки в цьому випадку в зразку поширюється єдина температурна хвиля, тобто виділити індивідуальний внесок кожної системи квазічастинок в фотоакустичний сигнал практично неможливо.

6.6 Висновки до Розділу 6

У цьому розділі було показано, що використання ГУ, які більш точно враховують умови проведення експерименту, спільно з урахуванням рекомбінаційних процесів приводить до результатів, що істотно відрізняється від раніше відомих.

1. Фотоакустичний відгук формується кількома конкуруючими механіз-

мами поширення тепла в напівпровідниковому зразку: теплопровідністю кристалічної решітки, теплопровідністю газу носіїв струму і дифузійно-рекомбінаційним механізмом передачі тепла. Вперше проаналізовано вплив термоелектричного поля і зміни темпу термічної генерації носіїв в неоднорідних температурних полях на величину фотоакустичний відгуку. В однотемпературному наближенні зазначені фактори проявляються найбільш значно в області низьких частот модуляції світлового потоку.

- 2. В тонких зразках в цілому ФАЕ є менш інерційним, причому фаза фотоакустичного сигналу є більш чутливою до частоті модуляції. Збільшення поверхневої теплопровідності задньої стінки зразка робить його ефективно більш тонким, зменшуючи фазову затримку ФАЕ відгуку.
- 3. За умови існування гарячих носіїв у зразку одночасно можуть поширюватися три температурних хвилі з різними параметрами. Амплітуда кожної з них сильно залежить від частки енергії світла, що припадає на нагрів електронного газу. Існує критичне значення потужності падаючого випромінювання, нижче якого фотоакустичний сигнал може бути охарактеризований лише ефективними теплофізичними параметрами.
- 4. Якщо домінує прямий нагрів електронного газу модульованим лазерним випромінюванням, амплітуда електронної температурної хвилі набагато перевищує амплітуду температурної хвилі в фононній підсистемі і практично не залежить від частоти модуляції світлового потоку. У випадку гранично сильної електрон-фононної взаємодії температури підсистем порівнюються.
- При нагріванні тільки фононної підсистеми амплітуда фотоакустичного сигналу монотонно зменшується в міру збільшення частоти модуляції лазерного випромінювання.

6. При сильній електрон-фононній взаємодії, за однаковою температурою носіїв струму і фононів ФЧХ ФАЕ може мати максимум в області низьких частот модуляції світлового потоку. Температурна залежність перетину міжзонної рекомбінації пригнічує немонотонність частотної залежності фази фотоакустичного сигналу.

Проведені дослідження дають більш глибоке розуміння природи ФАЕ, дозволяють запропонувати використовувати цей метод для вимірювання нових параметрів напівпровідників, зокрема, температурної залежності концентрації носіїв у власному напівпровіднику. Дослідження ФАЕ в умовах багатотемпературної моделі ($T_e \neq T_p$) відкриває можливість фотоакустичних вимірювань характеристик електрон-фононної взаємодії. Таким чином, може бути розширено коло явищ, доступних вивченню методом ФАЕ, а також підвищена точність вимірювання параметрів біполярних напівпровідників методом фототермічної спектроскопії.

РОЗДІЛ 7

ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ЯВИЩА В ОДНОРІДНІЙ ПЛАЗМІ НАПІВПРОВІДНИКІВ

У цьому розділі викладена теорія ряду фотоелектричних ефектів, які можуть проявлятися при впливі світлового пучка на однорідне плазмоподібне середовище. Як і раніше, в якості прикладу плазмоподібного середовища будемо розглядати напівпровідник. Під однорідністю середовища, якщо не зазначено інше, мається на увазі сталість рівноважної концентрації носіїв струму в об'ємі напівпровідника. Всі інші параметри (рухливість електронів і дірок, температурне поле та ін.) за винятком підрозділу 7.1 також вважаються просторово однорідними.

7.1 Просторова неоднорідність перетину розсіювання носіїв струму як механізм виникнення фотоерс

Розглянемо кінетичні явища, що приводять до появи фотоерс і фотоелектричного струму в замкнутому колі, яке складається з біполярного напівпровідника з однорідним розподілом електронів і дірок, але неоднорідною рухливістю одного з типів носіїв струму (для визначеності — електронів). Нехай пластина біполярного напівпровідника довжиною 2L, рівномірно освітлена на ділянці $-a \leq x \leq a$ (див. рис. 7.1). Будемо вважати напівпровідникову пластину в напрямку падіння світла досить тонкою, щоб можна було знехтувати залежністю швидкості генерації фотоносіїв від глибини проникнення світла. У напрямку перпендикулярному площині рисунка пластина необмежена, що дозволяє вважати всі величини в цьому напрямку однорідними. Рівноважна концентрація носіїв однорідна і дорівнює n_0 та p_0 для електронів і дірок відповідно. Рухливість дірок u_{p0} також однорідна, в той час як рухливість електронів виберемо такою, що залежить від координати *x* лінійним чином:

$$u_n = u_{n0} \left(1 + \beta_u \frac{x}{L} \right). \tag{7.1}$$

Тут величина u_{n0} характеризує середню рухливість електронів, а β_u - ступінь її неоднорідності. Зазначений просторовий розподіл рухливості електронів в реальному приладі може бути досягнуто неоднорідним легуванням нейтральними домішками. Останні, знижуючи рухливість електронів, не впливають на їх концентрацію, як і припущено в даній моделі. Їй також відповідає і неоднорідний розподіл дефектів кристалічної решітки, хоча цю ситуацію реалізувати практично складніше.



Рисунок 7.1 — Схема дослідження фотоелектричних явищ в біполярному напівпровіднику. Контурними стрілками позначений світловий потік

При таких припущеннях задачу можна вважати одновимірною, тому рівняння безперервності електронних і діркових струмів (4.1) можна записати в наступному вигляді:

$$\frac{\mathrm{d}j_n}{\mathrm{d}x} = e(R_n - G_n), \quad \frac{\mathrm{d}j_p}{\mathrm{d}x} = e(G_p - R_p), \tag{7.2}$$

причому при обчисленні густини парціальних струмів носіїв їх зручно виразити через електрохімічні потенціали (4.41).

Будемо вважати, що переважний внесок у фотогенерацію носіїв вносять безпосередні міжзонні переходи, тоді темп фотогенерації носіїв можна

$$G_n = G_p = \begin{cases} g_I I_0, & |x| \le a, \\ 0, & |x| > a, \end{cases}$$
(7.3)

де g_I - коефіцієнт пропорційності, що має розмірність зворотної довжини, пропорційний показнику поглинання середовища і характеризує ефективність генерації фотоносіїв світловим потоком інтенсивністю I_0 .

Якщо інтенсивність падаючого випромінювання не надто велика і викликана ним концентрація нерівноважних носіїв мала, можна скористатися лінійним наближенням дифузійно-дрейфової теорії. Тоді в стаціонарному стані для темпу міжзонної рекомбінації можна використовувати вираз (3.32). У термінах квазірівнів Фермі нерівноважних носіїв він може бути записаний як:

$$R_n = R_p = \frac{en_0}{k_B T \tau_n} (\delta \psi_p - \delta \psi_n). \tag{7.4}$$

Слід підкреслити, що в лінійному наближенні за концентрацією нерівноважних носіїв провідності електронів і дірок в виразах (4.41) визначаються рівноважними значеннями концентрацій носіїв струму, тобто не залежать від квазірівнів Фермі.

Підставляючи (7.3), (7.4) і (4.41) в рівняння (7.2), отримуємо наступну систему рівнянь:

$$\frac{\beta_u}{L}\frac{\mathrm{d}\delta\psi_n}{\mathrm{d}x} + \left(1 + \beta_u \frac{x}{L}\right)\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_n}{\mathrm{d}x^2} = -\lambda_n^2\left(\delta\psi_p - \delta\psi_n\right) + g_n,\tag{7.5}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_p}{\mathrm{d}x^2} = \lambda_p^2 \left(\delta\psi_p - \delta\psi_n\right) - g_p,\tag{7.6}$$

де $\lambda_{n,p}^{-2} = k_B T u_{n0,p0} \tau_{n,p} / e$ - зворотна довжина дифузії електронів і дірок, $g_n = G_n / u_{n0} n_0, \ g_p = G_p / u_{p0} p_0.$

Система рівнянь (7.5)-(7.6) являє собою систему лінійних диференціальних рівнянь другого порядку з змінними коефіцієнтами, і її рішення не може бути отримано аналітично. Тому скористаємося методом послідовних наближень, вважаючи неоднорідність рухливості електронів малою: $|\beta_u| \ll 1$. Тоді квазірівні Фермі можна представити у вигляді $\delta \psi_{n,p} = \delta \psi_{n0,p0} + \beta_u \delta \psi_{n1,p1}$.

За цих обставин система рівнянь нульового по β_u наближення запишеться у вигляді:

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_{n0}}{\mathrm{d}x^2} = -\lambda_n^2 \left(\delta \psi_{p0} - \delta \psi_{n0}\right) + g_n,\tag{7.7}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_{p0}}{\mathrm{d}x^2} = \lambda_p^2 \left(\delta \psi_{p0} - \delta \psi_{n0} \right) - g_p. \tag{7.8}$$

Перше наближення по β_u отримуємо, вирішивши систему рівнянь:

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_{n1}}{\mathrm{d}x^2} = -\lambda_n^2 \left(\delta \psi_{p1} - \delta \psi_{n1}\right) - \frac{1}{L} \frac{\mathrm{d}\delta \psi_{n0}}{\mathrm{d}x} - \frac{x}{L} \frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_{n0}}{\mathrm{d}x^2},\tag{7.9}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_{p1}}{\mathrm{d}x^2} = \lambda_p^2 \left(\delta \psi_{p1} - \delta \psi_{n1} \right). \tag{7.10}$$

При цьому в праву частину рівняння (7.9) необхідно підставити вираз для електрохімічного потенціалу електронів нульового наближення $\delta \psi_{n0}$, знайдений при вирішенні системи рівнянь (7.7)-(7.8).

Системи диференціальних рівнянь (7.7)-(7.8) і (7.9)-(7.10) необхідно доповнити ГУ. Як зазначалося вище, правильний вибір ГУ є вирішальним для коректного визначення величини фотоерс [91, 237]. З фізичної точки зору важливість вибору ГУ при дослідженні фотоелектричних явищ пояснюється тим, що в напівпровіднику кінцевих розмірів можлива ситуація, коли нерівноважні носії займають весь об'єм напівпровідника, доходячи до його меж. При цьому в зразку взагалі відсутній єдиний рівень електрохімічного потенціалу і введення самого поняття ЕРС в розімкнутому колі (яка визначається як різниця електрохімічних потенціалів на межах зразка) стає проблематичним. Ситуація подібна той, що обговорювалася в підрозділі 5.2: різниця електрохімічного потенціалу для електронів і дірок може відрізнятися, і незрозуміло, яку з величин прийняти за значення ЕРС. Щоб обійти ці складнощі, будемо розглядати замкнуте коло і знайдемо струм короткого замикання $j_0 = j_n(0) + j_p(0)$, який легко обчислюється по розрахованим електрохімічним потенціалам $\delta \psi_{n,p}$ відповідно до виразів (4.41).

Величину фотоерс \mathcal{E} , що відповідає знайденому току j_0 , можна оцінити по співвідношенню $\mathcal{E} = 2j_0L/\sigma_0$, де $\sigma_0 = e(u_{n0}n_0 + u_{p0}p_0)$ - темнова провідність напівпровідника. Однак, слід врахувати, що згідно з результатами розділу 4.5, опір зразка кінцевих розмірів у присутності нерівноважних носіїв може змінюватися. Тому для визначення точної величини \mathcal{E} , особливо в разі напівпровідникового кільця, де взагалі може бути відсутньою рівноважна область, необхідне додаткове дослідження.

Розглянемо два випадки: (а) замикання кола проводиться металевою ділянкою з малим опором, яким можна знехтувати; (б) замикання кола проводиться безпосереднім з'єднанням напівпровідникового зразка в точках $x = \pm L$, без використання іншого матеріалу (наприклад, електричне коло замикається шляхом формування напівпровідникового кільця чи циліндру).

7.1.1 Гетерогенне замкнуте електричне коло

На практиці найчастіше напівпровідниковий прилад має в своїй конструкції металеві електроди, за допомогою яких він підключається до електричного кола. З точки зору фізики ця обставина означає, що, по-перше, коло складається з ділянок з принципово різним типом провідності. Саме тому розглянутий випадок названий гетерогенним електричним колом. По-друге, наявність металу забезпечує наявність ділянки, в якій відсутні нерівноважні носії.

Якщо замикання електричного кола здійснено металевою ділянкою малого опору (яким знехтуємо), то, вважаючи поверхневу провідність гетероконтакту "напівпровідник-метал" гранично великою, ГУ можна записати в наступному вигляді:

$$\delta\psi_{n0,p0}(\pm L) = 0 \tag{7.11}$$

$$\delta\psi_{n1,p1}(\pm L) = 0 \tag{7.12}$$

для першого порядку методу послідовних наближень. ГУ (7.11)-(7.12) також відповідають випадку нескінченної швидкості поверхневої рекомбінації в площинах контакту напівпровідника з металом і відображають факт відсутності в металі нерівноважних носіїв.

Системи лінійних диференціальних рівнянь з постійними коефіцієнтами (7.7)-(7.8) і (7.9)-(7.10) елементарно вирішуються стандартними методами. Оскільки зовнішня генерація носіїв струму описується кусково-безперервною функцією координат виду (7.3), системи рівнянь (7.7)-(7.8) і (7.9)-(7.10) зручно вирішувати в кожній з областей $-L \leq x \leq -a, -a \leq x \leq a$ і $a \leq x \leq L$ окремо. Умовами зшивання отриманих рішень служать умови безперервності квазірівнів Фермі $\delta \psi_{n,p}$ і парціальних струмів носіїв $j_{n,p}$ в площинах $x = \pm a$. Неважко переконатися, що остання умова приводиться до умові безперервності першої похідної квазірівнів Фермі $d\delta \psi_{n,p}/dx$ в цих площинах.

Опускаючи досить громіздкі проміжні обчислення, приходимо до наступного результату для величини фотоерс в замкнутому колі:

$$j_0 = -\beta_u \frac{\lambda a \operatorname{ch}(\lambda L) - \operatorname{sh}(\lambda a)}{\lambda^2 L^2 \operatorname{ch}(\lambda L)} \frac{e g_I I_0}{\lambda}, \qquad (7.13)$$

де λ - зворотна довжина амбіполярної дифузії, $\lambda^2 = \lambda_n^2 + \lambda_p^2.$

Звертає на себе увагу дещо парадоксальний результат: величина фотоерс не залежить від того, в підсистемі основних або неосновних носіїв має місце неоднорідність рухливості. Поясненням фізичної причини цього явища може бути наступне. У ситуації, що розглядається, ми маємо справу зі стаціонарними транспортними процесами в умовах, близьких до генераційно-рекомбінаційної рівноваги. А як випливає з виразу для швидкості рекомбінації (3.32), вона пропорційна до відносної зміни концентрації носіїв. Таким чином, викликана неоднорідністю рухливості неосновних носіїв поява малої (в порівнянні з концентрацією основних носіїв, але не малою по відношенню до рівноважної концентрації неосновних носіїв) концентрації нерівноважних неосновних носіїв через зсув генераційно-рекомбінаційного балансу приводить до появи великої (в порівнянні з концентрацією неосновних носіїв) концентрації нерівноважних основних носіїв (що може бути порівняна з їх рівноважної концентрацією).

Варто також відзначити, що, на відміну від фотоерс, величина струму короткого замикання *j*₀ не залежить від провідності зразка.

Подальший аналіз виразу (7.13) зручно проводити в граничних випадках дифузійно товстого ($\lambda L \gg 1$) і дифузійно тонкого ($\lambda L \ll 1$) зразка. Як нескладно переконатися, в разі дифузійно товстого зразка вираз (7.13) перетвориться в:

$$j_0 = -\beta_u \frac{eg_I I_0}{\lambda^2 L^2} a. \tag{7.14}$$

Таким чином, в дифузійно товстому зразку величина фотоелектричного струму короткого замикання пропорційна довжині освітленої ділянки.

Присутність великого параметра $(\lambda L)^2$ в знаменнику виразу (7.14) свідчить про малість розглянутого ефекту в об'ємному напівпровіднику. І навпаки, наявність множника $(\lambda L)^2$ в знаменнику (7.13) означає, що найбільш сприятливими для прояву досліджуваного фотоефекту є саме тонкі напівпровідникові зразки. Так, в разі дифузійно тонкого зразка величина фотоерс визначається наступним виразом:

$$j_0 = -\beta_u e g_I I_0 \frac{a(3L^2 - a^2)}{6L^2}.$$
(7.15)

7.1.2 Напівпровідникове замкнуте електричне коло

Періодичні ГУ, що можуть бути застосовані в разі напівпровідникового кільця, мають наступний вигляд:

$$\delta \psi_{n,p}(-L) = \delta \psi_{n,p}(L), \quad j_{n,p}(-L) = j_{n,p}(L).$$
 (7.16)

Аналогічно тому, як це було зроблено вище, підставляючи в (7.16) вирази для струму (4.41) і квазірівнів Фермі в вигляді $\delta \psi_{n,p} = \delta \psi_{n0,p0} + \beta_u \delta \psi_{n1,p1}$, розділяючи складові, що містять і не містять β_u , отримаємо наступні ГУ для зразка в формі кільця:

$$\delta\psi_{n0,p0}(-L) = \delta\psi_{n0,p0}(L), \qquad (7.17)$$

$$\frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n0,p0}}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=-L} = \frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n0,p0}}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=L}$$
(7.18)

для нульового наближення і

$$\delta\psi_{n1,p1}(-L) = \delta\psi_{n1,p1}(L), \tag{7.19}$$

$$\frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n1}}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=-L} = \frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n1}}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=L} + 2\left.\frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n0}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=L},\tag{7.20}$$

(7.21)

для першого порядку методу послідовних наближень.

Величина фотоелектричного струму при цьому визначається наступним виразом:

$$j_0 = -\beta_u \frac{\lambda a \operatorname{sh}(\lambda L) - \lambda L \operatorname{sh}(\lambda a)}{\lambda^2 L^2 \operatorname{sh}(\lambda L)} \frac{e g_I I_0}{\lambda}.$$
(7.22)

Згідно (7.22) величини струму і фотоерс, як і раніше, не залежать від того, в якій підсистемі носіїв струму має місце неоднорідність рухливості. А величина струму короткого замикання j_0 так само не залежить від провідності зразка.

Ще одна цікава особливість розглянутого ефекту проявляється при повному освітленні напівпровідникового кільця (a = L). Дійсно, в цьому випадку нерівноважні носії присутні в кожній точці напівпровідника, весь об'єм зразка бере участь в утворенні фотоерс (фотоелектричного струму короткого замикання), тому на перший погляд логічно було б очікувати максимальної величини фотоерс. Однак, згідно з (7.22) в цьому випадку фотоерс зникає взагалі. При наявності в колі металевої ділянки, що забезпечує повну рекомбінацію нерівноважних носіїв на контакті з ним, фотоерс залишається відмінною від нуля і при освітленні всього напівпровідника. Таким чином, можна зробити висновок, що для утворення фотоерс необхідно існування ділянки напівпровідника, де нерівноважні електрони і дірки могли б дифундувати без впливу зовнішнього однорідного освітлення. Маючи різну рухливість, нерівноважні носії заряду в процесі дифузії створюють електричне поле, яке і викликає появу фотоелектричного струму.

Аналіз виразу (7.22) для граничних випадків дифузійно товстого зразка показує, що вираз (7.14) залишається справедливим і в разі напівпровідникового кільця, за умови, що є достатньо протяжна неосвітлена ділянка: $\lambda(L-a) \gg 1$. В протилежному випадку, коли практично весь напівпровідник виявляється засвіченим $\Lambda(L-a) \ll 1$, для визначення фотоерс можна використовувати наступну формулу:

$$j_0 = -\beta_u \frac{eg_I I_0}{\lambda L} (L-a), \qquad (7.23)$$

Таким чином, за відсутності металевих ділянок в електричному колі для дифузійно-товстого напівпровідникового зразка величина фотоерс виявляється пропорційною довжині неосвітленої ділянки.

У разі ж дифузійно тонкого зразка, величина фотоерс для кола з металом і напівпровідникового кільця розрізняються при будь-якому співвідношенні освітленої і темної області. В останньому випадку величина фотоерс, що виникає, може бути знайдена за формулою:

$$j_0 = -\beta_u e g_I I_0 \frac{a(L^2 - a^2)}{6L^2}.$$
(7.24)

Необхідно відзначити, що в розглянутих граничних випадках відріз-

няється функціональна залежність величини фотоерс від дифузійної довжини і розмірів зразка. Так, в масивних зразках фотоерс пропорційна квадрату дифузійної довжини і обернено пропорційна довжині напівпровідника. У той же час, в дифузійно тонких зразках залежність величини фотоерс від дифузійної довжини втрачається, а залежність від довжини зразка наближається до лінійної. Фізично таку метаморфозу легко пояснити для випадку з металевою ділянкою: оскільки на контактах з металом відбувається повна рекомбінація нерівноважних носіїв, при збільшенні дифузійної довжини до величини, що перевищує довжину напівпровідника, саме остання починає грати роль дифузійної довжини. На жаль, в випадку з напівпровідниковим кільцем важко дати настільки ж фізично ясне трактування.

З огляду на вищевикладене, можна зробити висновок, що з точки зору підвищення величини фотоерс вигідно збільшувати дифузійну довжину в напівпровіднику.

Цікаво відзначити, що при висвітленні дифузійно тонкого зразка вкрай вузькою смугою світла ("світлова щілина", $a \to 0$) відношення величин фотоерс для розглянутих двох типів ГУ прагне до сталого значення 1/3.

Також слід звернути увагу, що в дифузійно тонкому зразку величина фотоелектричного струму короткого замикання перестає залежати від параметрів напівпровідника (його провідності, довжини амбіполярної дифузії), за винятком ступеня неоднорідності рухливості β_u , і цілком визначається швидкістю фотогенерації носіїв. Можливо, ця особливість виявиться привабливою для експериментального дослідження величини квантового виходу фотоелектронів (що входить до параметру g_I).

Як і слід було очікувати, фотоелектричний ефект, що розглядається, істотно залежить від вибору ГУ, тобто від того, чи є в колі металева ділянка, яка пригнічує нерівноважні носії струму, або є можливість існування нерівноважних носіїв в будь-якій ділянці електричного кола. Причому ця різниця найбільш явно виражена в коротких напівпровідникових зразках.

Виявлені закономірності можуть бути важливими при проектуванні фотоперетворювачів і датчиків на полікристалічних і пористих напівпровідниках при оптимізації розмірів зерен і ступеня легування. Представляється кращим домагатися збільшення розмірів зерен, забезпечуючи високу рухливість всередині зерен і як якомога вищу швидкість рекомбінації носіїв на міжзеренних межах.

7.1.3 Зв'язок з фотоерс Дембера і об'ємною фотоерс

Говорячи про фізичну природу вивченого в цьому розділі фотоефекта, необхідно відзначити таку обставину. Розглядаючи дану постановку задачі (особливо при $a \ll L$) може виникнути бажання інтерпретувати описаний фотоелектричний ефект як суперпозицію добре відомої фотоерс Дембера [83, 328], що генерується ліворуч (-L < x < -a) і праворуч (a < x < L) від освітленої області, причому площини $x = \pm a$ грають роль освітленого торця зразка:

$$\mathcal{E} = -\frac{e}{\sigma_0} \frac{u_{n0} - u_{p0}}{u_{p0}} L_D g_s.$$
(7.25)

В (7.25) *g*^s означає швидкість генерації носіїв на освітленій поверхні напівнескінченного зразка в традиційному формулюванні ефекту Дембера [83, 328].

