

Національна Академія Наук України
Науково-технологічний концерн “Інститут монокристалів”
ІНСТИТУТ МОНОКРИСТАЛІВ

Меріуц Андрій Володимирович

УДК 537.311.322: 537.312

**РОЛЬ НЕРІВНОВАЖНИХ НОСІЇВ ЗАРЯДУ В ЛІНІЙНИХ
ЯВИЩАХ ПЕРЕНОСУ В ОБМЕЖЕНИХ НАПІВПРОВІДНИКАХ**

01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків

Автореферат

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Харків - 2002

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Національному технічному університеті “Харківський політехнічний інститут” Міністерства освіти і науки України, м. Харків

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Бойко Борис Тимофійович,
Національний технічний університет “ХПІ”, зав. кафедри фізичного
матеріалознавства для електроніки і геліоенергетики.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Агєєв Леонід Опанасович,
Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, професор
кафедри фізичної оптики.

доктор фізико-математичних наук, професор
Кошкін Володимир Мойсейович,
Національний технічний університет “ХПІ”, зав. кафедри фізичної
хімії.

Провідна установа: Чернівецький національний університет
ім. Ю. Федьковича, кафедра термоелектрики.

Захист відбудеться 20.11.2002 р. о 14 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д
64.169.01 при Інституті монокристалів НТК “Інститут монокристалів” НАН України (61001,
м. Харків, проспект Леніна, 60).

З дисертацією можна ознайомитися в науковій бібліотеці Інституту монокристалів НТК
“Інститут монокристалів” НАН України. (61001, м. Харків, проспект Леніна, 60).

Автореферат розісланий 07.10.2002 р.

Вчений секретар спеціалізованої вченої ради
кандидат технічних наук

Л.В. Атрощенко

1

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Явища переносу заряду і енергії, як відомо, лежать в основі багатьох технічних застосувань напівпровідників. На основі цих явищ працює переважна більшість елементів напівпровідникової техніки. Дослідження кінетичних явищ або можливості їх застосування для створення нових напівпровідникових елементів завжди починається з оцінки величини відповідних кінетичних коефіцієнтів і ефектів у лінійному наближенні. Теорія лінійних явищ переносу була побудована вже досить давно. Однак детальний аналіз існуючої лінійної теорії демонструє, що вона має обмежену область застосування, оскільки в цій теорії вважається, що поява нерівноважних носіїв заряду та потоків під впливом зовнішніх сил відбувається тільки за рахунок перерозподілу носіїв заряду по станах у просторі квазіімпульсів. При цьому не враховується можливість появи нерівноважних носіїв за рахунок їхнього перерозподілу в координатному просторі при виникненні потоків заряду та енергії в напівпровіднику. Така зміна локальної концентрації носіїв у кожній точці повинна приводити до рекомбінаційних процесів. Крім цього існує можливість зміни повного числа носіїв заряду, зв'язана з наявністю контактів. Навіть якщо контакти омічні і режим інжекції відсутній, зміна числа носіїв заряду може відбуватися за рахунок того, що швидкість рекомбінації на контактах є скінченною величиною. Між тим, підхід, що був використаний для опису лінійних явищ переносу, узагалі не дозволяє врахувати рекомбінаційні процеси і обмеженість реальних напівпровідникових зразків та структур. Причина цього в тому, що при повному знехтуванні можливості перерозподілу носіїв у координатному просторі не виникає потреби а ні в рівняннях, а ні в граничних умовах, за допомогою яких можна було б врахувати такий перерозподіл. Результати, отримані за допомогою такого підходу, наприклад, формули для опору, термоерс, та ін. біполярного напівпровідника, та напівпровідника р-типу, як буде показано далі, можуть виявитися некоректними, або матимуть обмежену область

застосування, яку принаймні треба окреслити.