Ця фотоерс в лівій і правій частині зразка має різний знак (оскільки фотоносії дифундують з освітленої області в різні боки). У точках x = -aі x = a рухливість електронів різна, тому в такій інтерпретації величини фотоерс Дембера в лівій і правій частинах зразка відрізняються, вони не можуть компенсувати одна одну і в замкнутому колі виникає електричний струм. Міркуючи таким чином в разі дифузійно товстого зразка можна отримати вираз для величини розглянутого фотоефекту, що збігається з виразом (7.14).

Однак таке трактування розглянутого фотоефекту є помилковим. За-

лишимо за дужками питання про те, що взагалі кажучи, вираз (7.25) є некоректним в разі обмеженого біполярного напівпровідника [237, 238]. При отриманні (7.14) з (7.25) доводиться припустити, що швидкість поверхневої генерації, яка фігурує в (7.25), дорівнює $g_s = g_I I_0 L_D$, тобто усі носії струму в шарі товщиною порядку дифузійної довжини беруть участь в утворенні фотоерс на кожній межі освітленої області. Це припущення не є строго обґрунтованим. Дійсно, чому б, наприклад, не допустити, що тільки половина носіїв струму дифундує з цього шару в кожну неосвітлену частину напівпровідника? Крім того, для отримання (7.14) необхідно знехтувати співвідношенням між дифузійної довжиною електронів і дифузійної довжиною амбіполярної дифузії, що виправдано тільки в діркових напівпровідниках, в той час як вираз (7.14) є справедливим для будь-якого типу провідності зразка.

Але головне: збіг отриманого таким чином виразу з (7.14) можна розглядати як випадковість, тому що такий розрахунок заснований на абсолютно помилковому припущенні, що в дифузійно-товстому зразку процеси на лівій і правій межі освітленої області можна вважати незалежними. Щоб переконатися в помилковості такого припущення досить розглянути подібну задачу: фотоефект в повністю однорідному напівпровіднику (однорідний розподіл як концентрації носіїв, так і їх рухливості), нерівномірно освітленому в області -a < x < a. Розглядаючи фотоефект як різницю між двома фотоерс Дембера на межах освітленої області, можна прийти до висновку, так як всі параметри напівпровідника в точках $\pm a$ збігаються, повна фотоерс пропорційна різниці між інтенсивністю падаючого світла в точках а і –а. У той же час точне рішення показує, що фотоелектричний ефект в такій постановці завдання не має місця взагалі. Щоб переконатися в цьому, припустимо, що рухливість електронів однорідна в просторі, а інтенсивність падаючого світла на ділянці $-a \leq x \leq a$ промодульована за законом $I(x) = I_0 \left(1 + \beta_l \frac{x}{a}\right)$. Тут параметр I_0 визначає середнє по освітленій області

значення інтенсивності світла, а β_l - її неоднорідність. Світловий потік такої інтенсивності викликає в напівпровіднику генерацію електрон-діркових пар, темп якої залежить від координати:

$$G_n = G_p = g_I I_0 \left(1 + \beta_l \frac{x}{a} \right).$$
(7.26)

В даному розгляді немає необхідності вважати параметр β_l малим, єдине обмеження, що накладається на нього, випливає з вимоги позитивної визначеності інтенсивності світла в кожній точці освітленої області: $|\beta_l| \leq 1$.

У такій постановці задачі неважко отримати такі рівняння для квазірівнів Фермі:

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_n}{\mathrm{d}x^2} = -\lambda_n^2 \left(\delta \psi_p - \delta \psi_n\right) + g_n \left(1 + \beta_l \frac{x}{a}\right),\tag{7.27}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_p}{\mathrm{d}x^2} = \lambda_p^2 \left(\delta \psi_p - \delta \psi_n\right) - g_p \left(1 + \beta_l \frac{x}{a}\right). \tag{7.28}$$

ГУ виступають умови зшивання квазірівнів Фермі і парціальних струмів носіїв на межах освітленої області $\pm a$ і на межах зразка $\pm L$ (періодичні ГУ): $\psi_{n,p}(-a-0) = \psi_{n,p}(-a+0), \ \psi_{n,p}(a-0) = \psi_{n,p}(a+0), \ \psi_{n,p}(-L) = \psi_{n,p}(L),$ $j_{n,p}(-a-0) = j_{n,p}(-a+0), \ j_{n,p}(a-0) = j_{n,p}(a+0)$ и $j_{n,p}(-L) = j_{n,p}(L).$ Безперервність електронного та діркового струмів в однорідному напівпровіднику означає безперервність градієнта квазірівнів Фермі: $\psi'_{n,p}(-a-0) = \psi'_{n,p}(-a+0), \ \psi'_{n,p}(a-0) = \psi'_{n,p}(a+0), \ \psi'_{n,p}(-L) = \psi'_{n,p}(L).$ Як зазначалося вище, ця система ГУ не є лінійно-незалежною і не дозволяє визначити одну константу інтегрування (вибір рівня відліку потенціалу), але це не перешкоджає знаходженню електричного струму в замкнутому колі.

Рішення системи рівнянь (7.27)-(7.28) в освітленій області має такий вигляд:

$$\psi_n = -\Lambda_n^2 C_{01} \mathrm{e}^{-\lambda x} - \Lambda_n^2 C_{02} \mathrm{e}^{\lambda x} - \beta_l \frac{\Lambda_n^2 g}{\lambda^2 a} x - \frac{g}{2\lambda^2},\tag{7.29}$$

$$\psi_p = \Lambda_p^2 C_{01} \mathrm{e}^{-\lambda x} + \Lambda_p^2 C_{02} \mathrm{e}^{\lambda x} - \beta_l \frac{\Lambda_p^2 g}{\lambda^2 a} x + \frac{g}{2\lambda^2},\tag{7.30}$$

де константи інтегрування дорівнюють:

$$C_{01} = \frac{g}{2\lambda^3 a} \frac{\beta_l \lambda a \, \operatorname{ch} \left(\lambda(L-a)\right) + \left(\beta_l - \lambda a\right) \operatorname{sh} \left(\lambda(L-a)\right)}{\operatorname{sh}(\lambda L)},\tag{7.31}$$

$$C_{02} = \frac{g}{2\lambda^3 a} \frac{\beta_l \lambda a \, \operatorname{ch} \left(\lambda(L-a)\right) + \left(\beta_l + \lambda a\right) \operatorname{sh} \left(\lambda(L-a)\right)}{\operatorname{sh}(\lambda L)}, \qquad (7.32)$$

З (7.29)-(7.30) випливає, що неоднорідне освітлення породжує неоднорідні в просторі квазірівні Фермі. Однак, як нескладно переконатися прямою підстановкою (7.29)-(7.30) в (4.41), дірковий і електронний струми компенсують один одного і повний струм в колі дорівнює нулю. Таким чином, при дослідженні впливу як неоднорідності освітлення, так і розглянутої вище в цьому розділі неоднорідності рухливості носіїв струму, не можна вважати процеси на межах освітленої області незалежними один від одного за будь-яких співвідношеннях між дифузійною довжиною, розміром зразка та розміром його освітленої області. Тому викладений фізичний механізм виникнення фотоерс не може бути зведений і ототожнений з фотоефектом Дембера.

Природно, що в дифузійно товстому зразку розглянутий механізм утворення фотоерс дуже близький до механізму фотоерс Дембера, оскільки вони обидва приводять до появи ЕРС в об'ємі напівпровідника без рівноважного вбудованого електричного поля. У той же час, при зменшенні розміру освітленій області ефект, що розглядається, проявляє все більшу схожість з об'ємним фотоелектричним ефектом (фотоерс Тауца) [227–229]. Причому додаткова схожість з явищем об'ємної фотоерс проявляється в тому, що обидва фотоефекта викликані просторовою неоднорідністю рівноважної провідності напівпровідника. Однак, на відміну від об'ємної фотоерс, в даному випадку в напівпровіднику відсутнє рівноважне вбудоване електричне поле, що розділяє нерівноважні носії струму. Остання обставина ріднить розглянутий механізм з ефектом Дембера. Крім того, як і в ефекті Дембера, в даному випадку фотоерс формується в однорідному (по концентрації носіїв) напівпровіднику. Однак, на відміну від фотоерс Дембера, розглянутий фотоефект має місце і в необмеженому напівпровідниковому зразку (напівпровідниковому кільці). Таким чином, явище, що розглядається, можна позиціонувати як певний проміжний фізичний механізм між фотоерс Дембера і об'ємною фотоерс в неоднорідному напівпровіднику.

7.2 Нелінійний самоіндукований фотоефект в однорідному біполярному напівпровіднику

Фізичною причиною виникнення розглянутого вище фотоефекту є наявність в біполярному напівпровіднику домішок, причому які навіть не впливають на рівноважну концентрацію носіїв струму в зразку. Тим часом, говорячи про роль домішкових енергетичних рівнів в зонній структурі напівпровідника в фотоелектричних явищах, її загально прийнято розглядати з точки зору впливу на об'ємні параметри напівпровідника: на рівноважну (темнову) концентрацію носіїв струму, їх рухливість, а також на спектральну характеристику і чутливість фотоперетворювачів [247–249].

При вивченні фотоелектричних явищ при слабкому рівні освітлення (в лінійному наближенні, тобто коли концентрація нерівноважних носіїв багато менше концентрації носіїв в стані термодинамічної рівноваги) відгук системи (фотоерс, фотоелектричний струм короткого замикання) є лінійною функцією інтенсивності падаючого світла. Це не дивно, оскільки в рамках даного наближення величина фотоерс пропорційна концентрації нерівноважних носіїв, а та, в свою чергу, лінійним чином залежить від інтенсивності освітлення.

Що стосується більш вузького кола фотоелектричних явищ — виникнення фотоерс в об'ємі напівпровідника (тобто не пов'язаної з наявністю p - n переходу), то з загальнофізичних міркувань зрозуміло, що необхідною умовою виникнення ЕРС є порушення просторової симетрії задачі. У разі фотоерс Дембера фактором, що порушує симетрію, є наявність поверхні напівнескінченного зразка. У випадку об'ємної фотоерс — неоднорідність рівноважної концентрації носіїв струму, що приводить до появи рівноважного вбудованого електричного поля. У розглянутій вище задачі порушення симетрії забезпечується неоднорідною рухливістю носіїв. Анізотропія кристалічних властивостей твердого тіла також може приводити до появи ЕРС. У цьому розділі буде продемонстровано новий фізичний механізм утворення фотоерс в однорідному біполярному напівпровіднику, порушення симетрії в якому забезпечує сам світловий пучок завдяки координатній залежності інтенсивності освітлення. Саме тому даний ефект названий самоіндукованим. Другою особливістю цього ефекту є нелінійна (кубічна) залежність величини фотоерс (фотоелектричного струму) від інтенсивності освітлення при як завгодно малому рівні фотозбудження носіїв.

Розглянемо пластину однорідного біполярного напівпровідника довжиною L, лівий кінець якого має координату x = 0, а правий — x = L (див. рис. 7.2). Нехай на інтервалі $0 \le x \le a$ зразок освітлений з неоднорідною інтенсивністю падаючого світла [16]:

$$I(x) = I_0 \left(1 + \beta_l \frac{x}{a} \right). \tag{7.33}$$

Для отримання якісної картини фізичного ефекту можна з метою спрощення математичних розрахунків обмежитися розглядом одновимірної моделі, вважаючи усі величини в напрямках, перпендикулярних осі Ox, однорідними.

7.2.1 Зміна рухливості носіїв струму під впливом світла

Нехай напівпровідник однорідно легований нейтральними домішками з концентрацією N_t . Якщо енергія фотонів досить велика, то в напівпровіднику має місце міжзонна фотогенерація носіїв струму. Крім того, під дією



Рисунок 7.2 — Схема дослідження самоіндукованого фотоефекту в біполярному напівпровіднику. Контурними стрілками позначений світловий потік

освітлення відбувається часткова іонізація нейтральних домішок, причому в силу неоднорідності освітлення ступінь іонізації також виявляється неоднорідною функцією координат. Якщо концентрація нейтральних домішок мала, їх внесок в концентрацію фотоносіїв також виявляється малим, тому зазвичай впливом цих домішок на фотоефект нехтують. Однак, перехід з нейтрального стану домішкового рівня в заряджене супроводжується істотною зміною перетину розсіювання електронів провідності на домішкових рівнях, що в досить чистих напівпровідниках приводить до помітної зміни рухливості носіїв. Остання при цьому, в силу неоднорідності освітлення, також стає просторово неоднорідною величиною. В свою чергу, ця индукована освітленням неоднорідність рухливості електронів провідності в освітленій області напівпровідника, як буде показано нижче, приводить до появи фотоерс.

Зрозуміло, що найбільш сприятливими для прояву обговорюваного ефекту є напівпровідники, в яких велика концентрація нейтральних домішок, і саме розсіюванням електронів на них визначається рухливість останніх. До таких належать, наприклад, радіаційно-стійкі напівпровідники типу In₂Te₃ з стехіометричними вакансіями [329]. Розглядаючи процес фотозбудження домішки в моделі, подібної до моделі Шоклі-Ріда-Холла [97, 100], темп фотогенерації електронів провідності g_n з домішкового рівня можна представити у вигляді:

$$g_n = \varrho_g n_t I, \tag{7.34}$$

де n_t позначає концентрацію нейтральних домішок в основному, не збудженому стані; ρ_g - феноменологічний коефіцієнт пропорційності, що враховує ефективність процесу іонізації. У той же час, зворотний процес захоплення електрона провідності домішковим рівнем запишеться в вигляді:

$$r_n = \varrho_n n_c (N_t - n_t), \tag{7.35}$$

де n_c - концентрація електронів провідності. Рівняння (7.35) подібно (3.20). Однак, на відміну від останнього, в ньому фігурує концентрація електронів n_c , що відповідає однорідному висвітленню всього напівпровідника світлом з інтенсивністю I_0 , її не слід плутати з концентрацією електронів n (яка використовується в дифузійно-дрейфових рівняннях при опису фотоефекту). Тепловою іонізацією нейтральних домішок (3.21) на тлі фотогенрації (7.34) можна знехтувати (домішкові рівні досить глибокі, а температура досить низька, щоб в термодинамічній рівновазі домішки залишалися переважно в неіонізованому, нейтральному основному стані).

У стаціонарному стані процеси іонізації нейтральних домішок і захоплення електронів провідності позитивно зарядженими іонізованими домішковими рівнями компенсують один одного. Тому концентрацію збуджених домішкових рівнів в напівпровіднику можна виразити таким чином:

$$n_t = \frac{\varrho_n n_c N_t}{\varrho_g I + \varrho_n n_c}.$$
(7.36)

З (7.36) видно, що $n_t = N_t$ в відсутності освітлення, в той час, як при досить великий інтенсивності падаючого світла I концентрація домішок у вихідному стані прагне до нуля $n_t \to 0$. Якщо неоднорідність освітлення, яка визначається параметром β_l , мала ($\beta_l \ll 1$), вираз (7.36) можна лінеаризувати, записавши при цьому рухливість електронів у вигляді

$$u_n = u_{n0}(1 + \beta_l \Lambda_u \frac{x - x_0}{a}), \tag{7.37}$$

де u_{n0} - значення рухливості електронів в неосвітленому напівпровіднику, коефіцієнти Λ_u і x_0 характеризують фотоіндуковану просторову неоднорідність рухливості електронів і визначаються наступним чином:

$$\Lambda_u = -\frac{N_t}{u_{n0}} \left. \frac{\partial u_n}{\partial n_t} \right|_{n_t = N_t} \frac{\zeta_0 I_0}{(\zeta_0 I_0 + 1)^2},\tag{7.38}$$

$$x_0 = -\frac{a}{\beta_l} \left(\zeta_0 I_0 + 1 \right), \quad \zeta_0 = \frac{\varrho_g}{\varrho_n n_c}. \tag{7.39}$$

Слід зазначити, що викладене вище справедливо як для випадку фотоіонізації нейтральної домішки, що набуває позитивний заряд, так і для іонізації з початку негативно зарядженої акцепторної домішки, що переходить під дією світла в нейтральний стан. В обох випадках під дією світла відбувається суттєва зміна перетину розсіювання електронів провідності домішковим центром, а отже, і рухливості електронів.

Іонізація домішок позначається також на рухливості дірок. Однак, якщо рухливість дірок повністю контролюється іншими розсіювачами (наприклад, фононами), то цим впливом можна знехтувати, що значно спрощує розрахунки. З урахуванням даного припущення рухливість дірок $u_p(x) = u_{p0} = \text{const.}$

7.2.2 Фотоерс в замкнутому напівпровідниковому колі

Визначимо фотоерс, що генерується в зазначених вище умовах, в рамках формалізму рівнянь безперервності струму, які в одновимірному випадку для стаціонарного струмоперенесення мають вигляд (7.2), причому густини електронного та діркового струмів $j_{n,p}$ визначаються виразами (4.41). Для спрощення будемо вважати, що переважний внесок у фотогенерацію носіїв вносять безпосередні міжзонні переходи. Тоді швидкість генерації електрон-діркових пар в освітленій області $x \leq a$ дорівнює:

$$G_n = G_p = g_I I_0 \left(1 + \beta_l \frac{x}{a} \right). \tag{7.40}$$

Поза освітленою областю $a < x \le L$, природно, $G_n = G_p = 0$.

Для визначення темпу міжзонної рекомбінації в стаціонарному стані за допомогою квазірівнів Фермі скористаємося (7.4).

У лінійному за концентрацією нерівноважних носіїв наближенні провідності електронів і дірок в виразах (4.41) визначаються рівноважними значеннями концентрацій носіїв струму, тобто не залежать від квазірівнів Фермі.

Підставляючи (7.4) і (4.41) в рівняння (7.2), враховуючи (7.37), отримуємо наступну систему рівнянь:

$$\left(1 + \beta_l \Lambda_u \frac{x - x_0}{a}\right) \frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_n}{\mathrm{d}x^2} + \beta_l \frac{\Lambda_u}{a} \frac{\mathrm{d}\delta \psi_n}{\mathrm{d}x} + \lambda_n^2 \left(\delta \psi_p - \delta \psi_n\right) - g_n \left(1 + \beta_l \frac{x}{a}\right) = 0, \quad (7.41)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_p}{\mathrm{d}x^2} - \lambda_p^2\left(\delta\psi_p - \delta\psi_n\right) + g_p\left(1 + \beta_l\frac{x}{a}\right) = 0,\tag{7.42}$$

де $g_n = g_I I_0 / u_{n0} n_0, \, g_p = g_I I_0 / u_{p0} p_0$ при $0 \le x \le a$ і $g_n = g_p = 0$ при x > a.

Як зазначалося вище, на формування фотоерс вирішальний вплив надають процеси в приконтактних областях [13, 15], через що виявляється проблематичним виділити внесок конкретного фізичного механізму в величину фотоерс. Тому, щоб обійти цю проблему, як і в попередньому підрозділі, подумки з'єднаємо кінці напівпровідникового зразка, сформувавши замкнуте коло — однорідне напівпровідникове кільце. Замість фотоерс знайдемо величину фотоелектричного струму j_0 , який може з'явитися в такому колі, а відповідну йому величину фотоерс можна буде оцінити за законом Ома $\mathcal{E} = Lj_0/\sigma_0$. Система рівнянь (7.41)-(7.42) повинна бути доповнена ГУ, які для випадку замкнутого однорідного напівпровідникового кола представляють собою умови зшивання квазірівнів Фермі і парціальних струмів носіїв:

$$\delta\psi_{n,p}(0) = \delta\psi_{n,p}(L), \qquad (7.43)$$

$$j_{n,p}(0) = j_{n,p}(L).$$
 (7.44)

Оскільки інтенсивність падаючого світла і швидкість викликаної їм генерації електронів і дірок є кусково-безперервними функціями, рівняння (7.41)- (7.42) зручно вирішувати методом часткових областей, зшиваючи отримані рішення на кордоні освітленій області x = a. Відповідні умови зшивання повністю аналогічні ГУ (7.43)-(7.44): $\delta \psi_{n,p}(a-0) = \delta \psi_{n,p}(a+0)$, $j_{n,p}(a-0) = j_{n,p}(a+0)$.

Слід зазначити, що не всі рівняння системи (7.43)-(7.44) є лінійно-незалежними, тому можливо визначити квазірівні Фермі з точністю до постійної. Ця обставина обумовлена довільністю вибору рівня відліку електричного потенціалу, як обговорювалося в підрозділі 2.2. Для усунення зазначеної невизначеності необхідно доповнити систему рівнянь безперервності (7.41)-(7.42) рівнянням Пуассона з відповідними ГУ. Однак, зазначена невизначеність не заважає обчисленню фотоелектричного струму короткого замикання, оскільки останній визначається градієнтом квазірівнів Фермі, а не їх абсолютним значенням. Тому можна обійтися без ускладнення завдання.

На жаль, система рівнянь (7.41)-(7.42) все ще складна і не дозволяє отримати точний аналітичний розв'язок. Однак, на практиці (наприклад, при не дуже низьких температурах) чутливість рухливості до зарядового стану домішок не надто велика. Тому можна покласти $\Lambda_u \ll 1$ і скористатися методом послідовних наближень.

Будемо шукати значення квазірівнів Фермі у вигляді ряду за ступенями Λ_u , обмежившись лінійним членом: $\delta\psi_{n,p} = \delta\psi_{n0,p0} + \Lambda_u \delta\psi_{n1,p1}$. Тоді квазірівні

Фермі в нульовому наближенні можна знайти з системи рівнянь:

$$\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_{n0}}{\mathrm{d}x^2} + \lambda_n^2 \left(\delta\psi_{p0} - \delta\psi_{n0}\right) - g_n \left(1 + \beta_l \frac{x}{a}\right) = 0, \qquad (7.45)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_{p0}}{\mathrm{d}x^2} - \lambda_p^2\left(\delta\psi_{p0} - \delta\psi_{n0}\right) + g_p\left(1 + \beta_l\frac{x}{a}\right) = 0 \tag{7.46}$$

з наступними ГУ:

$$\delta\psi_{n0,p0}(0) = \delta\psi_{n0,p0}(L), \tag{7.47}$$

$$\frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n0,p0}}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=0} = \frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n0,p0}}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=L}.$$
(7.48)

Умовами зшивання при x = a є безперервність квазірівнів і їх похідних в цій площині.

Система рівнянь першого наближення по параметру Λ_u може бути записана наступним чином:

$$\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_{n1}}{\mathrm{d}x^2} + \lambda_n^2\left(\delta\psi_{p1} - \delta\psi_{n1}\right) + \frac{\beta_l}{a}\frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n0}}{\mathrm{d}x} + \beta_l\frac{x - x_0}{a}\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_{n0}}{\mathrm{d}x^2} = 0,\qquad(7.49)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 \delta \psi_{p1}}{\mathrm{d}x^2} - \lambda_p^2 \left(\delta \psi_{p1} - \delta \psi_{n1}\right) = 0, \qquad (7.50)$$

$$\delta\psi_{n1,p1}(0) = \delta\psi_{n1,p1}(L), \tag{7.51}$$

$$\frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n1}}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=0} + \beta_l \frac{x_0}{a} \left. \frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n0}}{\mathrm{d}x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\mathrm{d}\delta\psi_{n1}}{\mathrm{d}x} \right|_{x=L},\tag{7.52}$$

$$\frac{\mathrm{d}\delta\psi_{p1}}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=0} = \left.\frac{\mathrm{d}\delta\psi_{p1}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=L}.$$
(7.53)

Умови зшивання при x = a: $\delta \psi_{n1,p1}(a-0) = \delta \psi_{n1,p1}(a+0), \ \delta \psi'_{n1}(a-0) + \beta_l (1-x_0/a) \ \delta \psi'_{n0}(a-0) = \delta \psi'_{n1}(a+0), \ \delta \psi'_{p1}(a-0) = \delta \psi'_{p1}(a+0).$

Розв'язок системи рівнянь нульового наближення (7.45)-(7.46) з урахуванням ГУ (7.47)-(7.48) легко отримати стандартними методами вирішення систем лінійних диференціальних рівнянь з постійними коефіцієнтами. Це рішення має такий вигляд:

$$\delta\psi_{n,p} = \mp g_{n,p} \left[C_{01} \mathrm{e}^{-\lambda x} + C_{02} \mathrm{e}^{\lambda x} + \frac{1}{\lambda^2} \left(1 + \beta_l \frac{x}{a} \right) \right], \qquad (7.54)$$

де верхній знак відноситься до електронів, а нижній — до дірок. Константи інтегрування $C_{01.02}$ дорівнюють:

$$C_{01} = \frac{1}{2\lambda^3 a} \frac{(\beta_l - \lambda a) \mathrm{e}^{\lambda L} + (\lambda a + \beta_l (\lambda a - 1)) \mathrm{e}^{\lambda a}}{\exp(\lambda L) - 1},$$
(7.55)

$$C_{02} = \frac{g}{2\lambda^3 a} \frac{(\beta_l + \lambda a) e^{\lambda a} - (\lambda a + \beta_l (\lambda a + 1)) e^{\lambda L}}{\exp(\lambda L) - 1} e^{-\lambda a}.$$
 (7.56)

Як і в підрозділі 7.1.3, підставляючи (7.54) в (4.41) і враховуючи, що в силу (3.37) виконується рівність $u_{n0}n_0\lambda_n^2 = u_{p0}p_0\lambda_p^2$, нескладно переконатися, що незважаючи на наявність викликаного освітленням потоку електронів і дірок в зразку, повний електричний струм в нульовому наближенні відсутній.

Підставляючи (7.29)-(7.30) в (7.49)-(7.50) і вирішуючи систему рівнянь (7.49)-(7.50) стандартними методами, можна знайти значення поправок до електрохімічних потенціалів електронів і дірок, що враховують координатну залежність рухливості електронів, спричинену неоднорідністю світлового потоку. Потім, за допомогою (4.41) отримаємо вирази для фотоелектричного струму в замкнутому напівпровідниковому колі $j_0 = j_n(0) + j_p(0)$:

$$j_{0} = \beta_{l} \frac{N_{t}}{u_{n0}} \left. \frac{\partial u_{n}}{\partial n_{t}} \right|_{n_{t}=N_{t}} \frac{eg_{I}\zeta_{0}^{2}I_{0}^{3}}{(\zeta_{0}I_{0}+1)^{2}} \times \frac{\left[2 + \lambda a + (\lambda a - 2)\exp(\lambda a)\right]\left[\exp\left(\lambda(L-a)\right) - 1\right]}{2\lambda^{3}aL(\exp(\lambda L) - 1)}.$$
 (7.57)

Як випливає з виразу (7.57), фотоелектричний струм при слабкому освітленні ($\zeta I_0 \ll 1$) істотно нелінійно (по кубічному закону) залежить від інтенсивності падаючого світла. У міру збільшення інтенсивності світла нелінійність фотовідгуку зменшується, поступово переходячи в лінійну залежність для гранично сильного освітлення ($\zeta_0 I_0 \gg 1$). Остання обставина здається дещо несподіваною. Дійсно, при сильному освітленні відбувається майже повна іонізація домішок ($n_t(x) = 0$, см. (7.36)) і неоднорідність рухливості носіїв зникає ($\beta_u \to 0$), тобто зникає фізична причина, що лежить в основі розглянутого механізму фотоефекту. Тому можна було б очікувати зникнення фотоструму в колі або хоча б асимтотичного прагнення до сталого значення. Однак, збільшення I_0 також приводить до збільшення темпу фотогенерації і, згідно (7.33), до зростання градієнта освітленості, які компенсують спадання градієнта рухливості. В результаті конкуренції зазначених процесів виявляється, що β_u убуває з ростом I_0 повільніше, ніж зростають інші співмножники в виразі (7.57). В підсумку це приводить до лінійного росту струму короткого замикання j_0 зі зростанням I_0 при високій інтенсивності падаючого світла.

Необхідно зауважити, що висновок про лінійну залежність фотоелектричного струму від інтенсивності падаючого світла при високій освітленості, строго кажучи, є недостатньо обгрунтованим. При високому рівні фотозбудження носіїв струму параметр ζ_0 починає залежати від інтенсивності освітлення, оскільки від неї залежить концентрація електронів в зоні провідності n_c (див. (7.39)). Нажаль, в цьому випадку знайти аналітичні рішення задачі не представляється можливим, і для визначення точної функціональної залежності струму короткого замикання від інтенсивності падаючого світла при високому рівні фотозбудження необхідно додаткове дослідження чисельними методами. Однак сам факт існування фізичного механізму самоіндукованого фотоефекту в однорідному напівпровіднику представляється переконливо доведеним викладеною лінійною теорією.

Щодо оцінки величини обговорюваного ефекту необхідно відзначити наступне. Його мала величина обумовлена вибором малих параметрів β_l і Λ_u , необхідним для того, щоб можна було отримати аналітичне рішення. У загальному ж випадку як неоднорідність інтенсивності падаючого світла, так і чутливість рухливості до іонізації домішок, можуть бути довільними. Відповідно, величини фотоерс і струму короткого замикання так само перестають бути малими величинами. Необхідно відзначити, що аналогічний фотоефект має місце і в тому випадку, якщо неоднорідність освітлення приводить і до утворення неоднорідності рухливості дірок. Таким чином, результуючий струм буде визначатися сумарним внеском фотоефекту від індукованої світлом неоднорідності рухливості електронів і дірок.

Слід підкреслити, що, як випливає з (7.57), величина фотоефекту практично не залежить від типу провідності напівпровідника (електронний або дірковий). Крім того, струм короткого замикання не залежить від повної темнової провідності напівпровідника σ_0 , на відміну від фотоерс, яка виявляється, як зазвичай, обернено-пропорційною темновій провідності напівпровідника.

Необхідно звернути увагу, що вирішальним фактором, що забезпечує появу в колі фотоерс, є залежність параметра x_0 від I_0 (див. (7.39)), що в свою чергу, обумовлено нелінійністю залежності концентрації іонізованих домішок n_t від інтенсивності падаючого світла. Якби n_t залежала від I_0 лінійним чином, розглянутий ефект не мав би місця.

Також важливо відзначити ключову роль наявності неосвітленої ділянки напівпровідника протяжністю L - a. Як неважко переконатися з (7.57), якщо весь напівпровідник освітлений (L = a), то фотострум в колі зникає. Фізична причина цього явища може бути пояснена необхідністю наявності ділянки лагцюга, в якому забезпечувалася б рекомбінація нерівноважних фотоносіїв. Зазвичай цю роль виконують металеві контакти, на яких і відбувається повна рекомбінація нерівноважних носіїв струму.

Проаналізуємо вплив розмірів зразка на величину струму короткого замикання j_0 . Для цього розглянемо граничні випадки дифузійно-товстих ($\lambda L \gg 1$) і дифузійно-тонких ($\lambda L \ll 1$) зразків. У дифузійно товстому зразку, значна частина якого освітлена ($\lambda L \gg 1$, $\lambda a \gg 1$), струм короткого замикання може бути записаний в наступному вигляді:

$$j_0 = -\Lambda_u \frac{eg_I \zeta_0 I_0^2}{2\lambda^2 L}.$$
(7.58)

Таким чином, в дифузійно-товстому напівпровідниковому зразку фотоелектричний струм короткого замикання зменшується зі збільшенням довжини напівпровідника L і зменшенням довжини амбіполярної дифузії $L_D = 1/\lambda$. У той же час, фотоерс в цьому випадку не залежить від довжини зразка і пропорційна квадрату довжини амбіполярної дифузії L_D .

Якщо практично весь дифузійно-товстий напівпровідник освітлений $(\lambda(L-a) \ll 1, \lambda a \gg 1)$, то струм короткого замикання виявляється обернено пропорційним довжині напівпровідника L і лінійно залежить від довжини амбіполярної дифузії L_D та протяжності неосвітленої ділянки L - a:

$$j_0 = -\Lambda_u \frac{eg_I \zeta_0 I_0^2}{2} \frac{L-a}{\lambda L}.$$
(7.59)

Порівнюючи вирази (7.58) і (7.59), можна зробити висновок, що ефективно довжина неосвітленій частині напівпровідника, всередині якої відбувається рекомбінація нерівноважних носіїв струму, виступає в ролі довжини амбіполярной дифузії. Цей факт підтверджує наведені вище міркування про фізичну роль неосвітленої ділянки в розглянутому фотоефекті.

Нарешті, якщо дифузійно-товстий зразок висвітлюється вузькою смугою світла (світловою щілиною, $\lambda(L-a) \gg 1$, $\lambda a \ll 1$), то струм короткого замикання перестає залежати від довжини амбіполярної дифузії L_D , а визначається довжиною напівпровідника L і товщиною світлової щілини a:

$$j_0 = -\Lambda_u \frac{eg_I \zeta_0 I_0^2}{12} \frac{a^2}{L}.$$
(7.60)

У граничному випадку дифузійно-тонких зразків ($\lambda(L-a) \ll 1, \lambda a \ll 1$) струм короткого замикання також не залежить від довжини амбіполярної дифузії при будь-якому співвідношенні довжин освітленої і неосвітленої

ділянок:

$$j_0 = -\Lambda_u \frac{eg_I \zeta I_0^2}{12} \frac{a^2 (L-a)}{L^2}.$$
(7.61)

Звертає на себе увагу той факт, що вирази для j_0 при висвітленні вузькою смугою світла ("світловий щілиною") однакові як у випадку дифузійнотовстих, так і в разі дифузійно-тонких зразків.

Розглянутий ефект цікавий, в першу чергу, з точки зору фундаментальної фізики, так як демонструє можливість появи фотоерс в повністю однорідній плазмі (як і фотоерс Дембера), в тому числі і в необмеженій (що в корені відрізняє розглянутий механізм від фотоерс Дембера). Однак, даний ефект може знайти і прикладне застосування. Дійсно, оскільки струм короткого замикання в дифузійно-тонких зразках практично не залежить від об'ємних параметрів напівпровідника, не пов'язаних з впливом світла на рухливість носіїв, даний ефект може виявитися перспективним для експериментального дослідження процесів фотозбудження домішкових центрів (визначення концентрації нейтральних домішок, їх перетину розсіювання, квантового виходу, тощо).

7.3 Фотоерс Дембера в багатодолинному монополярному напівпровіднику

Використання дифузійно-дрейфової моделі для опису транспортних явищ як в однорідній плазмі напівпровідників, так і в мікроелектронних приладах має на увазі параболічний закон дисперсії носіїв струму в енергетичних зонах. Між тим, багато напівпровідників, що широко використовуються в електроніці (Ge, Si, GaAs i iнші), мають складну зонну структуру з кількома екстремумами дна зони провідності (або декількома екстремумами у верхній валентній зоні). Кожен екстремум називається долиною, і напівпровідники з такою зонної структурою називаються багатодолинними напівпровідниками [240]. Можлива ситуація, коли всі екстремуми розташовані в імпульсному просторі при $k \neq 0$ (тут k - квазіімпульс електрона провідності) і усі долини еквівалентні (наприклад, напівпровідник з кристалічною решіткою алмаза або кремнію). Однак, можлива і ситуація, коли основний екстремум зони провідності знаходиться при k = 0, а інші додаткові екстремуми (долини) мають більш високу енергію і розташовані ближче до краю зони Бріллюена, як це має місце в разі арсеніду галію (див. рис. 7.3).

Щоб використовувати дифузійно-дрейфове наближення для моделювання електронних приладів на основі багатодолинних напівпровідників, можна носії струму кожної долини розглядати як окрему підсистему з простим (квадратичним) законом дисперсії, кожна зі своєю власною ефективною масою, рухливістю, коефіцієнтом дифузії. У разі нееквівалентних долин електрони провідності різних долин мають різну ефективну масу, тому можна говорити про існування в такому напівпровіднику декількох типів носіїв струму (легкі і важкі електрони провідності). Оскільки підсистеми носіїв з різними ефективними масами характеризуються різною рухливістю, стає можливим керувати електричними властивостями напівпровідника регулюванням концентрації носіїв в різних долинах.

Наявність декількох долин (з різницею в енергії значно менше ширини забороненої зони) має суттєвий вплив на оптичні властивості напівпровідників, забезпечуючи можливість поглинання фотонів малих енергій. Ця обставина здається привабливою з практичної точки зору: замість пошуку нових вузькозонних матеріалів для детекторів фотонів з великою довжиною хвилі (наприклад, інфрачервоного випромінювання), можна використовувати відомі багатодолинні напівпровідники. В даний час додаються значні зусилля для пошуку можливості використання традиційних матеріалів і технологічних процесів для створення датчиків далекого інфрачервоного і терагерцового випромінювання [243].



Рисунок 7.3 — Зонна структура арсеніду галію. *m*₀ - маса вільного електрона, *m*^{*}_{Г,L} - ефективні маси електрона у відповідних долинах

У той же час, добре відомо [83, 328], що для появи фотоерс в напівпровіднику необхідне існування неосновних носіїв (наприклад, дірок в напівпровіднику n-типу). Тому виникає питання: чи можливо в електронному багатодолинному напівпровіднику при вивченні фотоелектричних явищ повністю знехтувати дірками, вважаючи, що роль основних і неосновних носіїв струму грають електрони провідності різних долин? Іншими словами, чи можна створити фотоелектричний елемент на междолинних переходах носіїв струму?

Щоб відповісти на це питання, вивчимо особливості прояву найпростішого фотоелектричного явища — фотоерс Дембера. Розглянемо однорідний монополярний багатодолинний напівпровідник з електронним типом провідності і довжиною a. Нехай на лівий торець зразка, розташований на початку осі Ox (тобто має координату x = 0), падає потік фотонів з енергією, меншою ширини забороненої зони напівпровідника (див. рис. 7.4). Іншими словами, будемо вважати, що освітлення викликає тільки міждолинні пе-
реходи. Для визначеності, покладемо, що світло генерує надлишкові важкі електрони, тобто на зонній діаграмі долини важких електронів розташовані вище. Якщо розглядати всі електрони як єдину підсистему, що має складний закон дисперсії, то внутрішньозонне поглинання світла і викликані ним міждолинні переходи спричиняють появу в цій підсистемі сильної енергетичної нерівноважності. Хоча ця нерівноважність не впливає на розподіл в просторі концентрації електронів безпосередньо, її наявність тягне за собою ряд важливих наслідків. По-перше, як показано в підрозділі 4.4 і в літературі [193], енергетична нерівноважність, може приводити до появи ЕРС. По-друге, впливаючи на темпи рекомбінації і теплової генерації, енергетична нерівноважність приводить в результаті і до зміщення концентраційної рівноваги між підсистемами носіїв струму (електронів і дірок в біполярному напівпровіднику; важких і легких електронів в багатодолинному напівпровіднику). Аналіз транспортних процесів в цьому випадку представляє собою складну математичну задачу, навіть якщо концентрація носіїв, що генеруються світлом, мала. В силу зазначених обставин, зручніше розглядати електрони в кожній долині як окрему підсистему носіїв струму, що характеризується своїми параметрами, як це було запропоновано, наприклад, в роботі [330]. Однак, на відміну від [330], для опису перенесення струму в долинах легких і важких електронів провідності тут буде використана дифузійно-дрейфова модель (як найбільш поширена при вивченні фотоелектричних явищ).

Рівняння безперервності для густини струмів легких і важких електронів **j**_{h,l} мають такий вигляд:

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_{h,l} = e(R_{h,l} - G_{h,l}), \qquad (7.62)$$

де $G_{h,l}$ -темп генерації, $R_{h,l}$ -темп рекомбінації. Тут і далі в цьому підрозділі індекси h і l відзначають фізичні величини, що відносяться до підсистеми важких і легких електронів відповідно. Доданок $G_{h,l}$ описує стимульовані



Рисунок 7.4 — До ефекту Дембера в багатодолинному напівпровіднику. Контурні стрілки показують напрямок падіння світлового потоку

світлом переходи. Оскільки в розглянутій задачі поглинання фотона супроводжується переходом електрона з долини легких електронів в долину важких, то $G_h > 0$, а $G_l < 0$. Член $R_{h,l}$ описує спонтанні переходи електронів різної природи з відповідних долин, як всередині зони провідності, так і в валентну зону і на домішкові рівні. Іншими словами, цей член включає в себе рекомбінацію (міжзонні переходи і захоплення електронів провідності домішковими рівнями), термічну генерацію електронів і спонтанні міждолинні переходи.

Густини струмів в кожній долині будемо описувати своїм власним рівнем електрохімічного потенціалу $\psi_{h,l}$ (квазірівні Фермі важких та легких електронів провідності):

$$\mathbf{j}_{h,l} = -\sigma_{h,l} \nabla \psi_{h,l}. \tag{7.63}$$

Надалі обмежимося розглядом одновимірного випадку, вважаючи усі фізичні величини в напрямках, перпендикулярних до напрямку падіння випромінювання, однорідними. Для спрощення розрахунків скористаємося наступними припущеннями.

 Виконуються умови квазінейтральності. Тоді об'ємним зарядом, який в загальному випадку може бути представлений таким виразом: ρ = e(p + n_t - n_h - n_l) (де n_t означає концентрацію позитивно заряджених донорних домішок), можна знехтувати.

- Енергія фотонів недостатня для генерації дірок і/або іонізації домішок, освітлення викликає тільки міждолинні переходи.
- 3. Концентрація неосновних носіїв мала і може бути знехтувана.
- 4. Ймовірності междолинних переходів багато вище ймовірності теплової генерації електронів провідності. Виконанню цієї умови сприяє істотне перевищення енергії іонізації домішкового рівня (як різниці енергії дна зони провідності і енергії домішкового рівня) над різницею енергій дна долин важких і легких електронів. При цьому можна вважати (з урахуванням пункту 2), що концентрація заряджених домішок при освітленні і протіканні струму не змінюється.

Виконання останніх двох умов означає, що освітлення виводить з рівноваги тільки підсистеми електронів. Підсистеми ж дірок і донорних рівнів або залишаються рівноважними, або їх вплив дуже малий через їхню малу концентрацію. Порушення цих умов сильно ускладнює розрахунок, якісно не впливаючи при цьому на результат.

З урахуванням зазначених наближень відсутність об'ємного заряду може бути виражена наступним простим чином:

$$\delta n_h = -\delta n_l, \tag{7.64}$$

де $\delta n_{h,l} = n_{h,l} - n_{h0,l0}$ - концентрації нерівноважних важких і легких електронів відповідно. Індексом "0" позначені відповідні концентрації в стані термодинамічної рівноваги.

Як зазначено вище, будемо вважати, що висвітлення викликає тільки міждолинні переходи. Тоді має місце рівність $G_l = -G_h$. Через відсутність об'ємного заряду, в силу рівнянь Максвела густина повного струму в колі $\mathbf{j} = \mathbf{j}_h + \mathbf{j}_l$ постійна, тобто div $\mathbf{j} = 0$. Тоді, в силу (7.62) отримуємо $R_h = -R_l$. При цьому, темп спричинених світлом междолинних переходів (тобто темп фотогенерації важких електронів і, відповідно, темп спаду легких електронів) може бути записаний в наступному вигляді:

$$G_h = \tilde{g}_I \gamma_l I_0 \exp(-\gamma_l x), \tag{7.65}$$

де \tilde{g}_I - квантовий вихід,
а γ_l - коефіцієнт поглинання світла в напівпровіднику.

Надмірна концентрація генерованих світлом важких електронів приводить до прискорення зворотного процесу — спонтанного переходу важких електронів з верхніх долин в нижню долину легких електронів. Як наслідок, $R_{h,l} \neq 0$. Відзначимо, що за своїм фізичним змістом цей доданок відповідає швидкості рекомбінації в біполярному напівпровіднику. В даному ж випадку, в силу зроблених припущень, власне рекомбінація (швидкість якої, як зазначалося вище, входить в $R_{h,l}$ поряд з іншими процесами) дуже мало впливає на величину $R_{h,l}$. Тому, щоб уникнути непорозумінь, в подальшому зазначений процес спонтанного переходу нерівноважних важких електронів буде іменуватися релаксацією.

Швидкість релаксації електронів є, взагалі кажучи, деякою функцією концентрації нерівноважних легких і важких електронів: $R_h = -R_l = R(\delta n_h, \delta n_l)$. Не вдаючись в подробиці мікроскопічного опису, в

лінійному наближенні запишемо швидкість релаксації у вигляді наступного феноменологічного виразу (аналогічно виразу (3.32) для електрон-діркової рекомбінації в біполярному напівпровіднику, див. Розділ 3):

$$R(\delta n_h, \delta n_l) = \frac{\delta n_h}{\tau_h} - \frac{\delta n_l}{\tau_l}, \qquad (7.66)$$

де $\tau_{h,l}$ - феноменологічні параметри розмірності часу.

В силу (7.64) вираз (7.66) може бути записано як

$$R = \frac{\delta n_h}{\tau},\tag{7.67}$$

де τ - час життя нерівноважних електронів: $\tau^{-1} = \tau_h^{-1} + \tau_l^{-1}.$

Нерівноважна частина електрохімічних потенціалів електронів дорівнює:

$$\delta\psi_{h,l} = \delta\varphi - \delta\mu_{h,l}/e, \qquad (7.68)$$

де введені нерівноважні електрохімічний $\delta \psi_{h,l} = \psi_{h,l} - \psi_{h0,l0}$ і хімічний $\delta \mu_{h,l} = \mu_{h,l} - \mu_{h0,l0}$ потенціали легких і важких електронів провідності. В однорідному напівпровіднику відсутнє рівноважне вбудоване електричне поле ($\varphi_0 = 0$), потенціал електричного поля є нерівноважним: $\varphi = \delta \varphi$.

Для невиродженого напівпровідника, виразивши концентрації нерівноважних електронів через їх нерівноважний хімічний потенціал, отримаємо наступну формулу для темпу релаксації:

$$R = -\frac{en_{h0}n_{l0}}{n_0k_BT_0}(\delta\psi_h - \delta\psi_l), \qquad (7.69)$$

де $n_0 = n_{h0} + n_{l0}$ - рівноважна повна концентрація електронів.