У той же час, для опису нелінійних явищ переносу застосовується більш загальний підхід, ніж у лінійній теорії, який ґрунтується на використанні рівнянь неперервності, що дозволяє врахувати зазначені фактори. Однак при цьому не завжди приділяється достатньо уваги встановленню меж придатності припущень, які робляться при написанні та розв'язуванні рівнянь неперервності. Наприклад, при написанні рівнянь неперервності, спрощену рекомбінаційну модель, яка була отримана для умов квазінейтральності, у багатьох випадках використовують як загальну. Граничні умови, які широко використовуються при розв'язуванні рівнянь неперервності, як правило, відповідають рівноважному стану, що несумісне з реальними режимами роботи цих елементів. Як приклад, можна навести граничну умову на концентрацію носіїв у площині

2

контакту, яку визначають через рівноважну контактну різницю потенціалів. Але при протіканні струму через контакт ця різниця повинна змінитися. Також досить часто при розрахунках вольтамперних характеристик задають значення невідомих функцій або їх похідних на межі області об'ємного заряду. При цьому, координату цієї межі беруть рівною її рівноважному значенню.

Таким чином, дослідження питань, зв'язаних з рекомбінацією нерівноважних носіїв, їхньою роллю в лінійних явищах переносу, а також з постановкою коректних граничних умов до рівнянь неперервності, особливо у випадку біполярного напівпровідника та напівпровідника p -типу, є актуальною задачею фізики напівпровідників.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота була виконана в рамках державного замовлення, яке виконувалось на кафедрі фізичного матеріалознавства для електроніки і геліоенергетики НТУ “ХПІ” за темою: М-6407 “Фізичні основи стабілізації оптичних і фотоелектричних властивостей та ефективності роботи фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії на основі багатошарових композицій з напівпровідникових, діелектричних та металевих плівок” (ДРН 0100U001669).

Мета і задачі дослідження. Основною метою дисертаційної роботи є побудова теорії лінійних явищ переносу у біполярних напівпровідниках, та напівпровідниках p -типу при врахуванні нерівноважних носіїв. Для досягнення цієї мети необхідно було вирішити наступні задачі: 1. Знайти розподіл потенціалу в напівпровідниковому зразку, який знаходиться між двома металевими контактами, при відсутності зовнішнього впливу. 2. Поставити граничні умови до рівнянь неперервності з урахуванням можливості протікання струму через межу поділу двох середовищ. 3. Провести дослідження рекомбінації нерівноважних носіїв як при відсутності, так і при наявності температурного поля в напівпровіднику. 4. Побудувати теорію лінійних явищ переносу, яка враховує появу і рекомбінацію нерівноважних носіїв.

Об'єктом дослідження є нерівноважні носії заряду в напівпровідниках, лінійні по зовнішньому впливу.

Предметом дослідження є лінійні явища переносу в напівпровідниках з урахуванням нерівноважних носіїв заряду, які виникають при протіканні струму через обмежений напівпровідник і не були враховані в існуючій теорії лінійних явищ переносу.

Методом дослідження є система лінійних диференціальних рівнянь, які описують процеси переносу в напівпровідниках в лінійному наближенні, та нові граничні умови, які враховують як рекомбінаційні процеси, так і протікання струму через контакт.

Наукова новизна отриманих результатів визначається рядом теоретичних

результатів, отриманих вперше:

3

1. Показано, що в стаціонарних умовах співвідношення для електронної і діркової рекомбінації повинні тотожно збігатися для будь-якого механізму рекомбінації.
2. Показано, що в біполярних напівпровідниках час життя носіїв можна ввести тільки в режимі квазінейтральності, коли для електронів і дірок існує єдиний час життя.
3. Вперше показано, що при наявності температурного поля в напівпровіднику, у співвідношенні для рекомбінації з'являється доданок, який пов'язаний зі зміною темпу теплової генерації, та пропорційний цьому температурному полю і не залежить від концентрації нерівноважних носіїв.
4. Вперше найбільш повно сформульовані граничні умови до системи рівнянь неперервності і рівняння Пуассона у біполярному напівпровіднику, які враховують рекомбінацію на контакті, протікання струму через контакт і його провідність.
5. Виявлено, що рівноважна контактна різниця потенціалів всередині тонкої напівпровідникової плівки, яка знаходиться між двома металами, є меншою від різниці робіт виходу напівпровідника і металу. І ця різниця прямує до нуля, якщо квадрат товщини напівпровідникової плівки набагато менший від квадрату радіуса Дебая.
6. Здійснено послідовний опис лінійних явищ переносу і показано, що істотну роль у них можуть відігравати процеси рекомбінації нерівноважних носіїв.
7. Показана можливість немонотонного розподілу квазірівня Фермі неосновних нерівноважних носіїв уздовж напрямку протікання струму в зразку для випадку прикладеного до нього температурного поля з постійним градієнтом.

Практичне значення отриманих результатів. Запропонований у роботі підхід до опису явищ струмопереносу може бути використаний при розрахунку характеристик біполярних напівпровідникових елементів та елементів p -типу. Цей підхід дозволяє отримувати точніші теоретичні оцінки робочих параметрів таких елементів як термогенератори і краще уявити картину фізичних процесів, що відбуваються у p - n переходах, при генеруванні термоерс та ін.

Особистий внесок здобувача. Дисертант провів всі основні розрахунки та комп'ютерну побудову графічних матеріалів, здійснив бібліографічний пошук, виділив частинні випадки загальної теорії та провів порівняння з відомими розрахунками. Зокрема, в роботах [3-10] автором отримані загальні вираження для термоерс, вираження для розподілу квазірівнів Фермі та проаналізовані залежності термоерс від швидкості рекомбінації нерівноважних носіїв. В роботах [1, 11, 12] автором отримані загальні вираження для току і опору біполярного напівпровідника, а також, вираження, які визначають межі придатності формул традиційної лінійної теорії. В роботі [2] автор провів бібліографічний пошук і розрахунки, які показали наявність доданку у

4

лінеаризованому співвідношенні для рекомбінації при наявності градієнту температури в напівпровіднику.

Апробація результатів дисертації. Основні результати роботи доповідалися на наступних конференціях: 1. "Thermal conductivity - 25" and "Thermal Expansion - 13" (University of Michigan, Ann Arbor, Michigan USA, June 13-16, 1999); 2. "9 Latin American Congress on Surface Science and Its Applications" (Havana, Cuba, 5-9 July); 3. "The 18th International Conference on Thermoelectrics" (Baltimore, Maryland USA, 29 August - 2 September, 1999); 4. "15th European Conference On Thermophysical Properties" (University of Wurzburg and ZAE Bayern, Wurzburg, Germany, September 5-9, 1999); 5.

Third international school-conference "Physical problems in material science of semiconductors"(Chernivtsi, Ukraine, 7-11 of September, 1999); 6. "The Fifth European Workshop On Thermoelectrics" (Padubice - Liarne Bohdanec Czech Republic, September 20-12, 1999); 7. "VII International Conference of Physics and Technology of Thin Films" (Ivano-Frankivsk, Ukraina, 2-9 October, 1999); 8. "22nd International Conference On Microelectronics" (Nis Yugoslavia, May 14-17, 2000).

Публікації. По темі дисертації надруковано 12 публікацій. З них 4 статті в наукових журналах, та 8 – в збірниках праць та тез міжнародних конференцій.

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається з вступу, п'ятих розділів, висновків, списку використаних джерел (68 джерел) та одного доданку. Загальний обсяг дисертації 113 сторінок, у тому числі 23 рисунки.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтована актуальність обраної теми і сформульована основна мета дисертаційної роботи.