Тоді лінеаризовані рівняння безперервності (7.62) набувають такого вигляду:

$$\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_h}{\mathrm{d}x^2} = \frac{en_{l0}}{k_B T_0 u_h n_0 \tau} (\delta\psi_h - \delta\psi_l) + \frac{\tilde{g}_I \gamma_l I_0}{u_h n_{h0}} \exp(-\gamma_l x), \qquad (7.70)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\delta\psi_l}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{en_{h0}}{k_B T_0 u_l n_0 \tau} (\delta\psi_h - \delta\psi_l) - \frac{\tilde{g}_I \gamma_l I_0}{u_l n_{l0}} \exp(-\gamma_l x).$$
(7.71)

У площинах x = 0 і x = a напівпровідник має контакт з металевими електродами, за допомогою яких досліджуваний зразок підключений у вимірювальне коло. Тому, відповідно до викладених в Розділі 2.2 міркуваннями, ГУ до рівнянь (7.70)-(7.71) можуть бути записані в наступному вигляді:

$$j_h(0) = -\sigma_h^{(s,l)} \left[\delta \psi_h(0) - \varphi_m(0) \right], \qquad (7.72)$$

$$j_l(0) = -\sigma_l^{(s,l)} \left[\delta \psi_l(0) - \varphi_m(0) \right],$$
(7.73)

$$j_h(a) = \sigma_h^{(s,r)} \left[\delta \psi_h(a) - \varphi_m(a) \right], \qquad (7.74)$$

$$j_l(a) = \sigma_l^{(s,r)} \left[\delta \psi_l(a) - \varphi_m(a) \right], \qquad (7.75)$$

$$j_0 = j_h(0) + j_l(0), (7.76)$$

$$\varphi_m(0) = 0, \tag{7.77}$$

$$\varphi_m(a) = V, \tag{7.78}$$

$$V = SR_L j_0, \tag{7.79}$$

де $\sigma_{h,l}^{(s,l)}$ и $\sigma_{(h,l)}^{s,r}$ - поверхнева провідність контакту, верхній індекс l відноситься до лівого контакту, а r — до правого. V позначає різницю потенціалів між точками x = 0 і x = a, S - площа поперечного перерізу зразка, R_L - опір зовнішнього кола (навантаження). У ГУ (7.72)-(7.75) ми нехтуємо поверхневої рекомбінацією на кордоні "напівпровідник-метал" з тих же причин, що і в об'ємі зразка. Необхідно відзначити, що таке припущення можливе лише для електронного напівпровідника, докладніше див. [14, 91]. Надалі для спрощення викладок вважатимемо, що обидва контакти однакові: $\sigma_{h,l}^{(s,l)} = \sigma_{h,l}^{(s,r)} = \sigma_{h,l}^{(s)}$

Рішення системи рівнянь (7.70)-(7.71) спільно з ГУ (7.72)-(7.79) стандартними методами не складає труднощів. З огляду на те, що фотоерс збігається з різницею потенціалів на лівому і правому електродах V при нескінченному опорі навантаження (розімкнуте коло), отримаємо в граничному випадку $R_L \to \infty$ такий вираз для різниці потенціалів на краях напівпровідника:

$$V = \frac{e\tilde{g}_I(\sigma_l \sigma_h^{(s)} - \sigma_h \sigma_l^{(s)}) \operatorname{sh}(\lambda a/2)}{\lambda \sigma_s \sigma_h \sigma_l \operatorname{ch}(\lambda a/2) + \sigma_0 \sigma_h^{(s)} \sigma_l^{(s)} \operatorname{sh}(\lambda a/2)} I_0,$$
(7.80)

де $\sigma_s = \sigma_h^{(s)} + \sigma_l^{(s)}$, а параметр λ є аналогом зворотної довжини амбіполярної

дифузії в біполярних напівпровідниках і визначається наступним виразом:

$$\lambda = \sqrt{\frac{e}{k_B T_0 n_0 \tau} \frac{u_h n_{h0} + u_l n_{l0}}{u_h u_l}}$$
(7.81)

Вираз (7.80) отримано в припущенні, що світло повністю поглинається у вузькій приконтактній області (як це зазвичай прийнято при вивченні фотоерс Дембера): $\gamma_l a \gg 1, \ \gamma_l \gg \lambda$.

Рішення системи рівнянь (7.70)-(7.71) показує, що просторовий розподіл концентрації нерівноважних електронів обох типів має однакову характерну довжину λ , яка визначається виразом (7.81). Це означає, що і важкі, і легкі електрони дифундують від освітленого торця вглиб зразка погоджено, подібно до процесу амбіполярної дифузії в біполярному напівпровіднику. Фізичною причиною аналогії між амбіполярною дифузією електронно-діркового пакета в біполярному напівпровіднику і узгодженою дифузією важких і легких електронів в багатодолинному напівпровіднику є наявність рівноважних заряджених домішок (донорів). Дійсно, в біполярному напівпровіднику при порушенні рівноваги і неузгодженості руху електронів і дірок (тобто появі надлишкової концентрації електронів і дірок) безпосередньо виникає електростатична сила притягнення, яка погоджує швидкості дифузії електронів і дірок. У багатодолинному напівпровіднику в стані термодинамічної рівноваги утворений зарядженими донорними домішками однорідний нерухомий позитивний об'ємний заряд решітки повністю компенсований електронами провідності. Локальне зменшення концентрації електронів (яке може виникнути при дифузії, якщо більш рухливі електрони покинули деяку область напівпровідника) порушує цю компенсацію. Електростатична сила притягнення, що виникає в результаті, прагне вирівняти швидкості дифузії легких і важких електронів, домагаючись їх узгодженого руху.

У досить довгому зразку ($\lambda a \gg 1$), коли нерівноважні носії не досягають неосвітленого електрода і процеси поблизу нього не впливають на формування ЕРС, вираз (7.80) спрощується:

$$V = \frac{e\tilde{g}_I(\sigma_l\sigma_h^{(s)} - \sigma_h\sigma_l^{(s)})}{\lambda\sigma_s\sigma_h\sigma_l + \sigma_0\sigma_h^{(s)}\sigma_l^{(s)}}I_0.$$
(7.82)

В протилежному граничному випадку тонкого зразка ($\lambda a \ll 1$) фотоерс дорівнює:

$$V = \frac{e\tilde{g}_I(\sigma_l \sigma_h^{(s)} - \sigma_h \sigma_l^{(s)})a}{2\sigma_s \sigma_h \sigma_l} I_0.$$
(7.83)

Слід підкреслити, що в вирази для фотоерс (7.82)-(7.83) поверхневі провідності входять нарівні з об'ємними параметрами напівпровідника і, взагалі кажучи, не можуть бути проігноровані. Лише в окремих випадках, наприклад, коли однією з поверхневих провідностей можна знехтувати, а інша, навпаки, прагне до нескінченності, величина фотоерс цілком визначається об'ємними параметрами напівпровідника. Також важливо відзначити, що якщо обидві поверхневі провідності гранично великі, фотоефект зникає. Це пояснюється тим, що в цьому випадку фотоносії, що генеруються в приконтактному шарі, відразу ж йдуть в металеві електроди, не беручи участь у формуванні фотоерс.

Таким чином, в багатодолинному напівпровіднику, освітлення якого змінює заселеність долин, не генеруючи при цьому неосновні носії, виникає EPC за типом Дембера. Її виникнення обумовлено різною швидкістю дифузії важких і легких нерівноважних електронів від освітленого торця зразка до неосвітленого. Величина цієї фотоерс в обмеженому напівпровіднику, що контактує з металевими електродами, не описується класичним виразом для ефекту Дембера (втім, як і фотоерс в біполярному напівпровіднику в таких же експериментальних умовах [237, 238]). Більш строгу фізичну причину даного фотоефекту можна сформулювати наступним чином. Можна показати, що в замкнутому однорідному напівпровіднику EPC, що створювана в процесі дифузії і дрейфу нерівноважних носіїв (як єдиної системи) при будь-якому їх просторовому розподілі, тотожно дорівнює нулю, якщо виконується співвідношення Ейнштейна між рухливістю і коефіцієнтом дифузії $k_B T_0 u = eD$ (тут *u* і *D* - рухливість і коефіцієнт дифузії носіїв як єдиної системи) [83]. Очевидно, що при наявності двох типів носіїв (електронів і дірок) стає неможливим опис дифузійно-дрейфового транспорту за допомогою коефіцієнта дифузії і рухливості амбіполярого пакета, що підкоряються співвідношенню Ейнштейна. Аналогічно, енергетична нерівноважність (відмінність температур електронів і дірок, або формування нерівноважної функції розподілу носіїв, що не дозволяє ввести поняття температури) являє собою інший механізм, що забезпечує можливість формування фотоерс в однорідному монополярному напівпровіднику [18, 193]. Розглянутий механізм займає проміжне положення: з одного боку, можна говорити про порушення співвідношення Ейнштейна через наявність двох типів носіїв, що розрізняються ефективною масою. З іншого боку, можна говорити про один тип носіїв (в даному випадку — електронів), для яких через складний характер закону дисперсії (і через складну зонну структуру) співвідношення Ейнштейна не виконується.

Цікавою особливістю викладеного вище фізичного механізму утворення фотоефекту в багатодолинному напівпровіднику є можливість виникнення EPC навіть у тому випадку, коли енергії фотонів недостатньо для генерації електронно-діркових пар. З іншого боку, відомо [243, 331], що розробка датчиків випромінювання з низькою енергією фотонів пов'язана з певними труднощами, так як необхідно підібрати напівпровідник з шириною забороненої зони, меншою ніж енергія фотона, що має бути зареєстровано. Тим часом, як правило, різниця енергій між долинами легких і важких носіїв істотно менше, ніж ширина забороненої зони. Таким чином, розглянутий фотоефект на внутрішньозонному поглинанні світла, яке спричиняє міждолинні переходи, може знайти практичне застосування для створення фотодетекторів фотонів низької енергії (наприклад, для далекої інфрачервоної області спектра).

7.4 Постійний струм в нестаціонарних фотоелектричних явищах

Розглянуті вище в цьому розділі фотоелектричні явища протікають при постійному в часі зовнішньому впливі і характеризуються постійним значенням фотоерс і фотоелектричного струму в замкнутому колі. Змінна в часі зовнішнього впливу дає можливість проявитися новим фотоелектричним ефектам в плазмоподібному середовищі. На одному з таких ефектів заснований метод рухомої решітки фотоносіїв (MPG) [253, 255, 256], який знайшов практичне застосування в якості методу автоматичного контролю параметрів напівпровідникових приладів у виробничому процесі [258]. Спрощена схема експериментальної установки, що реалізує метод MPG, наведена на рис. 7.5 [39, 40, 255]. Згенерований лазером "1" світловий промінь розщеплюється напівпрозорим дзеркалом "2" на два пучка. Один з них проходить через акусто-оптичний модулятор "3", в результаті чого його частота дещо змінюється в порівнянні з опорним променем. За допомогою системи дзеркал "4" обидва променя зводяться на поверхні напівпровідникового зразка "5", формуючи інтерференційну картину. Через відмінності частоти лазерного випромінювання в двох променях інтерференційна картина являє собою набір смуг, що рухається по поверхні зразка. Змінюючи за допомогою акусто-оптичного модулятора зрушення частоти другого променя, а за допомогою дзеркал кут падіння, можна незалежно змінювати відстань між інтерференційними смугами і швидкість їх руху.

Якщо енергія фотонів перевищує червоний кордон фотоефекту, в напівпровіднику формується періодичний просторовий неоднорідний розподіл концентрації нерівноважних носіїв струму, а в напрямку руху інтерференційних смуг виникає електричний струм, який реєструється вимірювальним пристроєм 6.



Рисунок 7.5 — Спрощена схема експериментального дослідження властивостей напівпровідників методом MPG. 1 - джерело лазерного випромінювання, 2 - світлоподільник, 3 - акусто-оптичний модулятор, 4 - дзеркала, 5 досліджуваний зразок, 6 - реєструючий пристрій (мікроамперметр)

На відміну від стаціонарних фотоелектричних явищ, які не пов'язані з наявністю в зразку контактів (наприклад, ЕРС Дембера і об'ємна фотоерс), нестаціонарний фотоефект являє собою по суті перехідний процес, який постійно підтримується зовнішнім збудженням — просторово-часовою модуляцією інтенсивності падаючого світла. Якби освітлення однорідного напівпровідника було б статичним, перехідний процес завершився б формуванням такого розподілу нерівноважних фотоносіїв, при якому б виникло вбудоване електричне поле, що компенсувалося б дифузійним струмом, а фотоерс звернулася б в нуль. Іншими словами, на мові квазірівнів Фермі, в разі стаціонарного освітлення сталося б формування постійних в просторі квазірівнів Фермі електронів і дірок. В силу цих міркувань вважається, що нестаціонарна фотоерс (або фотострум короткого замикання в замкнутому колі) в методі MPG являє собою змінний електричний сигнал, в якому домінує гармоніка, яка відповідає частоті просторової модуляції інтенсивності освітлення. Природно, в силу нелінійності напівпровідникового середовища, можлива присутність і вищих гармонік. Що стосується постійної компоненти струму в замкнутому напівпровідниковому колі в умовах нестаціонарної фотоерс, вважають її відсутність, якщо тільки саме середовище не має випрямних властивостей.

При дослідженні нестаціонарної фотоерс прийнято вважати, що вплив світла обмежується генерацією фотоносіїв, тобто зміною концентрації нерівноважних електронів і дірок. Тим часом, в легованому напівпровіднику при наявності нейтральних або компенсованих домішок освітлення може також змінювати і рухливість носіїв струму. Останнє пояснюється тим, що під впливом світла домішковий центр змінює свій зарядовий стан, а отже, і перетин розсіювання електронів на домішках, а значить, і рухливості електронів. Як було показано вище, ця обставина сама по собі здатна приводити до формування фотоерс при наявності просторово неоднорідної освітленості. Нижче буде показано, що з урахуванням впливу освітлення на рухливість носіїв струму в методі MPG, порушення симетрії задачі за рахунок появи виділеного напрямку — напрямку руху інтерференційних полос, приводить до появи постійного електричного струму в однорідному середовищі, яке не має випрямних властивостей [17].

Розглянемо пластину однорідного біполярного напівпровідника довжиною L (рис. 7.6), яка освітлюється з інтенсивністю падаючого світла, модульованою по закону $I(x,t) = I_0 + \Delta I \cos[2\pi (x + vt)/L]$ (рис. 7.7), де I_0 середнє значення інтенсивності падаючого світла, v - швидкість руху інтерференційної картини.

З метою спростити викладки для отримання якісної картини ефекту обмежимося розглядом одновимірної моделі, вважаючи все фізичні величини в поперечному до площини рисунку напрямку однорідними.

Якщо енергія фотонів досить велика, то в напівпровіднику одночасно



Рисунок 7.6 — Динамічний фотоелектричний ефект в пластині однорідного напівпровідника. Контурні стрілки показують напрямок падіння світлового потоку, чорна стрілка показує напрямок руху інтерференційної картини



Рисунок 7.7 — Інтенсивність модульованого світлового потоку

відбуваються як міжзонна генерація електронів провідності і дірок у валентній зоні, так і збудження домішкових рівнів. Приймемо концентрацію останніх досить малою, щоб знехтувати їх впливом на концентрацію нерівноважних носіїв, тобто щоб темп генерації електронів провідності з нейтрального домішкового рівня був істотно менше темпу міжзонної фотогенерації. У той же час температура зразка повинна бути досить низькою, а концентрація домішкових центрів достатньою для того, щоб основний внесок в розсіювання носіїв вносили саме іонізовані домішкові центри. Іншими словами, в даній моделі покладається, що концентрація нерівноважних носіїв визначається виключно міжзонними переходами, в той час, як рухливість носіїв струму контролюється виключно процесами збудження домішкових центрів. Розглядаючи процес фотозбудження домішки в моделі Шоклі-Ріда-Холла [100], можна записати для концентрації іонізованих домішкових рівнів n_t наступне рівняння:

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = G_t - R_t, \tag{7.84}$$

де $G_t = \varrho_g (N_t - n_t) I$ - темп фотогенерації електронів провідності з домішкового центра. Вого рівня, ϱ_g - перетин розсіювання процесу іонізації домішкового центра. Зворотний процес захоплення електронів провідності домішковими рівнями запишеться у вигляді $R_t = \varrho_r nn_t$, ϱ_r - феноменологічний параметр, що характеризує ймовірність захоплення електрона провідності домішковий рівнем. Процесом термічного збудження домішкового рівня будемо нехтувати, вважаючи температуру досить низькою. Остання умова також необхідна для того, щоб домінуючим було розсіювання носіїв струму на домішках, а не на фононах.

Для отримання аналітичного рішення, обмежимося лінійним наближенням, вважаючи глибину модуляції інтенсивності падаючого світла малою: $\Delta I \ll I_0, \Delta I \ll \pi k v / (\varrho_g L)$. Фізично остання умова означає, що за час пробігу інтерференційних смуг уздовж зразка іонізується мала частина домішок в порівнянні з їх темновим значенням.

Тоді з рівняння (7.84) можна отримати наступний стаціонарний розподіл концентрації нейтральних домішок в напівпровіднику:

$$n_t = N_t - \overline{N}_t \left[1 - \zeta \, \cos \, \Omega(x, t) \right], \tag{7.85}$$

де

$$\Omega(x,t) = \frac{2\pi}{L}(x - x_0 + vt), \qquad (7.86)$$

$$\overline{N}_t = \varrho_n n(I_0) \tau_g N_t, \tag{7.87}$$

304

$$\zeta = \frac{\varrho_g \tau_g \tau_v}{\sqrt{\tau_g^2 + \tau_v^2}} \Delta I, \tag{7.88}$$

$$\sin \frac{2\pi x_0}{L} = \frac{\tau_g}{\sqrt{\tau_g^2 + \tau_v^2}},$$
(7.89)

$$\tau_v = \frac{L}{2\pi v},\tag{7.90}$$

$$\tau_g = (\varrho_g I_0 + \varrho_n n(I_0))^{-1}.$$
(7.91)

У виразах (7.87)-(7.89) $n(I_0)$ означає концентрацію електронів провідності в напівпровіднику, однорідно освітленому падаючим світлом з інтенсивністю I_0 .

З фізичної точки зору введений вище параметр τ_g являє собою масштаб часу для процесу фото збудження домішки рівномірним освітленням з інтенсивністю I_0 , а параметр τ_v - час руху інтерференційної смуги уздовж зразка.

З виразу (7.85) видно, що, як і слід було очікувати, при відсутності освітлення ($I_0 = \Delta I = 0$) $n_t \to 0$, в той час як при досить сильному освітленні $n_t \to N_t$. Крім того, концентрація іонізованих домішок виявляється промодульованою за законом біжучої хвилі, яка має фазовий зсув по відношенню до модуляції інтенсивності падаючого світла. Глибина просторовочасової модуляції концентрації збуджених домішкових рівнів ζ є максимальною для нерухомої інтерференційної картини, у міру збільшення швидкості руху інтерференційних смуг v глибина модуляції зменшується, прагнучи до нуля при чималій v. Фазовий зсув, що описується параметром x_0 зростає з ростом v, прагнучи до граничного значення $x_0 = L/4$ при $v \to \infty$.

Збільшення середньої інтенсивності світлового потоку I_0 при фіксованій амплітуді його модуляції зменшує фазовий зсув, який зникає в граничному випадку нескінченно сильного освітлення. У цьому граничному випадку глибина модуляції просторового розподілу концентрації іонізованих домішок ζ наближається до нуля, що свідчить про повну іонізацію домішкових рівнів досить сильним світловим потоком.

Вважаючи, що рухливість електронів пропорційна концентрації збуджених домішкових центрів $u_n \propto n_t$, виразимо рухливість електронів в наступному вигляді:

$$u_n(x,t) = u_{n0} + \delta u_{n0} + \delta u_{nd} \cos \Omega(x,t), \qquad (7.92)$$

де u_{n0} - рухливість електронів в неосвітленому напівпровіднику, δu_{n0} описує статичну зміну рухливості електронів під дією освітлення, а член з δu_{nd} — динамічну частину зміни рухливості електронів під дією інтерференційних смуг, що рухаються. Ці величини дорівнюють відповідно:

$$\delta u_{n0} = \left. \frac{\partial u_n}{\partial n_t} \right|_{n_t=0} \varrho_g \tau_g N_t I_0, \tag{7.93}$$

$$\delta u_{nd} = \left. \frac{\partial u_n}{\partial n_t} \right|_{n_t=0} \frac{\varrho_g \varrho_n n(I_0) \tau_g^2 \tau_v}{\sqrt{\tau_g^2 + \tau_v^2}} N_t \Delta I.$$
(7.94)

В лінійному наближенні зміна рухливості носіїв, що викликана освітленням, вважається малою: $|\delta u_{n0}| \ll u_{n0}, |\delta u_{nd}| \ll u_{n0}.$

Іонізація домішок позначається також на рухливості дірок, проте для спрощення розрахунків цим впливом можна знехтувати, вважаючи, що рухливість дірок повністю контролюється іншими розсіювачами (наприклад — фононами) і є постійною величиною u_{p0} .

Слід зазначити, що наведені вище міркування однаково справедливі як для випадку іонізації нейтральної домішки, що набуває позитивний заряд при фотозбудженні, так і для з початку негативно зарядженої акцепторної домішки, що переходить під дією світла в нейтральний стан. В обох випадках під дією світла відбувається суттєва зміна перетину розсіювання домішковим центром електронів провідності, а отже, їх рухливості. Різниця цих двох випадків полягає в знаку множника $\partial u_n / \partial n_t$. Знайдемо фотоерс, що генерується в зазначених умовах в напівпровіднику, в рамках формалізму рівнянь безперервності струму, які в одновимірному випадку записуються наступним чином [13, 83, 90]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_n}{\partial x} - R_n + G_n, \qquad (7.95)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x} - R_p + G_p, \qquad (7.96)$$

$$j_n = eu_n nE + k_B T u_n \frac{\partial n}{\partial x},\tag{7.97}$$

$$j_p = e u_{p0} p E - k_B T u_{p0} \frac{\partial p}{\partial x}.$$
(7.98)

Для визначення величини електричного поля E систему рівнянь (7.95)-(7.98) необхідно доповнити рівнянням Пуассона (5.68). Однак, для спрощення подальших викладок зручно скористатися наближенням квазінейтральності. Для виконання умов застосовності останнього будемо вимагати, щоб розміри напівпровідника набагато перевищували радіус екранування Дебая: $L \gg r_D$, а характерні часи фотозбудження — час Максвела: $\tau_g \gg \tau_M$, $\tau_v \gg \tau_M$. При виконанні зазначених умов рівняння Пуассона стає зайвим (замість нього має місце алгебраїчне рівняння $\rho = 0$) і може бути використано для подальшої верифікації отриманих концентрацій нерівноважних носіїв. В силу малості концентрації домішкових центрів, що зумовлює їх незначний вплив на концентрацію носіїв струму, умова відсутності об'ємного заряду набуває вигляду: $\delta n = \delta p$, де $\delta n = n - n_0$, $\delta p = p - p_0$.

Як згадувалося вище, будемо вважати, що переважний внесок у фотогенерацію носіїв вносять прямі міжзонні переходи. Тоді $G_n = G_p = g_I I(x,t)$, де g_I - коефіцієнт пропорційності, що характеризує ефективність генерації фотоносіїв [9, 100]. Вираз для міжзонної рекомбінації в розглянутих умовах може бути записано у вигляді $R_n = R_p = \delta n/\tau$, де τ - час життя носіїв.

Систему диференціальних рівнянь (7.95)-(7.98) необхідно доповнити ГУ. Щоб уникнути необхідності врахування впливу приконтактних областей на величину фотоефекту, а також істотно спростити викладки, знову скористаємося періодичними ГУ, що еквівалентно з'єднанню кінців напівпровідника (точок 0 і L) і формуванню напівпровідникового кільця. Основною характеристикою фотоефекту в отриманому замкнутому колі є фотоелектричний струм короткого замикання. У такій геометрії зразка вид ГУ значно спрощується, ними служать умови безперервності в площині замикання напівпровідника. Безперервність концентрації носіїв (n(0) = n(L), p(0) = p(L)) в наближенні квазінейтральності забезпечується виконанням однієї рівності

$$\delta n(0) = \delta n(L). \tag{7.99}$$

В силу безперервності електричного потенціалу $\varphi(0) = \varphi(L)$ та напруженості електричного поля E(0) = E(L), а також з урахуванням (7.97)-(7.99), умови безперервності електронного та діркового струмів $j_{n,p}(0) = j_{n,p}(L)$ можна переформулювати як умову безперервності першої похідної нерівноважної концентрації носіїв по координаті:

$$\left. \frac{\partial \delta n}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \delta n}{\partial x} \right|_{x=L}.$$
(7.100)

Виразимо з рівнянь (7.97)-(7.98) електричне поле в напівпровіднику:

$$E = \sigma(x,t)^{-1} \left[j(t) - ek_B T \left(u_n \frac{\partial n}{\partial x} - u_{p0} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right].$$
(7.101)

Повний електричний струм j, що фігурує в (7.101), в загальному випадку містить як постійну j_0 , так і змінну j_{ac} компоненти, але в наближенні квазінейтральності не залежить від координати. Дійсно, з умови $\rho = 0$ в силу (2.2) випливає div $\mathbf{j} = 0$. У той же час, повна провідність напівпровідника σ є функцією часу і просторової координати. З умови безперервності електричного потенціалу, яку для замкнутого кола можна записати у вигляді $\int_0^L E dx = 0$, отримаємо вираз для струму короткого замикання в колі:

$$j(t) = k_B T \int_0^L \frac{u_n - u_{p0}}{\sigma} \frac{\partial \delta n}{\partial x} dx \left(\int_0^L \frac{dx}{\sigma} \right)^{-1}.$$
 (7.102)

Звернемо увагу, що при відсутності впливу світла на рухливість носіїв (тобто якщо $u_n = u_{n0} = \text{const}$), струм в колі відсутній, так як підінтегральний вираз в вираженні (7.102) в цьому випадку являє собою повний диференціал функції від δn , а $\delta n(0) = \delta n(L)$. Вважаючи, що викликана світлом зміна рухливості електронів (див. (7.92)) мала: $|\delta u_{n0}| \ll u_{n0}$, $|\delta u_{nd}| \ll u_{n0}$, розкладемо підінтегральний вираз в (7.102) по δu_n , обмежуючись лінійним членом. Після нескладних перетворень одержуємо:

$$j(t) = \frac{eD_a}{u_{n0}L} \int_0^L \delta u_{nd} \frac{\partial \delta n}{\partial x} \cos \,\Omega(x,t) \,\mathrm{d}x, \qquad (7.103)$$

де $D_a = k_B T u_{n0} u_{p0} (n_0 + p_0) / \sigma_0$ - коефіцієнт амбіполярної дифузії.

При виведенні (7.103) враховано вищевикладене зауваження, що ті складові в підінтегральному виразі, які не містять явної координатної залежності, не дають внесок в струм короткого замикання, а також знехтувані складові більш високого порядку малості. Таким чином, в виразі (7.103) фігурує тільки просторово-неоднорідна поправка до рухливості електронів δu_{nd} , однорідна ж зміна рухливості електронів δu_{n0} з розв'язку випадає.

Для розрахунку нерівноважної концентрації носіїв δn звернемо увагу, що підінтегральний вираз вже містить малу величину δu_{nd} в якості чинника, тому при використанні методу послідовних наближень достатньо знайти рішення системи рівнянь (7.95)-(7.96), поклавши $u_n = u_{n0}$ і утримуючи тільки лінійні по δn члени. З огляду на цей факт, підставляючи (7.101) в (7.97), а потім (7.97) в (7.95), остаточно отримуємо наступне лінійне диференціальне рівняння для нерівноважної концентрації електронів:

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = D_a \frac{\partial^2 \delta n}{\partial x^2} - \frac{\delta n}{\tau} + g_I I(x, t).$$
(7.104)

Оскільки нас цікавить усталений розподіл концентрації носіїв, який виникає після завершення всіх перехідних процесів, пов'язаних з включенням освітлення, будемо шукати рішення рівняння (7.104) відразу у вигляді "біжучої хвилі", що має деякий фазовий зсув по відношенню до фази модуляції інтенсивності падаючого світла:

$$\delta n = \delta n_0 + \delta n_s \sin\left[\frac{2\pi}{L}\left(x + vt\right)\right] + \delta n_c \cos\left[\frac{2\pi}{L}\left(x + vt\right)\right].$$
(7.105)

Тоді нескладно отримати наступні вирази для концентрації нерівноважних носіїв струму:

$$\delta n_0 = g_I \tau I_0, \tag{7.106}$$

$$\delta n_s = g_I \frac{\tau_v^2 \tau_R}{\tau_v^2 + \tau_R^2} I_a, \tag{7.107}$$

$$\delta n_c = g_I \frac{\tau_v \tau_R^2}{\tau_v^2 + \tau_R^2} I_a, \qquad (7.108)$$

де

$$\tau_R = \tau \left(1 + 4\pi^2 \frac{L_D^2}{L^2} \right)^{-1}, \qquad (7.109)$$

а $L_D^2 = D_a \tau$ - дифузійна довжина амбіполярної дифузії.

Слід зазначити, що введений (7.109) параметр τ_R являє собою ефективний час життя носіїв в напівпровідниковому кільці. У довгому зразку воно збігається за величиною з часом життя носіїв τ , у міру зменшення довжини напівпровідника τ_R зменшується, що фізично означає зменшення ролі рекомбінації у короткому зразку: нерівноважні носії в цьому випадку встигають кілька разів пройти по напівпровідниковому кільцю, перш ніж рекомбінують. У цьому полягає одна з відмінностей рекомбінації в динамічних умовах від розглянутих в Розділі 3 стаціонарних генераційно-рекомбінаційних процесів.

Підставляючи знайдений розподіл концентрації нерівноважних носіїв (7.105) і рухливість електронів (7.92) в (7.103), отримаємо такий вираз для значення фотоструму в напівпровідниковому кільці:

$$j = \pi e g_I \varrho_g \varrho_n \frac{D_a n_0 N_t}{u_{n0} L} \left. \frac{\partial u_n}{\partial N_t} \right|_{n_t = 0} \frac{\tau_g^2 \tau_v^3 \tau_R (\tau_g - \tau_R)}{(\tau_v^2 + \tau_g^2) (\tau_v^2 + \tau_R^2)} \Delta I^2.$$
(7.110)

Як видно з виразу (7.110), освітлення модульованим світловим пучком однорідного напівпровідникового кільця, легованого нейтральними домішками, приводить до появи в ньому постійного електричного струму. Несподіваною обставиною при цьому є відсутність будь-якої змінної складової (принаймні, в рамках лінійного наближення). В тому числі, відсутня і компонента змінного струму на частоті зміни інтенсивності падаючого світла в кожній точці напівпровідника $f_0 = v/L$. Цю обставину можна пояснити наступним чином. Як згадувалося вище, в силу виконання умов квазінейтральності має місце рівність div $\mathbf{j} = 0$, а для однорідної в просторі зміни електричного струму необхідний однорідний зовнішній вплив. У той же час, в розглянутій задачі зовнішній вплив є неоднорідним, що і робить неможливим появу змінної складової.

Фізичними умовами, які необхідні для прояву даного фотоефекту, є наступні. По-перше, це наявність в напівпровіднику домішкових центрів, заряд яких може контролюватися світлом. Тобто освітлення одночасно впливає і на концентрацію носіїв струму, і на їх рухливість. По-друге, відмінність характерних часів рекомбінації домішкових центрів τ_g і носіїв τ_R , при $\tau_g = \tau_R$ електричний струм в колі зникає. Нарешті, необхідно забезпечити рух інтерференційної картини по поверхні зразка: зрушення симетричного розподілу інтенсивності світла знімає просторову симетрію задачі, забезпечуючи появу фотоерс і електричного струму, знак яких визначається напрямом руху профілю інтенсивності освітлення.

Характерною особливістю досліджуваного фотоефекту є його квадратична залежність від амплітуди модуляції інтенсивності падаючого світла ΔI при довільно малій величині останньої. Для відомих механізмів фотоефекту величина фотоерс від інтенсивності падаючого світла (принаймні, при слабкому освітленні) залежить лінійним чином. Що стосується залежності струму короткого замикання *j* від середньої інтенсивності падаючого світла I_0 , що входить до параметру τ_g (7.91), необхідно відзначити дві обставини. По-перше, наявність в (7.110) чинника $\tau_q - \tau_R$ означає, що при відповідному підборі параметрів напівпровідника можна спостерігати сильну залежність величини фотоефекту від середнього значення інтенсивності падаючого світла, аж до придушення ефекту і зміни знака електричного струму в колі в процесі зростання I_0 . По-друге, при досить потужному світловому потоці фотоефект пригнічується, що, як обговорювалося вище, пов'язано з повною іонізацією домішкових центрів при сильному освітленні.

Слід звернути увагу, що цей висновок, не дивлячись на його фізичну очевидність, не є достатньо обґрунтованим. Він випливає з виразу (7.110), при тому, що сам вираз (7.110) отримано в наближенні малості величини I_0 . Таким чином, коректно говорити лише про тенденцію придушення розглянутого динамічного фотоефекту з зростанням однорідної складової інтенсивності падаючого світла за рахунок виснаження концентрації неіонізованих домішок в зразку.

Необхідно відзначити, що даний динамічний фотоефект супроводжується виникненням в напівпровіднику в умовах квазінейтральності амбіполярного пакета нерівноважних носіїв струму, а не нерівноважного об'ємного заряду, як це зазвичай має місце у динамічних фотоелектричних вимірюваннях, що проводяться в умовах порушення квазінейтральності [250–252]. Більш того, наявність часової залежності концентрації носіїв струму в (7.95)-(7.96) не є визначальною для прояву досліджуваного явища. Можна було б вирішити систему рівнянь (7.95)-(7.98), взагалі нехтуючи членами $\partial n/\partial t$ і $\partial p/\partial t$ (хоча, звичайно, таке наближення не є фізично коректним), і отримати ненульовий фотоелектричний струм в замкнутому колі. Дійсно, фізична причина генерації фотоерс в розглянутому ефекті близька до розглянутої в пункті 7.2. Неоднорідність освітлення породжує неоднорідність рухливості носіїв. Рух інтерференційних смуг знімає симетрію задачі: вклади в ЕРС від процесів, що протікають на зростаючих і падаючих фронтах просторового розподілу рухливості, перестають компенсувати один одного. При цьому швидкість зміни концентрації нерівноважних носіїв в кожної точки зразка не робить вирішального впливу. Принциповим чинником є наявність зсуву фази між розподілами концентрації нерівноважних електронів і їх рухливості (тобто концентрації іонізованих домішок). Таким чином, даний фотоефект можна назвати квазістатичним.

Проаналізуємо залежність величини фотоелектричного струму короткого замикання j від основних параметрів, що фігурують в (7.110). Перш за все, слід зазначити, що величина j залежить від величини швидкості руху профілю інтенсивності світла v, а знак j — від напрямку руху інтерференційної картини (тобто від знака швидкості v), оскільки саме швидкість руху профілю інтенсивності світла, поряд з довжиною зразка, визначають величину параметра τ_v (див. (7.90)). При досить високій швидкості руху інтерференційних смуг $v \to \infty$ фотоефект зникає як $j \sim v^{-3}$. У той же час, для досить малої швидкості їх руху $j \sim v$. Останнє означає відсутність даного фотоефекту при висвітленні напівпровідника нерухомим симетричним (просторово-періодичним) розподілом інтенсивності освітлення.

З зазначеного вище випливає, що існує деяке оптимальне значення швидкості руху біжучої хвилі інтенсивності світла v^* , при якій фотоефект, що розглядається, виражений найбільшою мірою. Можна показати, що $|v^*| = L/2\pi\tau_v^*$, де $\tau_v^* = (\tau_R^2 + \tau_g^2 + \sqrt{\tau_R^4 + 14\tau_R^2\tau_g^2 + \tau_g^4})/2$.

Необхідно відзначити, що вищевикладені результати отримані в припущенні про постійну швидкість руху хвилі інтенсивності світла: v = const.Для змінної швидкості руху світлового профілю необхідно додаткове дослідження. Однак зрозуміло, що і в цьому випадку схожий динамічний фотоефект так само буде мати місце. Цілком ймовірно, в цьому випадку в силу істотної нелінійності залежності $j(\tau_v)$ спектр фотоелектричного струму короткого замикання буде містити змінні компоненти як на частоті зміни швидкості v, так і на її гармоніках. З аналізу виразу (7.110) видно, що величина j істотно залежить від довжини напівпровідника L як явно (оскільки L входить в знаменник виразу (7.110)), так і через залежність часів τ_v і τ_R від L. Можна показати, що при зменшенні довжини зразка струм в колі зникає як L^2 . У той же час, в досить довгих зразках також спостерігається зменшення фотоелектричного струму короткого замикання з ростом довжини зразка згідно із законом L^{-2} . Звідси можна зробити висновок, що існує деяка оптимальна довжина зразка, при якій даний фотоефект виражений в максимальному ступені.

Проаналізуємо залежність фотоелектричного струму *j* від часу життя носіїв τ . У разі гранично сильної рекомбінації $\tau \to 0$, отже, $\tau_R \to 0$ (див. (7.91)) і струм в колі зникає як $j \sim \tau \to 0$. Фізична причина цього результату цілком зрозуміла: гранично висока швидкість рекомбінації при квазінейтральності означає відсутність нерівноважних носіїв (див. Розділ 3). Згенеровані світлом електронно-діркові пари рекомбінують в місці іх виникнення, не встигнувши дати внесок у формування фотоерс . В протилежному граничному випадку при відсутності рекомбінації $\tau \to \infty$ ефективний час рекомбінації носіїв τ_R залишається кінцевим $\tau_R = L/4\pi^2 D_a$. Відповідно, залишається кінцевим і значення електричного струму в колі. Цікаво відзначити, що в граничному випадку відсутності рекомбінації для найближчих родинних механізмів утворення фотоерс — ЕРС Дембера і об'ємного фотоефекту — фотоерс безперервно зростає з ростом часу життя носіїв [83, 90, 225–227].

В даний час складно говорити про практичну застосовність передбаченого ефекту, скоріше він має чисто академічний інтерес. Однак, він може виступати джерелом шумів в фоторезисторах і фотоперетворювачах, і його врахування може бути актуальним при проектуванні зазначених електронних приладів.

7.5 Висновки до Розділу 7

Вивчені в цьому розділі фотоелектричні ефекти, що проявляються в однорідному по концентрації напівпровіднику внаслідок появи в ньому нерівноважних носіїв, мають наступні особливості.

- При однорідному освітленні напівпровідника, що має однорідний розподіл концентрації носіїв струму, але неоднорідний розподіл їх рухливості, виникає фотоерс. Зазначений об'ємний фотоефект в рівній мірі чутливий до неоднорідності рухливості як основних, так і неосновних носіїв.
- 2. У процесі формування фотоелектричного струму в напівпровідниковому гомогенному (тобто такому, що не містить металевої ділянки) замкнутому колі визначальним є наявність неосвітленому ділянки, що забезпечує рекомбінацію нерівноважних носіїв струму. У разі однорідного освітлення всього напівпровідникового кільця з неоднорідною рухливістю одного з типів носіїв ЕРС не виникає. Наявність же металевої ділянки, в якій нерівноважні носії не існують за визначенням, приводить до генерації фотоерс і при освітленні всього об'єму напівпровідника.

За винятком зазначеної особливості, наявність металевої ділянки електричного кола майже не впливає на об'ємний фотоефект в масивному концентраційно-однорідному напівпровіднику, довжина якого значно перевищує довжину амбіполярної дифузії. У диффузионно-тонких зразках при наявності металевої ділянки величина фотоерс може в три рази перевищувати фотоерс в аналогічному зразку без металевої ділянки кола. Крім того, в тонких зразках величина фотоерс практично не залежить від дифузійної довжини носіїв, на відміну від масивних зразків, де має місце квадратична залежність.

- 3. Якщо освітлення однорідного напівпровідникового зразка супроводжується як генерацією нерівноважних носіїв, так і зміною їх рухливості за рахунок іонізації домішкових центрів, неоднорідність інтенсивності світлового потоку може приводити до виникнення фотоерс. Характерною особливістю даного фізичного механізму формування фотоерс в однорідному напівпровіднику є нелінійна (кубічна) залежність величини фотоерс від інтенсивності світлового потоку при як завгодно малому рівні освітлення навіть в лінійному по концентрації носіїв струму наближенні. При збільшенні інтенсивності падаючого світла нелінійність залежності величини фотоерс від інтенсивності освітлення зменшується. При високій інтенсивності падаючого світла, що забезпечує практично повну іонізацію домішкових центрів, залежність величини фотоерс від інтенсивності освітлення стає лінійною.
- 4. При освітленні обмеженого однорідного монополярного багатодолинного напівпровідника спричинені світлом міждолинні переходи, і як наслідок, порушення рівноваги між підсистемами легких і важких носіїв струму приводить до виникнення ЕРС за механізмом фотоефекту Дембера. Фізичною причиною появи фотоерс є порушення співвідношень Ейнштейна між рухливістю і коефіцієнтом дифузії для системи електронів (як єдиної системи) в багатодолинному напівпровіднику.
- 5. В однорідному напівпровідниковому кільці, легованому домішками, здатними змінювати зарядовий стан під впливом світла, освітлення модульованим світловим потоком типу "біжуча хвиля" приводить до появи постійного електричного струму. Даний ефект обумовлений одночасним впливом світла на рухливість і концентрацію носіїв струму, порушенням просторової симетрії задачі рухом максимумів інтенсивності світла, а також наявністю в системі ієрархії характерних часів

рекомбінації домішкових центрів, нерівноважних носіїв струму і часу руху профілю інтенсивності світлового потоку уздовж зразка. Зазначений динамічний ефект не супроводжується появою в напівпровіднику нерівноважного об'ємного заряду, транспорт нерівноважних носіїв є амбіполярним.

- 6. Величина і знак динамічної фотоерс нелінійно залежать від швидкості та напрямку руху хвилі модуляції інтенсивності світлового потоку. Існує оптимальна швидкість руху хвилі, при якій електричний струм в колі має максимальну величину. При нерухомому розподілі інтенсивності освітлення або гранично високій швидкості його руху фотоефект зникає. Залежність фотоелектричного струму короткого замикання в замкнутому напівпровідниковому колі є складною нелінійною функцією параметрів напівпровідника і його розмірів. Існує оптимальна довжина напівпровідника, при якій зазначений фотоефект виражений найбільшою мірою.
- 7. Динамічний фотоефект в однорідному напівпровіднику характеризується нелінійною (квадратичною) залежністю від амплітуди модуляції інтенсивності світла, а також є чутливим до середнього значення інтенсивності падаючого світла. При досить великій середный інтенсивності падаючого світла відбувається придушення фотоефекту. Крім того, при відповідному підборі параметрів можна спостерігати зміну знака фотоерс і електричного струму в колі з зростанням середньої інтенсивності світла.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розвинено дифузійно-дрейфову теорію кінетичних явищ в плазмоподібних середовищах з кількома типами нерівноважних носіїв заряду і досліджено низку фізичних ефектів, що з цього випливають. Серед отриманих результатів найважливішими є наступні:

- З перших принципів отримано загальну систему граничних умов для дослідження стаціонарних транспортних процесів в структурах з напівпровідників і металів в різних поєднаннях при будь-якому співвідношенні між розмірами зразка і радіусом екранування Дебая без додаткових припущень при довільній величині електричного струму через контакт.
- 2. Розроблено модель рекомбінаційних процесів в неоднорідних температурних полях для лінійної дифузійно-дрейфової теорії транспортних процесів в обмежених плазмоподібних середовищах з кількома типами носіїв струму, в якій усунуті протиріччя, властиві відомим моделям. Показано, що в стаціонарних умовах строге введення поняття часу життя нерівноважного носія заряду або неможливо взагалі, або час життя є єдиним для електронів і дірок.
- 3. Передбачено новий механізм нелінійності в біполярних напівпровідниках з гарячими носіями струму, викликаний порушенням динамічного генераційно-рекомбінаційного балансу між підсистемами носіїв заряду з різною температурою. Встановлено умови прояву передбаченого механізму та залежність величини його впливу на ВАХ зразка від типу напівпровідника, його температури та виду потенціалу розсіювачів.
- 4. Продемонстровано, що при появі гарячих носіїв нерівноважна теплова генерація носіїв виявляється повністю еквівалентною зовнішній ге-

нерації електрон-діркових пар. При розігріві електронної підсистеми за рахунок поглинання світла вільними носіями можлива поява електрорушійної сили навіть при нульовому коефіцієнті Зеєбека і енергії фотонів, недостатньої для генерації електрон-діркових пар.

- 5. Показано, що при наявності нерівноважних носіїв величина термоерс, як і опір зразка, визначаються не тільки коефіцієнтами Зеєбека та провідністю, а й параметрами рекомбінаційних механізмів. Традиційна теорія термоелектрики може бути застосована для аналізу біполярних напівпровідників тільки при наявності єдиного рівня Фермі (наприклад, в граничному випадку сильної рекомбінації).
- 6. Продемонстровано, що в однорідному напівпровіднику в нестаціонарному температурному полі можлива поява поперечного динамічного термоелектричного ефекту, що полягає в генерації електрорушійної сили і електричного струму в напрямку фазової швидкості температурної хвилі. В ізотропному середовищі вектор термоелектричного струму є ортогональним вектору середнього теплового потоку в напівпровіднику. Встановлено умови і особливості прояву ефекту. Існують оптимальні значення довжини і швидкості температурної хвилі, при яких передбачений ефект проявляється найбільшою мірою, що робить передбачений ефект зручним для виміру часу життя і рухливості носіїв струму.
- 7. Вперше проаналізовано вплив термоелектричного поля і зміни темпу термічної генерації носіїв в неоднорідних температурних полях на величину фотоакустичного відгуку. Отримано результати для одно- і двотемпературних моделей фотоакустичного ефекту, досліджено вплив довжини зразка, поверхневої теплопровідності його задньої стінки, температурної залежності перетину міжзонної рекомбінації та сили елек-

трон-фононної взаємодії на амплітуду та фазу фотоакустичного сигналу.

- 8. Показано, що неоднорідність рухливості носіїв струму в концентраційно-однорідному біполярному напівпровіднику є причиною появи фотоерс. При просторово неоднорідному освітленні частини однорідного напівпровідникового замкнутого кола неоднорідність рухливості носіїв струму може бути індукована світлом за рахунок іонізації домішкових центрів. В останньому випадку величина фотоерс має нелінійну (кубічну) залежність від інтенсивності падаючого світлового потоку при як завгодно малому рівні освітлення.
- 9. Передбачено появу постійного електричного струму в освітленому модульованим світловим потоком типу "біжуча хвиля" кільці з однородного напівпровідника, легованого домішками, що змінюють зарядовий стан під впливом світла. Існує оптимальна довжина хвилі і швидкість її руху, при яких електричний струм має максимальну величину.
- 10. Передбачено фотоефект Дембера в однорідному багатодолинному напівпровіднику без генерації електронно-діркових пар за рахунок індукованих світлом міждолинних переходів. Фізичною причиною появи фотоерс є порушення співвідношень Ейнштейна між рухливістю і коефіцієнтом дифузії для системи електронів (як єдиної системи) в багатодолинному напівпровіднику.

Таким чином, отримані результати розв'язують важливу наукову проблему фізичної електроніки, пов'язану з дослідженням транспорту нерівноважних носіїв заряду в плазмоподібних середовищах та їх взаємодії з електромагнітними полями.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- Y. G. Gurevich, M. A. Rodríguez, J. L. Carillo, L. Meza-Montes, and I. N. Volovichev, "Contact phenomena in low-dimensional systems with hot electrons and phonons," *Lith. J. Phys.*, vol. 35, pp. 608–610, 1995.
- 2. Y. G. Gurevich and I. N. Volovichev, "Forgotten mechanism of nonlinearity in the theory of hot electrons," *Phys. Rev. B*, vol. 60, pp. 7715–7717, 1999.
- 3. И. Н. Воловичев, Ю. Г. Гуревич, "Генерационно-рекомбинационные процессы в полупроводниках," *ФТП*, vol. 35, pp. 321–329, 2001.
- 4. I. N. Volovichev, L. Villegas-Lelovsky, G. González de la Cruz, and Y. G. Gurevich, "The effect of carrier diffusion and recombination in semiconductors on the photoacoustic signal," *Physica B*, vol. 304, pp. 410–422, 2001.
- Y. Gurevich, G. Logvinov, I. Volovichev, G. Espejo, O. Titov, and A. Meriuts, "The role of non-equilibrium carriers in the formation of thermo-e.m.f. in bipolar semiconductors," *Phys. Status Solidi B*, vol. 231, pp. 278–293, 2002.
- I. N. Volovichev, G. Espejo, Y. G. Gurevich, O. Y. Titov, and A. Meriuts, "Recombination in semiconductors: Appearance of nonequilibrium carriers due to injection or redistribution in the sample," *Jpn. J.Appl. Phys.*, vol. 41, p. 182, 2002.
- A. Meriuts, O. I. Lyubimov, I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, G. Espejo, and O. Y. Titov, "Linear transport in bounded semiconductors under a thermal field: emergence of nonequilibrium charge carriers," *Functional Materials*, vol. 2, pp. 176–181, 2002.
- 8. L. Villegas-Lelovsky, G. Gonzalez de la Cruz, Y. G. Gurevich, and I. N. Volovichev, "Photoacoustic effect in semiconductors: Influence of field temperature on carrier diffusion and recombination," *Rev. Sci. Instrum.*,

vol. 74, pp. 556–558, 2003.