У першому розділі описані загальні положення теорії кінетичних явищ у напівпровідниках і наведені основні рівняння, які застосовуються для опису цих явищ. Проаналізовані підходи, що застосовуються для опису лінійних явищ переносу. Показано, що вони містять ряд протиріч і мають обмежену область придатності. Зокрема, в рамках існуючої теорії лінійних явищ переносу не можна врахувати нерівноважні носії, що можуть з'являтися при протіканні струму через напівпровідник за рахунок зміни локальної концентрації носіїв у кожній точці вже в лінійному наближенні. В той же час, виникнення нерівноважних носіїв приводить до того, що вже в

5

лінійному наближенні для отримання вольтамперної характеристики біполярних напівпровідників недостатньо використовувати тільки закон Ома для парціальних струмів різних типів носіїв. Це пов'язано з тим, що виникнення нерівноважних носіїв приводить до необхідності введення квазірівнів Фермі для кожного типу носіїв замість єдиного рівня Фермі, який існував у рівновазі. При цьому у виразах для закону Ома з'являються невідомі величини j і $m_{n,p}$ – електричний потенціал і хімічні потенціали електронів і дірок або квазірівні Фермі, та $E'_{n,p}$ – узагальнені поля, що визначаються як градієнт електрохімічних

$$E'_n = \nabla(\varphi - \frac{\mu_n}{e}) \neq E'_p = \nabla(\varphi + \frac{\mu_p}{e}),$$

потенціалів. Ці поля різні для кожного типу носіїв, тобто і не можуть бути визначені в рамках існуючої теорії лінійних явищ переносу. Інше протиріччя пов'язане з тим, що при розрахунку таких характеристик, як, наприклад, термоерс або ерс Холу, зазвичай вважається, що електричне коло розімкнене. Це припущення не відповідає умовам експерименту по вимірюваннях згаданих величин, а головне, не відповідає реальним умовам роботи напівпровідникових приладів, режим роботи яких – замкнене електричне коло. Крім того, тільки у розімкненому електричному колі можна розглядати дірковий напівпровідник, як монополярний. Оскільки в замкненому електричному колі на контакті діркового напівпровідника з металевими з'єднувальними провідниками відбувається взаємне перетворення квазічастинок, тому для коректного опису процесів переносу необхідні граничні умови, що враховували б цей процес. Таким чином, електричне коло, що містить в собі дірковий напівпровідник та металеві з'єднувальні провідники, потрібно розглядати як

біполярну систему. Це стосується також і біполярного напівпровідника.

На підставі проведеного аналізу можна зробити висновок, що для побудови теорії лінійних явищ переносу, яка б враховувала нерівноважні носії і не містила зазначені протиріччя, необхідно використовувати більш загальні рівняння, ніж закон Ома для парціальних струмів, якими описуються процеси переносу в напівпровідниках. Ними якраз і будуть рівняння неперервності.

Оскільки в рівняння неперервності входять співвідношення, що описують рекомбінаційні процеси (у загальному випадку і генераційні також, але в цій роботі ми їх не розглядаємо), далі проведено аналіз рекомбінаційних моделей, які найбільш часто використовуються у літературі в лінійному наближенні по концентрації нерівноважних носіїв. Показано, що співвідношення для рекомбінації, які були отримані згідно припущення про виконання умов квазінейтральності або умови монополярності напівпровідника ($n_0 \ll p_0$ або $p_0 \ll n_0$), що визначають швидкість рекомбінації тільки через концентрацію неосновних носіїв, почали потім використовуватися як загальні і для випадку біполярного напівпровідника. Крім того, опис швидкості рекомбінації тільки через концентрацію неосновних носіїв має обмежену область застосування. За допомогою такого підходу неможна описати випадок інжекції основних носіїв, тому що, з формальної точки

6

зору, при цьому виникнення неосновних носіїв не відбувається. Отже, при такому підході рекомбінація повинна дорівнювати нулю. Однак очевидно, що нерівноважні основні носії повинні рекомбінувати. Інший підхід зводиться до введення двох часів життя t_n – для електронів і t_p – для дірок. При цьому співвідношення для електронної і діркової рекомбінації записуються у вигляді: $R_n = dn/t_n$ і $R_p = dp/t_p$, відповідно (dn, dp – концентрації нерівноважних електронів і дірок). Якщо використовувати ці співвідношення, то у випадку відсутності квазінейтральності система рівнянь неперервності буде перевизначеною, тому що з умови сталості повного струму в електричному колі в стаціонарному режимі ($\text{div} j_0 = 0$) впливає нове рівняння $R_n = R_p$. Таким чином існуючі в літературі підходи до опису рекомбінації (у лінійному по концентрації нерівноважних носіїв наближенні) мають обмежену область застосування і непридатні для біполярних напівпровідників.