- I. N. Volovichev, G. N. Logvinov, O. Y. Titov, and Y. G. Gurevich, "Recombination and lifetimes of charge carriers in semiconductors," *J. Appl. Phys.*, vol. 95, pp. 4494–4496, 2004.
- Y. G. Gurevich, H. Lohvinov, M. Cruz-Irisson, O. Titov, G. Espejo-López, and I. Volovichev, "Electric current of hot electrons in semiconductor thin films," *Phys. Status Solidi C*, vol. 1, pp. S100–S103, 2004.
- Y. G. Gurevich, A. Ortiz, G. N. Logvinov, I. N. Volovichev, O. Y. Titov, J. Giraldo, and A. Gutierrez, "Transport phenomena in bipolar semiconductors: a new point of view," *Microelectr. J.*, vol. 36, pp. 886–889, 2005.
- L. Villegas-Lelovsky, G. Gonzalez de la Cruz, and I. N. Volovichev, "Effect of electron-phonon energy exchange on thermal wave propagation in semiconductors considering carrier diffusion and recombination," *Phys. Stat. Sol. B*, vol. 242, pp. 971–982, 2005.
- Y. G. Gurevich, J. E. Velázquez-Pérez, G. Espejo-López, I. N. Volovichev, and O. Y. Titov, "Transport of nonequilibrium carriers in bipolar semiconductors," J. Appl. Phys., vol. 101, no. 2, p. 023705, 2007.
- I. N. Volovichev, J. E. Velázquez-Perez, and Y. G. Gurevich, "Transport boundary condition for semiconductor structures," *Solid-State Electron.*, vol. 52, pp. 1703–1709, 2008.
- I. Volovichev, J. Velázquez-Pérez, and Y. Gurevich, "Transport boundary conditions for solar cells," *Solar Energy Mater. Solar Cells*, vol. 93, pp. 6–10, 2009.
- I. Volovichev, "New non-linear photovoltaic effect in uniform bipolar semiconductor," J. Appl. Phys., vol. 116, p. 193701, 2014.
- 17. I. Volovichev, "Nonuniform current-carrier mobility-induced bulk photovoltaic effect in bounded semiconductors," *Phys. Status Solidi*

B, vol. 252, pp. 1804–1809, 2015.

- I. N. Volovichev and Y. G. Gurevich, "Mechanisms of charge carriers nonequilibrium in transport processes in bipolar semiconductors," *Curr. Appl. Phys.*, vol. 16, no. 2, pp. 191–196, 2016.
- I. N. Volovichev, "Dynamic thermoelectricity in uniform bipolar semiconductor," *Physica B*, vol. 492, pp. 70–76, 2016.
- I. Volovichev, "Dynamic thermopower in uniform unipolar semiconductor," J. Appl. Phys., vol. 119, p. 095712, 2016.
- I. N. Volovichev, O. Y. Titov, and Y. G. Gurevich, "Photovoltaic effect in unipolar multivalley semiconductors," *Philos. Mag.*, vol. 97, pp. 683–692, 2017.
- I. N. Volovichev, "Direct current in non-steady-state photovoltaic effect," *Phys. Sci. Int. J.*, vol. 17, pp. 1–11, 2018.
- O. Titov, A. Meriuts, G. Espejo, I. Volovichev, Y. Gurevich, and O. I. Lyubimov, "Thermal and electric transport in semiconductors under a thermal field: Emergence of nonequilibrium charge carriers," in *Proc.* 15th European Conference on Thermophysical Properties, (Wurzburg, Germany), pp. 737–743, Sept. 1999.
- 24. A. F. Carballo-Sanchez, G. Espejo, I. N. Volovichev, and Y. G. Gurevich, "Transient thermoelectric phenomena as new method for the characterization of semiconducror materials," in *Digest of the 1999 Workshop on Simulation and Characterization Techniques in Semiconductors, Third Annual Workshop*, (Mexico D. F., Mexico), pp. 12–16, Sept. 1999.
- 25. G. Espejo, I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, G. N. Logvinov, A. Meriuts, and O. Y. Titov, "Thermal field—the source of the emergence of nonequilibrium charge carriers in semiconductors," in *Proc. of the* 22nd International Conferenceon Microelectronics, (Nis, Yugoslavia),

pp. 181–184, May 2000.

- 26. I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, and O. Y. Titov, "Recombination in inhomogeneous electron and phonon temperature fields," in *Abstracts of the* 25th International Conference on the Physics of Semiconductor, (Osaka, Japan), p. 721, Sept. 2000.
- 27. Y. Gurevich, G. Logvinov, O. Titov, and I. Volovichev, "Nonequilibrium carriers of charge in theory of thermoelectric phenomena," in *Proc. of the 22 International Conference on Thermoelectrics*, (La Grande-Motte, France), pp. 464–467, Aug. 2003.
- 28. Y. Gurevich, H. Logvinov, O. Titov, and I. Volovichev, "Electric and heat transport in thin bipolar semiconductor films," in *Mamepianu IX Міжнародної конференції МКФТТП-IX*, (Івано-Франківськ, Україна), pp. 30–31, Травень 2003.
- 29. Y. Gurevich, O. Titov, I. Volovichev, and G. Logvinov, "Transport of nonequilibrium charge carriers in semiconductor structures," in *Abstracts* of the 14th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors (HCIS-14), (Chicago, USA), p. P7, July 2005.
- 30. Y. G. Gurevich, J. E. Velazquez-Perez, and I. N. Volovichev, "Boundary conditions for current in solar cells," in *Abstracts Book of XVI International Materials Research Congress*, (Cancun, Mexico), p. 57, Oct. 2007.
- 31. Y. G. Gurevich, I. Volovichev, and G. Gonzalez de la Cruz, "Effective thermal parameters of layered films: An application to pulsed photothermal techniques," in *Book of Abstracts of the 28th International Conference on Materials, Surfaces and Vacuum*, (Veracruz, Mexico), p. 176, Sept. 2008.
- 32. I. N. Volovichev, J. E. Velazquez-Perez, and Y. G. Gurevich, "New boundary conditions for the study of charge transport in solid-state devices," in *Proc.* of the 26th International Conference on Microelectronics, (Nis, Serbia), pp. 151–154, May 2008.

- 33. I. Volovichev and Y. Gurevich, "New about the solar cells," in Proc. VIII International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, (Puebla, Mexico), p. 294, Sept. 2015.
- 34. I. Volovichev, O. Titov, and Y. Gurevich, "Photovoltaic effect in unipolar semiconductors," in Proc. IX International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, (Mazatlan, Mexico), p. 362, Sept. 2016.
- A. G. Bell, "LXVIII. Upon the production of sound by radiant energy," *Philos. Mag.*, vol. 11, pp. 510–528, 1881.
- M. A., Photoacoustic And Thermal Wave Phenomena In Semiconductors.
 A.: North-Holland, 1987.
- K. Michaelian, Photoacoustic IR Spectroscopy: Instrumentation, Applications and Data Analysis. Wiley, 2010.
- 38. U. Haken, M. Hundhausen, and L. Ley, "Moving grating technique: A new method for the determination of electron and hole mobilities and their lifetime," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 63, pp. 3066–3068, 1993.
- 39. U. Haken, M. Hundhausen, and L. Ley, "Analysis of the movingphotocarrier-grating technique for the determination of mobility and lifetime of photocarriers in semiconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 51, pp. 10579–10590, 1995.
- 40. J. Strauss, M. Hundhausen, and L. Ley, "An optical heterodyne experiment for sensitive detection of laser induced photocarrier gratings in semiconductors," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 69, pp. 875–877, 1996.
- 41. A. Jüngel, Transport Equations for Semiconductors. Springer, 2009.
- 42. W. Van Roosbroeck, "Theory of flow of electron and holes in germanium and other semiconductors," *Bell Syst. Techn. J.*, vol. 29, pp. 560–607, 1950.
- F. Poupaud, "Diffusion approximation of the linear semiconductor boltzmann equation: analysis of boundary layers," *Asympt. Anal.*, vol. 4, pp. 293–317, 1991.

- 44. N. Ben Abdallah and M. Tayeb, "Diffusion approximation for the one dimensional boltzmann-poisson system," *Discrete Contin. Dyn. Sys. B*, vol. 4, pp. 1129–1142, 2004.
- N. Masmoudi and M. Tayeb, "Diffusion limit of a semiconductor boltzmannpoisson system," SIAM J. Math. Anal., vol. 38, pp. 1788–1807, 2007.
- 46. F. Poupaud and C. Schmeiser, "Charge transport in semiconductors with degeneracy effects," *Math. Meth. Appl. Sci.*, vol. 14, pp. 301–318, 1991.
- 47. F. Golse and F. Poupaud, "Limite fluide des quations de boltzmann des semiconducteurs pour une statistique de fermi-dirac," Asympt. Anal., vol. 6, pp. 135–160, 1992.
- P. Markowich and C. Schmeiser, "Relaxation time approximation for electron-phonon interaction in semiconductors," *Math. Models Meth. Appl. Sci.*, vol. 5, pp. 519–527, 1995.
- F. Markowich, P. abd Poupaud and C. Schmeiser, "Diffusion approximation of nonlinear electron phonon collision mechanisms," *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér*, vol. 29, pp. 857–869, 1995.
- F. Poupaud and J. Soler, "Parabolic limit and stability of the vlasov-fokkerplanck system," *Math. Models Meth. Appl. Sci.*, vol. 10, pp. 1027–1045, 2000.
- M. Mock, "On equations describing steady-state carrier distributions in a semiconductor device," *Commun. Pure Appl. Math.*, vol. 25, pp. 781–792, 1972.
- M. Mock, "An initial value problem from semiconductor device theory," SIAM J. Math. Anal., vol. 5, pp. 597–612, 1974.
- H. Gajewski and K. Gröger, "On the basic equations for carrier transport in semiconductors," J. Math. Anal. Appl., vol. 113, pp. 12–35, 1986.
- 54. H. Gajewski and K. Gröger, "Semiconductor equations for variable mobilities based on boltzmann statistics or fermi-dirac statistics," *Math.*
Nachr., vol. 140, pp. 7–36, 1989.

- K. Gröger and R. J., "Uniqueness for the two-dimensional semiconductor equations in case of high carrier densities," *Math. Z.*, vol. 213, pp. 523–530, 1993.
- 56. H. Gummel, "A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations," *IEEE Trans. Electr. Devices*, vol. ED-11, pp. 455–465, 1964.
- D. Scharfetter and H. Gummel, "Large signal analysis of a silicon read diode oscillator," *IEEE Trans. Electr. Devices*, vol. ED-16, pp. 64–77, 1969.
- 58. F. Brezzi, L. Marini, and H. Pietra, "Méthodes d'elements finis mixtes et schéma de scharfetter-gummel," C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, vol. 305, pp. 599–604, 1987.
- F. Brezzi, L. Marini, and P. Pietra, "Two-dimensional exponential fitting and applications to drift-diffusion models," *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 26, pp. 1342–1355, 1989.
- W. Hänsch, The Drift-Diffusion Equation and Its Applications in MOSFET Modeling. Vienna: Springer, 1991.
- S. Selberherr, Analysis and Simulation of Semiconductor Devices. Vienna: Springer, 1984.
- 62. H. U. Baranger and J. W. Wilkins, "Ballistic structure in the electron distribution function of small semiconducting structures: General features and specific trends," *Phys. Rev. B*, vol. 36, pp. 1487–1502, 1987.
- H. U. Baranger and J. W. Wilkins, "Ballistic electrons in an inhomogeneous submicron structure: Thermal and contact effects," *Phys. Rev. B*, vol. 30, pp. 7349–7351, 1984.
- 64. S. A. Trugman and A. J. Taylor, "Analytic solution of the boltzmann equation with applications to electron transport in inhomogeneous semiconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 33, pp. 5575–5584, 1986.

- T. Kuhn and G. Mahler, "Carrier kinetics in a surface-excited semiconductor slab: Influence of boundary conditions," *Phys. Rev. B*, vol. 35, pp. 2827–2833, 1987.
- N. Sano, "Kinetic study of velocity distributions in nanoscale semiconductor devices under roomtemperature operation," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 85, pp. 4208–4210, 2004.
- D. Csontos and S. E. Ulloa, "Quasiballistic, nonequilibrium electron distribution in inhomogeneous semiconductor structures," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 86, p. 253103, 2005.
- S. Taguchi and A. Jüngel, "A two-surface problem of the electron flow in a semiconductor on the basis of kinetic theory," J. Stat. Phys., vol. 130, pp. 313–342, 2008.
- M. Brunk and A. Jüngel, "Self-heating in a coupled thermo-electric circuitdevice model," J. Comput. Electron., vol. 10, pp. 163–178, 2011.
- P. Degond and C. Schmeiser, "Kinetic boundary layers and fluid-kinetic coupling in semiconductors," *Transport Theor. Stat.*, vol. 28, pp. 31–55, 1999.
- W. Mönch, Semiconductor Surfaces and Interfaces. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- A. Yamnahakki, "Second order boundary conditions for the drift-diffusion equations for semiconductors," *Math. Models Methods Appl. Sci.*, vol. 5, pp. 429–456, 1995.
- 73. С. Зи, Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир, 1984.
- 74. J. Singh, Semiconductor Devices : Basic Principles. Wiley India Pvt. Limited, 2007.
- 75. C. Cercignani, I. M. Gamba, and C. D. Levermore, "A drift-collision balance for a boltzmann-poisson system in bounded domains," *SIAM J. Appl. Math.*, vol. 61, pp. 1932–1958, 2001.

- C. Ringhofer, C. Schmeiser, and A. Zwirchmayr, "Moment methods for the semiconductor boltzmann equation on bounded position domains," *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 39, pp. 1078–1095, 2001.
- P. Degond and C. Schmeiser, "Macroscopic models for semiconductor heterostructures," J. Math. Phys., vol. 39, pp. 4634–4663, 1998.
- 78. A. Konin, "Anomalous temperature distribution created in a semiconductor by strongly absorbed light," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 18, p. L17, 2003.
- A. Konin, "Role of space charge in the resistance formation in a bipolar semiconductor sample," *Semiconductors*, vol. 38, pp. 284–287, Mar 2004.
- M. Krcmar and W. M. Saslow, "Exact surface solutions for semiconductors: The dember effect and partial currents," *Phys. Rev. B*, vol. 65, p. 233313, 2002.
- 81. J. Chazalviel, Coulomb Screening by Mobile Charges: Applications to Materials Science, Chemistry, and Biology. Birkhäuser Boston, 2012.
- S. R. In't Hout, "Quasineutrality in semiconductors," J. Appl. Phys., vol. 79, no. 11, pp. 8435–8444, 1996.
- В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников, Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.
- О. Г. Ситенко, В. М. Мальнєв, Основи теорії плазми. К: Наукова думка, 1994.
- Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теоретическая физика. Том VIII. Электродинамика сплошных сред. М.: ФМЛ, 2005.
- A. Konin, "Effect of energy-band bending on the thermopower in bipolar semiconductors," *Semiconductors*, vol. 41, pp. 272–276, 2007.
- A. Konin, "A new approach for investigation of photo-induced electromotive force in semiconductors," J. Phys.: Condens. Matter, vol. 19, p. 016214, 2007.
- 88. A. Konin and R. Raguotis, "Hall emf features in bipolar media," J. Phys.:

Condens. Matter, vol. 12, pp. 9163–9166, 2000.

- 89. Р. Смит, Полупроводники. М.: Мир, 1982.
- 90. К. Зеегер, Физика полупроводников. М.: Мир, 1977.
- 91. O. Y. Titov, J. Giraldo, and Y. G. Gurevich, "Boundary conditions in an electric current contact," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 80, no. 17, pp. 3108–3110, 2002.
- 92. В. С. Вавилов, "Излучательная рекомбинация в полупроводниках," УФН, vol. 68, pp. 247–260, 1959.
- 93. A. Elhami Khorasani, D. K. Schroder, and T. L. Alford, "Optically excited mos-capacitor for recombination lifetime measurement," *IEEE Electr. Device L.*, vol. 35, pp. 986–988, 2014.
- 94. J. Iveland, L. Martinelli, J. Peretti, J. S. Speck, and C. Weisbuch, "Direct measurement of auger electrons emitted from a semiconductor lightemitting diode under electrical injection: Identification of the dominant mechanism for efficiency droop," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 177406, 2013.
- 95. A. Pivrikas, H. Neugebauer, and N. S. Sariciftci, "Charge carrier lifetime and recombination in bulk heterojunction solar cells," *IEEE J. Sel. Top. Quant.*, vol. 16, pp. 1746–1758, 2010.
- 96. E. Schöll, Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors: Self-Organization Induced by Generation and Recombination Processes. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- 97. W. Shockley and W. T. Read, "Statistics of the recombinations of holes and electrons," *Phys. Rev.*, vol. 87, pp. 835–842, 1952.
- 98. В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Яссиевич, Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. С.-Петербург: Петербургский институт ядерной физики, 1997.
- 99. W. Van Roosbroeck and W. Shockley, "Photon-radiative recombination of electrons and holes in germanium," *Phys. Rev.*, vol. 94, pp. 1558–1560, 1954.

- 100. P. T. Landsberg, Recombination in Semiconductors. CUP, 2003.
- 101. С. М. Рывкин, Рекомбинация в полупроводниках. Полупроводники в науке и технике, т.И. М.: Изд-во АН СССР, 1958.
- 102. J. Divkovic Puksec, "Recombination processes and holes and electrons lifetimes," Automatika, vol. 43, pp. 47–53, 2002.
- 103. T. Goudon, V. Miljanovic, and C. Schmeiser, "On the shockley-readhall model: Generation-recombination in semiconductors," SIAM J. Appl. Math., vol. 67, pp. 1183–1201, 2007.
- 104. M. Krcmar and W. M. Saslow, "Irreversible thermodynamics and shockley recombination velocity: Application to photoabsorption near a surface," *Phys. Rev. B*, vol. 97, p. 085308, 2018.
- 105. D. A. Neamen, Semiconductor physics and devices: basic principles. McGraw-Hill, 2003.
- 106. J. S. Blakemore, *Semiconductor Statistics*. Dover, 2002.
- 107. В. Шокли, Теория электронных полупроводников. Приложения к теории транзисторов. М.: Изд-во иностранной литературы, 1953.
- 108. Л. В. Келдыш, "К теории ударной ионизации в плупроводниках," ЖЭТФ, vol. 21, p. 1135, 1965.
- 109. M. Asche, H. Kostial, and O. G. Sarbey, "Ionization of low donor levels and recombination of hot electrons in n-si at low temperatures," *Phys. Status Solidi B*, vol. 91, pp. 521–530, 1979.
- 110. M. H. Jørgensen, "Electron-phonon scattering and high-field transport in *n*-type si," *Phys. Rev. B*, vol. 18, pp. 5657–5666, 1978.
- E. O. Kane, "Band structure of indium antimonide," J. Phys. Chem. Solids, vol. 1, pp. 249–261, 1957.
- 112. В. А. Погребняк, "Некоторые кинетические эффекты в полупроводниках с нестандартной зоной в сильных электрических и магнитных полях," ФТТ, vol. 14, pp. 1090–1099, 1972.

- 113. E. M. Conwell, *High Field Transport in Semiconductors*. New York: Academic, 1967.
- 114. Ф. Г. Басс, Ю. Г. Гуревич, Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Наука, 1975.
- 115. Ф. Г. Басс, В. С. Бочков, Ю. Г. Гуревич, Электроны и фононы в ограниченных полупроводниках. М.: Наука, 1984.
- 116. Φ. Г. Басс, Ю. Г. Гуревич, "Нелинейная теория распространения электромагнитных волн в плазме твердого тела и газового разряда," УΦΗ, vol. 103, pp. 447–468, 1971.
- 117. Э. И. Рашба, З. С. Грибников, В. Я. Кравченко, "Анизотропные размерные эффекты в полупроводниках и полуметаллах," УФН, vol. 119, pp. 3–47, 1976.
- 118. C. Jacoboni and L. Reggiani, "Bulk hot-electron properties of cubic semiconductors," Adv. Phys., vol. 28, pp. 493–553, 1979.
- 119. Ф. Г. Басс, В. С. Бочков, and Ю. Г. Гуревич, "Вольт-амперные характеристики ограниченных полупроводников," $\Phi T\Pi$, vol. 7, pp. 1–20, 1973.
- 120. V. S. Bochkov and Y. G. Gurevich, "Heat conduction in bounded semiconductors," Sov. Phys. Semicond., vol. 17, pp. 456–457, 1983.
- E. M. Conwell, "Disturbances of carrier concentration in high electric field," J. Phys. Chem. Solids, vol. 17, pp. 342–344, 1961.
- 122. E. M. Conwell and J. Zucker, "The recombination of hot carriers—theoretical," J. Phys. Chem. Solids, vol. 22, pp. 149–153, 1961.
- 123. J. Zucker and E. M. Conwell, "The recombination of hot carriers in germanium-experimental," J. Phys. Chem. Solids, vol. 22, pp. 141–147, 1961.
- 124. J. Zucker and E. M. Conwell, "Speed-dependence of electronic capture cross

sections in ge," J. Phys. Chem. Solids, vol. 23, pp. 1549–1550, 1962.

- 125. Ю. Г. Гуревич, Г. Н. Логвинов, Г. Эспехо, О. Ю. Титов, and А. Мериуц,
 "Роль неравновесных носителей в линейном токопереносе (закон Ома),"
 ФТП, vol. 34, pp. 783–786, 2000.
- 126. K. Fobelets, W. Jeamsaksiri, C. Papavasilliou, T. Vilches, V. Gaspari, J. E. Velazquez-Perez, K. Michelakis, T. Hackbarth, and U. König, "Comparison of sub-micron si:sige heterojunction nfets to si nmosfet in present-day technologies," *Solid-State Electron.*, vol. 48, pp. 1401–1406, 2004.
- 127. T. Hasegawa and M. Nakayama, "Unique characteristics of nonequilibrium carrier transport dynamics in an undoped gaas/n-type gaas epitaxial structure," Appl. Phys.s Express, vol. 9, p. 071001, 2016.
- 128. J. Hebling, M. C. Hoffmann, H. Y. Hwang, K. L. Yeh, and K. A. Nelson, "Observation of nonequilibrium carrier distribution in ge, si, and gaas by terahertz pump-terahertz probe measurements," *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 035201, 2010.
- 129. H. Yin, T. Li, W. Hu, W. Wang, N. Li, X. Chen, and W. Lu, "Nonequilibrium carrier distribution in semiconductor photodetectors: Surface leakage channel under illumination," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, p. 263508, 2010.
- 130. L. Kronik and Y. Shapira, "Surface photovoltage phenomena: theory, experiment, and applications," Surf. Sci. Rep., vol. 37, pp. 1–206, 1999.
- 131. W. M. Saslow, "What happens when you leave the car lights on overnight: Violation of local electroneutrality in slow, steady discharge of a lead-acid cell," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, pp. 4849–4852, 1996.
- 132. C. E. Korman and I. D. Mayergoyz, "A globally convergent algorithm for the solution of the steady-state semiconductor device equations," J. Appl. Phys., vol. 68, pp. 1324–1334, 1990.
- 133. Y. G. Gurevich, O. Y. Titov, G. N. Logvinov, and O. I. Lyubimov, "Nature

of the thermopower in bipolar semiconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 51, pp. 6999–7004, 1995.

- 134. T. J. Seebeck, Magnetische Polarisation der Metalle und Erze durch Temperatur-Differenz. Reports of the Royal Prussian Academy of Science, Berlin., 1823.
- 135. E. Velmre, "Thomas johann seebeck," Proc. Est. Acad. Sci. Eng., vol. 13, pp. 276–282, 2007.
- 136. N. S. Lidorenko and A. Y. Terekov, "On the history of thermoelectricity development in russia," J. Thermoelectric., vol. 2, pp. 32–37, 2007.
- 137. M. A. Korzhuyev and I. V. Katin, "On the sequence of discovery of the basic thermoelectric effects," J. Thermoelectric., vol. 3, p. 79, 2011.
- L. I. Anatychuk, "Seebeck or Volta?," J. Thermoelectric., vol. 1, pp. 9–10, 1994.
- 139. W. T. B. Kelvin, J. Larmor, and J. P. Joule, Mathematical and Physical Papers, vol. 1. University Press, 1882.
- 140. E. Altenkirch, "über den nutzeffekt der thermosäulen," Phys. Z., vol. 10, pp. 560–580, 1909.
- 141. E. Altenkirch, "Elektrothermische kälteerzeugung und reversible elektrische heizung," Phys. Z., vol. 12, pp. 920–924, 1911.
- 142. А. Ф. Иоффе, *Полупроводниковые термоэлементы*. М., Л.: Изд-во АН СССР, 1960.
- 143. А. Ф. Иоффе, Энергетические основы термоэлектрических батарей из полупроводников. Л.: Изд-во АН СССР, 1950.
- 144. K. Peschke, "Thermoelemente und gleichstromthermogeneratoren," *Electr. Eng. (Arch. Elektrotech.)*, vol. 43, pp. 328–354, 1957.
- 145. G. S. Nolas, J. Sharp, and J. Goldsmid, *Thermoelectrics: Basic Principles and New Materials Developments*. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- 146. D. M. Rowe, *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano.* CRC Press, 2005.

- 147. C. Goupil, Continuum Theory and Modeling of Thermoelectric Elements. Wiley, 2016.
- 148. V. Zlatic and R. Monnier, Modern Theory of Thermoelectricity. OUP Oxford, 2014.
- 149. L. I. Anatychuk, Thomas Johann Seebeck and Thermoelectricity. XV International Forum on Thermoelectricity, Tallinn, Estonia, 2013.
- 150. А. И. Ансельм, Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
- H. J. Goldsmid, Introduction to Thermoelectricity. Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- 152. В. И. Кайданов, А. Б. Нуромский, Электропроводность, термоэлектрические явления и теплопроводность полупроводников. Л.: ЛПИ, 1981.
- 153. D. M. Rowe and C. M. Bhandari, Modern Thermoelectrics. Reston Publishing Company, 1983.
- 154. S. Vackova, K. Zdansky, K. acek, L. Scherback, P. Foychuk, and M. Ilaschouk, "Phonon drag effect in Cd_{1-x}Zn_xTe in dependence on x: Minimum at x=0.04," *Phys. Stat. Sol. (a)*, vol. 177, pp. 263–265, 2000.
- 155. C. Jácome, M. Flórez, Y. G. Gurevich, J. Giraldo, and G. Gordillo, "Characterization of CdS_xTe_{1-x} thin films through thermoelectric power measurements," J. Phys. D: Appl. Phys., vol. 34, pp. 1862–1867, 2001.
- 156. Y. G. Gurevich and I. Lashkevych, "Interaction of the thermal and concentration nonequilibriums in a bipolar semiconductor: Linear transport phenomena," *Int. J. Thermophys.*, vol. 35, pp. 375–381, 2014.
- 157. I. Lashkevych and Y. G. Gurevich, "Linear electrical conductivity of a bipolar semiconductor: Heating and recombination," Int. J. Thermophys., vol. 37, p. 1, 2016.
- 158. J. R. Sootsman, D. Y. Chung, and M. G. Kanatzidis, "New and old concepts in thermoelectric materials," *Angew. Chem. Int. Edit.*, vol. 48,

pp. 8616–8639, 2009.

- 159. A. Bulusu and D. G. Walker, "Review of electronic transport models for thermoelectric materials," *Superlattice Microst.*, vol. 44, pp. 1–36, 2008.
- 160. W. G. Zeier, A. Zevalkink, Z. Gibbs, G. Hautier, G. M. Kanatzidis, and J. G. Snyder, "Thinking like a chemist: Intuition in thermoelectric materials," *Angew. Chem. Int. Edit.*, vol. 55, pp. 6826–6841, 2016.
- 161. G. Tan, L.-D. Zhao, and M. G. Kanatzidis, "Rationally designing high-performance bulk thermoelectric materials," *Chem. Rev.*, vol. 116, pp. 12123–12149, 2016.
- 162. G. D. Mahan and J. O. Sofo, "The best thermoelectric," P. Natl. Acad. Sci. USA, vol. 93, pp. 7436–7439, 1996.
- 163. Y. Pei, X. Shi, A. LaLonde, H. Wang, L. Chen, and G. J. Snyder, "Convergence of electronic bands for high performance bulk thermoelectrics," *Nature*, vol. 473, pp. 66–69, 2011.
- 164. P. Norouzzadeh and D. Vashaee, "Classification of valleytronics in thermoelectricity," Sci. Rep.-UK, vol. 6, p. 22724, 2016.
- 165. J. Mao, W. Liu, and Z. Ren, "Carrier distribution in multi-band materials and its effect on thermoelectric properties," J. Materiomics, vol. 2, pp. 203–211, 2016.
- 166. W. Chen, P. Wu, X. Wang, and Y. Lin, "Power output and efficiency of a thermoelectric generator under temperature control," *Energ. Convers. Manage.*, vol. 127, pp. 404–415, 2016.
- 167. L. Chen and J. Lee, "Efficiency enhancement of an industrial-scale thermoelectric generator system by periodically inputting thermal power," *Energ. Convers. Manage.*, vol. 119, pp. 75–80, 2016.
- 168. O. Entin-Wohlman, Y. Imry, and A. Aharony, "Enhanced performance of joint cooling and energy production," *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 054302, 2015.
- 169. A. Kyarad and H. Lengfellner, "Transverse peltier effect in tilted pb-bi2te3

multilayer structures," Appl. Phys. Lett., vol. 89, p. 192103, 2006.

- 170. N. Nguyen and K. V. Pochiraju, "Behavior of thermoelectric generators exposed to transient heat sources," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 51, pp. 1–9, 2013.
- 171. A. P. Baranov, Y. G. Manasyan, and A. E. Solov'ev, "Digital-computer theoretical investigations of nonstationary processes in thermoelectric generators," J. Eng. Phys. Thermophys., vol. 17, pp. 974–979, 1969.
- 172. Ю. И. Дударев, М. З. Максимов, "Математическое моделирование нестационарных режимов работы термоэлектрических источников тока," *ЖТФ*, vol. 68(6), pp. 136–137, 1998.
- 173. M. Apostol and M. Nedelcu, "Pulsed thermoelectricity," J. Appl. Phys., vol. 108, p. 023702, 2010.
- 174. V. A. Kulbachinskii, Z. M. Dashevskii, M. Inoue, M. Sasaki, H. Negishi, W. X. Gao, P. Lostak, J. Horak, and A. de Visser, "Valence-band changes in sb_{2-x}in_xte₃ and sb₂te_{3-y}se_y by transport and shubnikov-de haas effect measurements," *Phys. Rev. B*, vol. 52, pp. 10915–10922, 1995.
- 175. M. Sasaki, H. Negishi, and M. Inoue, "Pulsed laser-induced transient thermoelectric effects in silicon crystals," J. Appl. Phys., vol. 59, pp. 796–802, 1986.
- 176. G. De Aloysio, G. D'Alessandro, and F. de Monte, "An analytical solution for the hyperbolic unsteady thermal behaviour of micro-thermoelectric coolers with a suddenly time-dependent heat generation," *Int. J. Heat Mass Tran.*, vol. 95, pp. 972–983, 2016.
- 177. P. E. Gray, The Dynamic Behavior of Thermoelectric Devices. Technology Press of MIT, Cambridge, 1960.
- 178. A. Montecucco, J. R. Buckle, and A. R. Knox, "Solution to the 1-d unsteady heat conduction equation with internal joule heat generation for thermoelectric devices," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 35, pp. 177–184, 2012.

- 179. J. H. Meng, X. X. Zhang, and X. D. Wang, "Dynamic response characteristics of thermoelectric generator predicted by a three-dimensional heatelectricity coupled model," *J. Power Sources*, vol. 245, pp. 262–269, 2014.
- 180. M. Alata, M. A. Al-Nimr, and M. Naji, "Transient behavior of a thermoelectric device under the hyperbolic heat conduction model," *Int.* J. Thermophys., vol. 24, pp. 1753–1768, 2003.
- 181. F. G. Stremler and P. E. Gray, "The initial transient behavior of a thermoelectric generator," Trans. Am. Inst. Electr. Eng., Part I: Commun. Electron., vol. 80, pp. 367–372, 1961.
- 182. D. T.-K. Shaw, "The start-up transient behavior of thermoelectric generators with temperature-dependent physical parameters," *Nucl. Sci. Eng.*, vol. 24, pp. 227–238, 1966.
- 183. T. Bechtold, E. B. Rudnyi, and J. G. Korvink, "Dynamic electro-thermal simulation of microsystems - a review," J. Micromech. Microeng., vol. 15, pp. R17–R31, 2005.
- 184. D. T. Crane, C. R. Koripella, and V. Jovovic, "Validating steadystate and transient modeling tools for high-power-density thermoelectric generators," *J. Electron. Mater.*, vol. 41, pp. 1524–1534, 2012.
- 185. G. Wu and X. Yu, "A comprehensive 3d finite element model of a thermoelectric module used in a power generator: a transient performance perspective," J. Electron. Mater., vol. 44, pp. 2080–2088, 2015.
- 186. D. Yan, F. P. Dawson, M. Pugh, and A. A. El-Deib, "Time-dependent finitevolume model of thermoelectric devices," *IEEE Trans. Ind. Appl.*, vol. 50, pp. 600–608, 2014.
- 187. J. T. Abrahamson, B. Sempere, M. P. Walsh, J. M. Forman, F. Sen, S. Sen, S. G. Mahajan, G. L. C. Paulus, Q. H. Wang, W. Choi, and M. S. Strano, "Excess thermopower and the theory of thermopower waves," ACS Nano,

vol. 7, pp. 6533–6544, 2013.

- 188. K. Y. Lee, H. Hwang, and W. Choi, "Advanced thermopower wave in novel zno nanostructures/fuel composite," ACS Appl. Mater. Interf., vol. 6, pp. 15575–15582, 2014.
- 189. В. Н. Агарев, "Нестационарная термоэдс в многослойных структурах с p n переходами," $\Phi T\Pi$, vol. 31, pp. 920–921, 1997.
- 190. R. McCarty, K. P. Hallinan, B. Sanders, and T. Somphone, "Enhancing thermoelectric energy recovery via modulations of source temperature for cyclical heat loadings," *J. Heat Transfer*, vol. 129, pp. 749–755, 2006.
- 191. R. McCarty, D. Monaghan, K. Hallinan, and B. Sanders, "Experimental verification of thermal switch effectiveness in thermoelectric energy harvesting," J. Thermophys. Heat Transfer, vol. 21, pp. 505–511, 2007.
- 192. Y. Yan and J. A. Malen, "Periodic heating amplifies the efficiency of thermoelectric energy conversion," *Energy Environ. Sci.*, vol. 6, pp. 1267–1273, 2013.
- 193. Ю. Г. Гуревич, В. Б. Юрченко, "Нелинейная фото-ЭДС в структурах с горячими электронами," ФТП, vol. 18, pp. 704–705, 1984.
- 194. J. Tyndall, "Action of an intermittent beam of radiant heat upon gaseous matter," P. R. Soc. London, vol. 31, pp. 206–211, 1880.
- 195. W. C. Röntgen, "On tones produced by the intermittent irradiation of a gas," *Philos. Mag.*, vol. 11, pp. 308–311, 1881.
- 196. A. Rosencwaig and A. Gersho, "Photoacoustic effect with solids: a theoretical treatment," *Science*, vol. 190, pp. 556–557, 1975.
- 197. L. V. Wang and S. Hu, "Photoacoustic tomography: in vivo imaging from organelles to organs," *Science*, vol. 335, pp. 1458–1462, 2012.
- A. C. Tam, "Applications of photoacoustic sensing techniques," Reviews of Modern Physics, vol. 58, pp. 381–431, 1986.
- 199. А. Н. Васильев, В. А. Сабликов, В. Б. Сандомирский, "Фототермиче-

ские и фотоакустические эффекты в полупроводниках и полупроводниковых структурах," Изв. Вузов. Физика, vol. 30, p. 119, 1987.

- 200. S. Manohar and D. Razansky, "Photoacoustics: a historical review," Adv. Opt. Photon., vol. 8, pp. 586–617, 2016.
- V. E. Gusev and A. A. Karabutov, *Laser Optoacoustics*. American Institute of Physics, 1993.
- 202. L. Wang, Photoacoustic Imaging and Spectroscopy. CRC Press, 2017.
- 203. J. F. McClelland and R. N. Kniseley, "Photoacoustic spectroscopy with condensed samples," *Appl. Opt.*, vol. 15, pp. 2658–2663, 1976.
- 204. J. G. Parker, "Optical absorption in glass: Investigation using an acoustic technique," Appl. Opt., vol. 12, pp. 2974–2977, 1973.
- 205. A. Rosencwaig and A. Gersho, "Theory of the photoacoustic effect with solids," J. Appl. Phys., vol. 47, pp. 64–69, 1976.
- 206. F. A. McDonald and G. C. J. Wetsel, "Generalized theory of the photoacoustic effect," J. Acoust. Soc. Am., vol. 60, p. S52, 1976.
- 207. L. C. Aamodt, J. C. Murphy, and J. G. Parker, "Size considerations in the design of cells for photoacoustic spectroscopy," J. Appl. Phys., vol. 48, pp. 927–933, 1977.
- 208. F. A. McDonald and G. C. J. Wetsel, "Generalized theory of the photoacoustic effect," *J Appl. Phys.*, vol. 49, pp. 2313–2322, 1978.
- 209. G. C. J. Wetsel and F. A. McDonald, "Photoacoustic determination of absolute optical absorption coefficient," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 30, pp. 252–254, 1977.
- 210. M. J. Adams and G. F. Kirkbright, "Phase analysis in solid-sample optoacoustic spectrometry," *Spectrosc. Lett.*, vol. 9, pp. 255–264, 1976.
- 211. H. Vargas and L. Miranda, "Photoacoustic and related photothermal techniques," *Phys. Rep.*, vol. 161, pp. 43–101, 1988.
- 212. G. González de la Cruz and Y. G. Gurevich, "Electron and phonon thermal

waves in semiconductors: An application to photothermal effects," J. Appl. Phys., vol. 80, pp. 1726–1730, 1996.

- 213. L. C. M. Miranda, "Theory of the photoacoustic effect in semiconductors influence of carrier diffusion and recombination," *Appl. Opt.*, vol. 21, pp. 2923–2928, 1982.
- 214. A. Pinto Neto, H. Vargas, N. F. Leite, and L. C. M. Miranda, "Photoacoustic characterization of semiconductors: Transport properties and thermal diffusivity in gaas and si," *Phys. Rev. B*, vol. 41, pp. 9971–9979, 1990.
- 215. M. D. Dramicanin, P. M. Nikolic, Z. D. Ristovski, D. G. Vasiljevic, and D. M. Todorovic, "Photoacoustic investigation of transport in semiconductors: Theoretical and experimental study of a ge single crystal," *Phys. Rev. B*, vol. 51, pp. 14226–14232, 1995.
- 216. V. A. Sablikov and V. B. Sandomirskii, "The photoacoustic effect in semiconductors," *Phys. Stat. Sol. B*, vol. 120, pp. 471–480, 1983.
- 217. G. Gonzalez de la Cruz and Y. G. Gurevich, "Physical interpretation of thermal waves in photothermal experiments," *Rev. Mex. Fis.*, vol. 45, pp. 41–46, 1999.
- 218. A. Mandelis, M. Nestoros, and C. Christofides, "Thermoelectronic-wave coupling in laser photothermal theory of semiconductors at elevated temperatures," *Opt. Eng.*, vol. 36, pp. 459–468, 1997.
- 219. A. N. Smith and P. M. Norris, "Influence of intraband transitions on the electron thermoreflectance response of metals," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 78, pp. 1240–1242, 2001.
- 220. D. M. Todorovic, P. M. Nikolic, and A. I. Bojicic, "Photoacoustic frequency transmission technique: Electronic deformation mechanism in semiconductors," J. Appl. Phys., vol. 85, pp. 7716–7726, 1999.
- 221. E. Marin, H. Vargas, P. Diaz, and I. Riech, "On the photoacoustic characterization of semiconductors: Influence of carrier recombination on

the thermodiffusion, thermoelastic and electronic strain signal generation mechanisms," *Phys. Stat. Sol. A*, vol. 179, pp. 387–402, 2000.

- 222. M. Malinski and L. Chrobak, "Determination of the life time of excess carriers in silicon with photoacoustic and photocurrent methods," J. Phys. Conf. Ser., vol. 214, p. 012075, 2010.
- 223. А. Роуз, Основы теории фотопроводимости. М.: Мир, 1966.
- 224. В. Е. Лашкарев, А. В. Любченко, М. К. Шейнкман, *Неравновесные процессы в фотопроводниках.* К.: Наукова думка, 1981.
- 225. Ж. Таус, Фото- и термоэлектрические явления в полупроводниках.М.: Изд-во иностранной лит-ры, 1962.
- 226. H. Dember, "Uber eine photoelektromotorische kraft in kupferoxydol," *Phys. Zeitschr.*, vol. 32, p. 544, 1932.
- 227. J. Tauc, "Generation of an emf in semiconductors with nonequilibrium current carrier concentrations," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 29, pp. 308–324, 1957.
- 228. J. Tauc, "The theory of a bulk photo-voltaic phenomenon in semiconductors," *Czech. J. Phys.*, vol. 5, pp. 178–191, 1955.
- 229. S. Sikorski and T. Piotrowski, "Photovoltaic phenomena in inhomogeneous semiconductors," Prog. Quantum Electron., vol. 27, pp. 295–365, 2003.
- H. Frohlich, "Inner photoelectric effect in semiconductors," *Physikalische Z. Sov.*, vol. 8, pp. 501–510, 1935.
- J. Frenkel, "Conduction in poor electronic conductors," Nature, vol. 132, pp. 312–313, 1933.
- 232. T. Dekorsy, H. Auer, H. J. Bakker, H. G. Roskos, and H. Kurz, "Thz electromagnetic emission by coherent infrared-active phonons," *Phys. Rev. B*, vol. 53, pp. 4005–4014, 1996.
- 233. S. Kono, P. Gu, M. Tani, and K. Sakai, "Temperature dependence of terahertz radiation from n-type insb and n-type inas surfaces," *Appl. Phys. B*, vol. 71, pp. 901–904, 2000.

- 234. M. B. Johnston, D. M. Whittaker, A. Corchia, A. G. Davies, and E. H. Linfield, "Simulation of terahertz generation at semiconductor surfaces," *Phys. Rev. B*, vol. 65, p. 165301, 2002.
- 235. A. Reklaitis, "Terahertz emission from inas induced by photo-dember effect: Hydrodynamic analysis and monte carlo simulations," J. Appl. Phys., vol. 108, p. 053102, 2010.
- 236. П. А. Зезюля, В. Малевич, И. Манак, А. Кроткус, "Генерация терагерцового излучения поверхностным баллистическим фототоком при субпикосекундном лазерном возбуждении полупроводников," ФТП, vol. 46, pp. 152–157, 2012.
- 237. Y. G. Gurevich and A. V. Meriuts, "Dember effect: Problems and solutions," *Phys. Lett. A*, vol. 377, pp. 2673–2675, 2013.
- 238. A. V. Meriuts and Y. G. Gurevich, "Novel approach to the dember effect," Ann. Phys. (Berlin), vol. 526, pp. 533–540, 2014.
- 239. Y. G. Gurevich and V. B. Yurchenko, "Generation of photovoltage in homogeneous unipolar conductive media," *Solid State Commun.*, vol. 72, pp. 1057–1058, 1989.
- 240. Ч. Киттель, Введение в физику твердого тела. М.: Физматгиз, 1963.
- 241. C. E. Nebel, "Valleytronics: Electrons dance in diamond," Nat. Mater., vol. 12, pp. 690–691, 2013.
- 242. K. Behnia, "Condensed-matter physics: Polarized light boosts valleytronics," *Nat. Nano*, vol. 7, pp. 488–489, 2012.
- 243. M. Casalino, G. Coppola, M. Iodice, I. Rendina, and L. Sirleto, "Nearinfrared sub-bandgap all-silicon photodetectors: State of the art and perspectives," *Sensors*, vol. 10, pp. 10571–10600, 2010.
- 244. Y. Vashpanov, J. I. Jung, and K. D. Kwack, "Photo-emf sensitivity of porous silicon thin layerЦcrystalline silicon heterojunction to ammonia adsorption," *Sensors*, vol. 11, pp. 1321–1327, 2011.

- 245. C. Becker, F. Ruske, T. Sontheimer, B. Gorka, U. Bloeck, S. Gall, and B. Rech, "Microstructure and photovoltaic performance of polycrystalline silicon thin films on temperature-stable zno:al layers," J. Appl. Phys., vol. 106, p. 084506, 2009.
- 246. T. Piotrowski and S. Sikorski, "Photovoltaic effects in an inhomogeneous semiconductor with position-dependent temperature," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 16, pp. 750–758, 2001.
- 247. C. Klingshirn, Semiconductor Optics. Springer, 2005.
- 248. P. Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors. Springer, 2010.
- 249. A. S. Brown and M. A. Green, "Impurity photovoltaic effect: Fundamental energy conversion efficiency limits," J. Appl. Phys., vol. 92, pp. 1329–1336, 2002.
- 250. T. O. Dos Santos, J. C. Launay, and J. Frejlich, "Photo-electromotiveforce from volume speckle pattern vibration with large amplitude," J. Appl. Phys., vol. 103, p. 113104, 2008.
- 251. M. Bryushinin, V. Kulikov, I. Sokolov, P. Delaye, and G. Pauliat, "Nonsteady-state photo-emf in semi-insulating gaas under frequency-modulated illumination," *Europhys. Lett.*, vol. 105, p. 64003, 2014.
- 252. M. Bryushinin, V. Kulikov, I. Sokolov, D. P., and G. Pauliat, "Non-steadystate photoelectromotive force and two-wave mixing in photorefractive crystals under frequency modulated illumination," J. Opt. Soc. Am. B, vol. 31, pp. 723–729, 2014.
- 253. M. P. Petrov, I. A. Sokolov, S. I. Stepanov, and G. S. Trofimov, "Non-steadystate photo-electromotive-force induced by dynamic gratings in partially compensated photoconductors," *J. Appl. Phys.*, vol. 68, pp. 2216–2225, 1990.
- 254. М. А. Брюшинин, В. В. Куликов, И. А. Соколов, "Объемная и кон-

тактная фотоэдс в адаптивных фотоприемниках на основе арсенида галлия," $\mathcal{K}T\Phi$, vol. 72, no. 10, pp. 79–88, 2002.