Рівняння неперервності – диференціальні, тому для повної визначеності задачі необхідно сформулювати граничні умови. Питання про граничні умови в теорії лінійних явищ переносу дотепер ніколи не розглядалося, оскільки існуюча теорія лінійних явищ переносу не вимагала розв'язання диференціальних рівнянь. Аналіз граничних умов, які використовуються при розв'язанні рівнянь неперервності в теорії нелінійних явищ переносу, показав, що ці умови, як правило, стосуються окремих випадків, головним чином квазінейтральності і розімкненого електричного кола. Крім того, граничні умови, що відповідають умовам рівноваги, застосовуються для опису нерівноважних процесів переносу. Наприклад, гранична умова на концентрацію носіїв у площині контакту, яку визначають через рівноважну контактну різницю потенціалів. Але при протіканні струму через контакт ця різниця повинна змінитися. Також часто при розрахунках вольтамперних характеристик задають значення невідомих функцій або їх похідних на межі області об'ємного заряду. При цьому, координату цієї межі беруть рівною її рівноважному значенню. Як наслідок, граничні умови містять величини, що повинні бути визначені тільки після розв'язання рівнянь неперервності (наприклад, концентрація носіїв на контакті, або контактна різниця потенціалів, або розмір області об'ємного заряду). Часто зустрічаються роботи, в яких одна й та ж сама гранична умова (наприклад, для електронів, не

зважаючи на те, чи є вони основними або неосновними носіями)

$$j_n^s \Big|_G = eS \delta n,$$

де S – швидкість поверхневої рекомбінації на межі поділу двох провідних середовищ G , використовується як для розімкненого, так і для замкненого електричного кола. Однак, вона

7

означає, що носії не переносяться через контакт, а генеруються або рекомбінують на ньому. Тобто в замкненому колі струм формується тільки механізмами поверхневої рекомбінації. Як правило, у реальних структурах це не так.

На основі аналітичного огляду сформульована мета дисертації.

В другому розділі отримане співвідношення для рекомбінації в лінійному по концентрації нерівноважних носіїв наближенні. Для цього були використані відомі співвідношення для рекомбінації, визначені за допомогою послідовного статистичного розгляду міжзонних переходів або переходів через домішкові рівні. Отримані результати мають більш загальний характер, ніж співвідношення, які використовуються в сучасній літературі.

Показано, що в біполярних напівпровідниках у загальному випадку не можна коректно ввести час життя носіїв заряду. Виняток становить тільки випадок, коли виконуються умови квазінейтральності. Тоді для електронів та дірок існує єдиний час життя. При відсутності квазінейтральності можна говорити про час життя й описувати рекомбінацію тільки через концентрацію неосновних нерівноважних носіїв тільки у випадку, коли виконана умова: $dn/dp << t_n/t_p = n_0/p_0$ (тут n – концентрація основних носіїв).