- 255. C. Witt, U. Haken, and M. Hundhausen, "Determination of the photocarrier lifetime in amorphous silicon with the moving photocarrier grating technique," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 33, pp. L1386–L1388, 1994.
- 256. J. A. Schmidt, M. Hundhausen, and L. Ley, "Transport properties of $a \sin_{1-x}c_x$: H films investigated by the moving photocarrier grating technique," *Phys. Rev. B*, vol. 62, pp. 13010–13015, 2000.
- 257. J. A. Schmidt, M. Hundhausen, and L. Ley, "Analysis of the moving photocarrier grating technique for semiconductors of high defect density," *Phys. Rev. B*, vol. 64, pp. 4201–4207, 2001.
- 258. A. FathAllah, F. Ventosinos, and C. Longeaud, "An automated experiment for determination of thin film semiconductor transport parameters," J. Phys. Conf. Ser., vol. 558, p. 012011, 2014.
- 259. В. П. Силин, А. А. Рухадзе, Электромагнитные свойства плазмы и плазмоподобных сред. М.: Госатомиздат, 1961.
- 260. G. Darvin, "The refractive index of an ionized medium. ii," Proc. Roy. Soc., vol. 182, pp. 152–166, 1943.
- 261. В. Л. Гинзбург, *Pacnpocmpahenue электромагнитных волн в плазме*.М.: Наука, 1967.
- 262. C. Jacoboni and P. Lugli, The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation. Springer Vienna, 2012.
- 263. M. J. Martin Martinez, D. Pardo, and J. E. Velázquez, "Microscopic analysis of the influence of strain and band-gap offsets on noise characteristics in Si_{1-x}Ge_x/si heterojunctions," J. Appl. Phys., vol. 84, pp. 5012–5020, 1998.
- 264. J. Bardeen, "Surface states and rectification at a metal semi-conductor contact," *Phys. Rev.*, vol. 71, pp. 717–727, 1947.
- 265. А. Ф. Иоффе, Физика полупроводников. М., Л.: Изд-во АН СССР, 1957.

- 266. Y. G. Gurevich and O. L. Mashkevich, "The electron-phonon drag and transport phenomena in semiconductors," *Phys. Rep.*, vol. 181, no. 6, pp. 327 – 394, 1989.
- 267. J. McKelvey, Solid State and Semiconductor Physics. Krieger Publishing Company, 1966.
- 268. A. S. Grove, *Physics and Technology of Semiconductor Devices*. Wiley, 1967.
- 269. Y. G. Gurevich, G. N. Logvinov, J. E. Velázquez, and O. Y. Titov, "Transport and recombination in solar cells: New perspectives," *Solar Energy Mater. Solar Cells*, vol. 91, no. 15, pp. 1408 – 1411, 2007.
- 270. J. Nelson, *The Physics of Solar Cells*. World Scientific Publishing Company, 2003.
- 271. J. L. Carrillo and M. A. Rodrguez, "Model for hot-electron phenomena: Theory and general results," *Phys. Rev. B*, vol. 44, pp. 2934–2945, 1991.
- 272. L. Meza-Montes, J. L. Carrillo, and M. A. Rodriguez, "Tunnelling phenomena during relaxation processes in semiconductor heterostructures," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 9, p. 504, 1994.
- 273. H. Ohnishi, T. Inata, S. Muto, N. Yokoyama, and A. Shibatomi, "Selfconsistent analysis of resonant tunneling current," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 49, pp. 1248–1250, 1986.
- 274. M. Cahay, M. McLennan, S. Datta, and M. S. Lundstrom, "Importance of space-charge effects in resonant tunneling devices," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 50, pp. 612–614, 1987.
- 275. D. Landheer and G. C. Aers, "Role of carrier equilibrium in selfconsistent calculations for double barrier resonant diodes," *Superlattices Microstructures*, vol. 7, pp. 17–21, 1990.
- 276. W. R. Frensley, "Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 62, pp. 745–791, 1990.

- 277. E. E. Mendez and von Klitzing K., Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices. Springer US, 1988.
- 278. К. Миранда, Уравнения с частными производными эллиптического типа. М.: ИЛ, 1957.
- 279. W. Van Roosbroeck, "Current-carrier transport with space charge in semiconductors," *Phys. Rev.*, vol. 123, pp. 474–490, 1961.
- 280. Y. Moreau, J.-C. Manifacier, and H. K. Henisch, "Minority-carrier injection into relaxation semiconductors," J. Appl. Phys., vol. 60, pp. 2904–2909, 1986.
- 281. S. Tehrani, H. Goronkin, M. M. Hoogstra, G. N. Maracas, J. A. Curless, G. D. Kramer, M. S. Peffley, and R. K. Tsui, "Excess drain current in heterojunction fets due to substrate space-charge-limited current," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 36, pp. 1591–1596, 1989.
- 282. R. J. Trew, G. L. Bilbro, W. Kuang, Y. Liu, and H. Yin, "Microwave algan/gan hfets," *IEEE Microw. Mag.*, vol. 6, pp. 56–66, 2005.
- 283. A. Carbone, B. K. Kotowska, and D. Kotowski, "Space-charge-limited current fluctuations in organic semiconductors," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 236601, 2005.
- 284. П. И. Баранский, В. П. Клочков, И. В. Потыкевич, Полупроводниковая электроника. Справочник. К.: Наук. думка, 1975.
- 285. И. Аут, Д. Генцов, К. Герман, Фотоэлектрические явления. М.: Мир, 1980.
- 286. С. М. Рывкин, Фотоэлектрические явления в полупроводниках. М.: ГИФМЛ, 1963.
- 287. Г. П. Пека, Физические явления на поверхности полупроводников. К.: ВШ, 1984.
- 288. M. Lamport and P. Mark, *Currents Injection in Solids*. NY: Academic Press, 1970.

- 289. Y. G. Gurevich, G. Gonzalez de la Cruz, G. N. Logvinov, and M. N. Kosyanchuk, "Thermal waves in semiconductors," J. Thermoelectric., vol. 5, pp. 45–54, 1997.
- 290. І. М. Раренко, С. Л. Королюк, В. М. Кошкін, С. С. Москалюк, "Гетероконтакт власних напівпровідників," *Науковий вісник Чернівецького університету.* Фізика, vol. 29, pp. 45–49, 1998.
- 291. E. Schöll, Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors: Self-Organization Induced by Generation and Recombination Processes. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- 292. D. K. Schroder, Semiconductor Material and Device Characterization. Wiley, 2006.
- 293. M. Reisch, High Frequency Bipolar Transistors. Berlin: Springer, 2003.
- Synopsys, Taurus-Medici Medici User Guide. Palo Alto, CA: Synopsys, 2005.
- 295. F. Bonani and G. Ghione, Noise in Semiconductor Devices: Modeling and Simulation. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- 296. F. Bonani and G. Ghione, "Generation-recombination noise modelling in semiconductor devices through population or approximate equivalent current density fluctuations," *Solid-State Electron.*, vol. 43, pp. 285–295, 1999.
- 297. L. Reggiani, *Hot-Electron Transport in Semiconductors*. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- 298. S. D. Beneslavskii and A. Dmitriev, "Calculation of i-v curves in narrow-gap semiconductors with symmetric electron and hole energy dispersion laws," *Solid State Commun.*, vol. 32, pp. 1175–1179, 1979.
- 299. Ю. Г. Гуревич, Г. Н. Логвинов, О. Ю. Титов, "Теория термоэлектрических явлений в условиях некорректности температурного приближения," ФТП, vol. 28, pp. 113–119, 1994.

- 300. N. Balkan, Hot Electrons in Semiconductors: Physics and Devices. Clarendon Press, 1998.
- 301. J. Shah, "Hot electrons and phonons under high intensity photoexcitation of semiconductors," *Solid-State Electron.*, vol. 21, pp. 43–50, 1978.
- 302. G. N. Logvinov, Y. G. Gurevich, and I. M. Lashkevich, "Surface heat capacity and surface heat impedance: An application to theory of thermal waves," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 42, pp. 4448–4452, 2003.
- 303. C. S. Ting, Physics of Hot Electron Transport in Semiconductors. World Scientific, 1992.
- 304. Z. S. Gribnikov, K. Hess, and G. A. Kosinovsky, "Nonlocal and nonlinear transport in semiconductors: Real-space transfer effects," J. Appl. Phys., vol. 77, pp. 1337 –1373, 1995.
- 305. В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Яссиевич, "Захват носителей заряда на притягивающие центры в полупроводниках," ФТП, vol. 12, p. 3, 1978.
- 306. G. Ascarelli and S. C. Brown, "Recombination of electrons and donors in *n*-type germanium," *Phys. Rev.*, vol. 120, pp. 1615–1626, 1960.
- 307. V. L. Bonch-Bruevich and E. G. Landsberg, "Recombination mechanisms," *Phys. Status Solidi B*, vol. 29, pp. 9–43, 1968.
- 308. Н. Г. Жданова, В. Г. Алексеева, "Влияние температуры на кинетику примесной фотопроводимости германия *n*-типа с золотом," *ФТТ*, vol. 5, pp. 546–551, 1963.
- 309. Y. G. Gurevich and J. E. Velázquez-Pérez, "The role of non-equilibrium charge carriers in thermoelectric cooling," J. Appl. Phys., vol. 114, p. 033704, 2013.
- 310. G. N. Logvinov, J. E. Velázquez, I. M. Lashkevych, and Y. G. Gurevich, "Heating and cooling in semiconductor structures by an electric current," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 89, p. 092118, 2006.

- 311. W. Thomson, "On the dynamical theory of heat," R. Soc. Edinb. Earth Sci., vol. 3, pp. 91–98, 1851.
- 312. M. Huang, R. Yen, and A. Wang, "The influence of the thomson effect on the performance of a thermoelectric cooler," *Int. J. Heat Mass Tran.*, vol. 48, pp. 413–418, 2005.
- 313. J. Saint-Martin, A. Bournel, and P. Dollfus, "Comparison of multiple-gate mosfet architectures using monte carlo simulation," *Solid-State Electron.*, vol. 50, pp. 94–101, 2006.
- 314. Y. G. Gurevich and G. N. Logvinov, "Formulation and measurement of the thermo-emf in unipolar semiconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 46, pp. 15516–15517, 1992.
- 315. Ю. Г. Гуревич, В. Б. Юрченко, "Проблема формирования ЭДС в полупроводниках и вывода ее во внешнюю цепь," ФТП, vol. 25, pp. 2109–2114, 1991.
- 316. Y. G. Gurevich, "Thermoelectric phenomena in biboloar semiconductors," J. Thermoelectric., vol. 2, pp. 5–23, 1997.
- 317. П. А. Бородовский, А. Ф. Булдыгин, В. С. Варавин, "Определение скорости поверхностной рекомбинации в эпитаксиальных слоях n – Cd_xHg_{1-x}Te из измерений планарного магнитосопротивления и времени релаксации неравновесных носителей заряда," ФТП, vol. 32, pp. 1076–1078, 1998.
- 318. J. R. Welty, C. E. Wicks, and R. E. Wilson, Fundamentals of momentum, heat, and mass transfer. Wiley, 1976.
- J. R. Cannon, *The One-Dimensional Heat Equation*. Cambridge University Press, 1984.
- 320. B. Sapoval, C. Hermann, and C. Hermann, *Physics of Semiconductors*. Springer New York, 2003.
- 321. A. Jüngel and I. Violet, "The quasineutral limit in the quantum drift-

diffusion equations," Asymptotic Anal., vol. 53, pp. 139–157, 2007.

- 322. G. González de la Cruz and Y. G. Gurevich, "Time-dependent heat diffusion in semiconductors by electrons and phonons," *Phys. Rev. B*, vol. 58, pp. 7768–7773, 1998.
- 323. G. González de la Cruz and Y. G. Gurevich, "Physical interpretation of thermal waves in phototermal experiments," *Rev. Mex. Fis.*, vol. 45, pp. 41–46, 1999.
- 324. V. A. Sablikov and V. B. Sandomirskii, "The photoacoustic effect in semiconductors," *Phys. Stat. Sol. (b)*, vol. 120, pp. 471–480, 1983.
- 325. A. N. Vasil'ev, V. A. Sablikov, V. B. Sandomirskii, "Фототермические и фотоакустические эффекты в полупроводниках и полупроовдниковых структурах," Известия ВУЗов. Физика, vol. 30, pp. 119–131, 1987.
- 326. G. González de la Cruz and Y. G. Gurevich, "Thermal diffusion of a twolayer system," *Phys. Rev. B*, vol. 51, pp. 2188–2192, 1995.
- 327. A. F. Carballo Sánchez, G. González de la Cruz, Y. G. Gurevich, and G. N. Logvinov, "Transient heat transport by carriers and phonons in semiconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 59, pp. 10630–10638, 1999.
- 328. К. В. Шалимова, Физика полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1985.
- 329. В. М. Кошкин, И. Н. Воловичев, Ю. Г. Гуревич, Л. П. Гальчинецкий, И. М. Раренко, Материалы и устройства с гигантским радиационным ресурсом. В: Диэлектрики и полупроводники в детекторах излучения / Под. ред. Малюкина Ю.В. Харьков: Институт монокристаллов, 2006.
- 330. K. Blotekjaer, "Transport equations for electrons in two-valley semiconductors," *IEEE Trans. Electron Dev.*, vol. 17, pp. 38–47, 1970.
- 331. A. Rogalski, "HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook," *Rep. Prog. Phys.*, vol. 68, pp. 2267–2336, 2005.

ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІї

Наукові праці, що містять основні наукові результати дисертації

- Y. G. Gurevich, M. A. Rodriguez, J. L. Carillo, L. Meza-Montes, and I. N. Volovichev, "Contact phenomena in low-dimensional systems with hot electrons and phonons," *Lith. J. Phys.*, vol. 35, pp. 608–610, 1995.
- 2. Y. G. Gurevich and I. N. Volovichev, "Forgotten mechanism of nonlinearity in the theory of hot electrons," *Phys. Rev. B*, vol. 60, pp. 7715–7717, 1999.
- И. Н. Воловичев, Ю. Г. Гуревич, "Генерационно-рекомбинационные процессы в полупроводниках," ФТП, т. 35, сс. 321–329, 2001.
- I. N. Volovichev, L. Villegas-Lelovsky, G. González de la Cruz, and Y. G. Gurevich, "The effect of carrier diffusion and recombination in semiconductors on the photoacoustic signal," *Physica B*, vol. 304, pp. 410–422, 2001.
- Y. Gurevich, G. Logvinov, I. Volovichev, G. Espejo, O. Titov, and A. Meriuts, "The role of non-equilibrium carriers in the formation of thermo-e.m.f. in bipolar semiconductors," *Phys. Status Solidi B*, vol. 231, pp. 278–293, 2002.
- I. N. Volovichev, G. Espejo, Y. G. Gurevich, O. Y. Titov, and A. Meriuts, "Recombination in semiconductors: Appearance of nonequilibrium carriers due to injection or redistribution in the sample," *Jpn. J.Appl. Phys.*, vol. 41, p. 182, 2002.
- A. Meriuts, O. I. Lyubimov, I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, G. Espejo, and O. Y. Titov, "Linear transport in bounded semiconductors under a thermal field: emergence of nonequilibrium charge carriers," *Functional Materials*, vol. 2, pp. 176–181, 2002.
- 8. L. Villegas-Lelovsky, G. Gonzalez de la Cruz, Y. G. Gurevich, and I. N. Volovichev, "Photoacoustic effect in semiconductors: Influence of field tempera-

ture on carrier diffusion and recombination," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 74, pp. 556–558, 2003.

- I. N. Volovichev, G. N. Logvinov, O. Y. Titov, and Y. G. Gurevich, "Recombination and lifetimes of charge carriers in semiconductors," *J. Appl. Phys.*, vol. 95, pp. 4494–4496, 2004.
- Y. G. Gurevich, H. Lohvinov, M. Cruz-Irisson, O. Titov, G. Espejo-López, and I. Volovichev, "Electric current of hot electrons in semiconductor thin films," *Phys. Status Solidi C*, vol. 1, pp. S100–S103, 2004.
- Y. G. Gurevich, A. Ortiz, G. N. Logvinov, I. N. Volovichev, O. Y. Titov, J. Giraldo, and A. Gutierrez, "Transport phenomena in bipolar semiconductors: a new point of view," *Microelectr. J.*, vol. 36, pp. 886–889, 2005.
- L. Villegas-Lelovsky, G. Gonzalez de la Cruz, and I. N. Volovichev, "Effect of electron-phonon energy exchange on thermal wave propagation in semiconductors considering carrier diffusion and recombination," *Phys. Stat. Sol. B*, vol. 242, pp. 971–982, 2005.
- Y. G. Gurevich, J. E. Velázquez-Pérez, G. Espejo-López, I. N. Volovichev, and O. Y. Titov, "Transport of nonequilibrium carriers in bipolar semiconductors," J. Appl. Phys., vol. 101, no. 2, p. 023705, 2007.
- I. N. Volovichev, J. E. Velázquez-Perez, and Y. G. Gurevich, "Transport boundary condition for semiconductor structures," *Solid-State Electron.*, vol. 52, no. 11, pp. 1703–1709, 2008.
- I. Volovichev, J. Velázquez-Pérez, and Y. Gurevich, "Transport boundary conditions for solar cells," *Solar Energy Mater. Solar Cells*, vol. 93, pp. 6–10, 2009.
- I. Volovichev, "New non-linear photovoltaic effect in uniform bipolar semiconductor," J. Appl. Phys., vol. 116, p. 193701, 2014.

- I. Volovichev, "Nonuniform current-carrier mobility-induced bulk photovoltaic effect in bounded semiconductors," *Phys. Status Solidi B*, vol. 252, pp. 1804– 1809, 2015.
- I. N. Volovichev and Y. G. Gurevich, "Mechanisms of charge carriers nonequilibrium in transport processes in bipolar semiconductors," *Curr. Appl. Phys.*, vol. 16, no. 2, pp. 191–196, 2016.
- I. N. Volovichev, "Dynamic thermoelectricity in uniform bipolar semiconductor," *Physica B*, vol. 492, pp. 70–76, 2016.
- I. Volovichev, "Dynamic thermopower in uniform unipolar semiconductor," J. Appl. Phys., vol. 119, p. 095712, 2016.
- I. N. Volovichev, O. Y. Titov, and Y. G. Gurevich, "Photovoltaic effect in unipolar multivalley semiconductors," *Philos. Mag.*, vol. 97, pp. 683–692, 2017.
- I. N. Volovichev, "Direct current in non-steady-state photovoltaic effect," *Phys. Sci. Int. J.*, vol. 17, pp. 1–11, 2018.

Наукові праці, що засвідчують апробацію матеріалів дисертації

- O. Titov, A. Meriuts, G. Espejo, I. Volovichev, Y. Gurevich, and O. I. Lyubimov, "Thermal and electric transport in semiconductors under a thermal field: Emergence of nonequilibrium charge carriers," in *Proc. 15th European Conference on Thermophysical Properties*, (Wurzburg, Germany), pp. 737–743, Sept. 1999.
- A. F. Carballo-Sanchez, G. Espejo, I. N. Volovichev, and Y. G. Gurevich, "Transient thermoelectric phenomena as new method for the characterization of semiconducror materials," in *Digest of the 3rd Annual Workshop on Simula tion and Characterization Techniques in Semiconductors, Third Annual Workshop*, (Mexico D. F., Mexico), pp. 12–16, Sept. 1999.

- G. Espejo, I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, G. N. Logvinov, A. Meriuts, and O. Y. Titov, "Thermal field—the source of the emergence of nonequilibrium charge carriers in semiconductors," in *Proc. of the 22nd International Conference on Microelectronics*, (Nis, Yugoslavia), pp. 181–184, May 2000.
- 4. I. N. Volovichev, Y. G. Gurevich, and O. Y. Titov, "Recombination in inhomogeneous electron and phonon temperature fields," in *Abstracts of the 25th International Conference on the Physics of Semiconductor*, (Osaka, Japan), p. 721, Sept. 2000.
- Y. Gurevich, G. Logvinov, O. Titov, and I. Volovichev, "Nonequilibrium carriers of charge in theory of thermoelectric phenomena," in *Proc. of the 22nd International Conference on Thermoelectrics*, (La Grande-Motte, France), pp. 464–467, Aug. 2003.
- Y. Gurevich, H. Logvinov, O. Titov, and I. Volovichev, "Electric and heat transport in thin bipolar semiconductor films," в *Матеріали IX Міжнарод*ної конференції МКФТТП-IX, (Івано-Франківськ, Україна), стор. 30–31, Травень 2003.
- Y. Gurevich, O. Titov, I. Volovichev, and G. Logvinov, "Transport of nonequilibrium charge carriers in semiconductor structures," in *Abstracts of the 14th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors (HCIS-14)*, (Chicago, USA), p. P7, July 2005.
- Y. G. Gurevich, J. E. Velazquez-Perez, and I. N. Volovichev, "Boundary conditions for current in solar cells," in *Abstracts Book of XVI International Materials Research Congress*, (Cancun, Mexico), p. 57, Oct. 2007.
- 9. Y. G. Gurevich, I. Volovichev, and G. Gonzalez de la Cruz, "Effective thermal parameters of layered films: An application to pulsed photothermal techniques," in *Book of Abstracts of the 28th International Conference on Materials, Surfaces and Vacuum*, (Veracruz, Mexico), p. 176, Sept. 2008.

- I. N. Volovichev, J. E. Velazquez-Perez, and Y. G. Gurevich, "New boundary conditions for the study of charge transport in solid-state devices," in *Proc. of* the 26th International Conference on Microelectronics, (Nis, Serbia), pp. 151– 154, May 2008.
- I. Volovichev and Y. Gurevich, "New about the solar cells," in *Proc. VIII* International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, (Puebla, Mexico), p. 294, Sept. 2015.
- I. Volovichev, O. Titov, and Y. Gurevich, "Photovoltaic effect in unipolar semiconductors," in *Proc. IX International Conference on Surfaces, Materials* and Vacuum, (Mazatlan, Mexico), p. 362, Sept. 2016.

Відомості про апробацію матеріалів дисертації

- The 15th European Conference on Thermophysical Properties (Wurzburg, Germany, 1999), доповідь співавтора.
- The 3rd Annual Workshop on Simulation and Characterization Techniques in Semiconductors (Mexico D. F., Mexico, 1999), доповідь.
- The 22nd International Conference on Microelectronics (Nis, Yugoslavia, 2000), заочна.
- The 25th International Conference on the Physics of Semiconductor (Osaka, Japan, 2000), стендова доповідь.
- The 22nd International Conference on Thermoelectrics (La Grande-Motte, France, 2003), доповідь співавтора.
- IX Міжнародна конференція МКФТТП-IX (Івано-Франківськ, Україна, 2003), доповідь.
- The 14th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors (HCIS-14) (Chicago, USA, 2005), стендова доповідь.
- The XVI International Materials Research Congress (Cancun, Mexico, 2007), запрошена доповідь співавтора.
- The 28th International Conference on Materials, Surfaces and Vacuum (Veracruz, Mexico, 2008), стендова доповідь.
- The 26th International Conference on Microelectronics (Nis, Serbia, 2008), доповідь.
- The VIII International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum (Puebla, Mexico, 2015), доповідь співавтора.
- The IX International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum (Mazatlan, Mexico, 2016), стендова доповідь.