Далі показано, що при наявності градієнту температури в напівпровіднику, у співвідношенні для рекомбінації з'являється додатковий член, який не залежить від концентрацій нерівноважних носіїв заряду і пов'язаний зі зміною теплової генерації при наявності градієнту температури. Аналогічно, якщо температура носіїв не дорівнює температурі кристалічної ґратки (наприклад, унаслідок розігріву), з'являється ще один доданок, пропорційний різниці температур підсистем квазічастинок. Він пов'язаний із залежністю від температури коефіцієнту захоплення. У результаті найбільш загальне співвідношення для рекомбінації в лінійному наближенні має вигляд:

$$R_n = R_p = \frac{\delta n}{\tau_n} + \frac{\delta p}{\tau_p} + \gamma(T(x) - T_0) + \beta(T_e - T_0),$$

де T_0 – температура в рівновазі (рівень відліку температури), $T(x)$ – температура кристалічної

ґратки, T_e – температура гарячих носіїв, $\gamma = \frac{1}{2\tau} \frac{\partial n_i}{\partial T}$, n_i – концентрація носіїв у власному

напівпровіднику, $t^{-1} = t_n^{-1} + t_p^{-1}$ – час життя в умовах квазінейтральності, $(t_{n,p} -$ коефіцієнти, які мають розмірність часу, але не мають сенсу часів життя, b – коефіцієнт, який залежить від

концентрації носіїв, температури кристалічної ґратки та ймовірності захоплення носіїв домішковим рівнем (або темпу міжзонної рекомбінації).

У третьому розділі отримані граничні умови для системи, що складається з рівнянь неперервності для електронів і дірок та рівняння Пуассона. Для цього була розглянута межа двох середовищ I і II, що являє собою перехідний шар, товщиною $2d$, у якому параметри середовища I неперервно переходять у параметри середовища II. Властивості цього шару визначаються як властивостями середовищ I і II, так і фізичними процесами, що відбуваються на контакті. Зв'язок між потоками в середовищах I і II може бути отриманий шляхом інтегрування рівнянь неперервності в перехідному шарі ($-d < x < d$) із наступним спрямуванням d до нуля. У результаті отримаємо:

$$\begin{aligned} j_n(+0) - j_n(-0) &= e(R_n^s + G_n^s) \\ j_p(+0) - j_p(-0) &= e(R_p^s + G_p^s) \end{aligned} \quad (1)$$

Співвідношення для потоків утворюються послідовним інтегруванням рівнянь неперервності, спочатку усередині перехідного шару, від деякої точки до його межі, а потім по координаті цієї точки, по всьому шарі й спрямуванням товщини шару до нуля. У результаті отримуємо наступні граничні умови для контакту в точці $x = 0$:

$$\begin{aligned} j_n(\pm 0) &= \sigma_n^s \left[\bar{\varphi}_n(-0) - \bar{\varphi}_n(+0) - \alpha_n^s \left\{ T_n(+0) - T_n(-0) \right\} \right] \pm e \left(R_n^{s \pm} - G_n^{s \pm} \right) \\ j_p(\pm 0) &= \sigma_p^s \left[\bar{\varphi}_p(-0) - \bar{\varphi}_p(+0) - \alpha_p^s \left\{ T_p(+0) - T_p(-0) \right\} \right] \pm e \left(R_p^{s \pm} - G_p^{s \pm} \right) \\ j_0 &= -\sigma_n^s \left[\bar{\varphi}_n(-0) - \bar{\varphi}_n(+0) - \alpha_n^s \left\{ T_n(+0) - T_n(-0) \right\} \right] - \\ &\sigma_p^s \left[\bar{\varphi}_p(-0) - \bar{\varphi}_p(+0) - \alpha_p^s \left\{ T_p(+0) - T_p(-0) \right\} \right] \end{aligned} \quad (2)$$

Тут $\sigma_{n,p}^s$ – електропровідність контакту, $\alpha_{n,p}^s$ – коефіцієнти термоерс контакту, $R_{n,p}^{s \pm}$ і

$G_{n,p}^{s \pm}$ – швидкості рекомбінації і генерації з обох боків від площини контакту, які

задовольняють умові: $R_n^{s+} + R_n^{s-} = R_p^{s+} + R_p^{s-} = R^s$ (теж саме і для генерації), де

R^s – швидкість рекомбінації на

контакті, $\bar{\varphi}_{n,p}$ – електрохімічні потенціали електронів і дірок, $T_{n,p}$ – їхні температури.

Значення величин $\sigma_{n,p}^s$, $\alpha_{n,p}^s$, R^s і G^s повинні бути отримані з мікроскопічної теорії. Перші два з трьох співвідношень (2) зв'язані умовою сталості повного струму в електричному колі

(див. формули (1)), тому співвідношення (2) визначають тільки дві граничні умови.

Виконуючи аналогічні дії з рівнянням Пуассона, отримуємо умову неперервності електричного потенціалу на контакті:

$$j(+0) = j(-0) \quad (3)$$

Значення параметрів у точці $x = \pm 0$ повинні дорівнювати відповідним параметрам у середовищах I і II. При виконанні умов квазінейтральності отримуємо стрибок електричного потенціалу на контакті. В цьому випадку рівняння Пуассона стає непотрібним і вистачає граничних умов, які визначаються тільки співвідношеннями (2).

Умови (2) і (3) дозволяють урахувати як рекомбінаційні процеси, що відбуваються на контакті, так і протікання струму в електричному колі. Вони містять у собі величини, які безпосередньо отримуються з системи рівнянь неперервності і Пуассона, а також феноменологічні характеристики контакту, які можна отримати з мікроскопічної теорії.

Записані вище граничні умови придатні для опису контакту будь-яких двох провідних середовищ.

У четвертому розділі розв'язані лінеаризовані рівняння неперервності при наявності та відсутності квазінейтральності. Вважається, що температура зразка однорідна і до зразка прикладена зовнішня напруга. В цьому випадку отримано співвідношення для вольтамперної характеристики напівпровідника, яка, як і повинно бути в лінійному наближенні, збігається при наявності та відсутності квазінейтральності і являє собою закон Ома. Однак опір напівпровідника тепер залежить не тільки від електропровідностей, але і від швидкостей об'ємної і поверхневої рекомбінації і визначається співвідношенням:

$$R = \frac{2a}{\sigma_n + \sigma_p} \left(1 + \frac{\sigma_p / \sigma_n}{\lambda \operatorname{cth} \lambda + gS} \right),$$

10

де $2a$ – розмір зразка, $s_{n,p}$ – електропровідності електронів і дірок,

$$\lambda^2 = \frac{\sigma_n + \sigma_p}{\sigma_n \sigma_p} \frac{n_0 p_0}{n_0 + p_0} \frac{e^2 a^2}{T \tau}$$

, n_0, p_0 – рівноважні концентрації електронів і дірок, $g = l^2 t / a$, l і gS – мають сенс безрозмірних об'ємної рекомбінації і рекомбінації на контакті, відповідно.

Розв'язання рівнянь неперервності та рівняння Пуассона при відсутності квазінейтральності у рівноважному стані дозволило показати, що контактна різниця потенціалів усередині тонкої напівпровідникової плівки, яка знаходиться між двома металами, буде меншою за різницю робіт виходу напівпровідника і металу. Чим тонша плівка напівпровідника, тим ця відмінність сильніша (див. рис. 1).

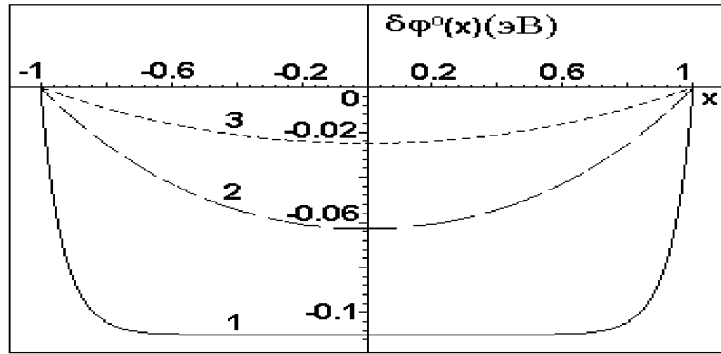


Рис.1. Хід потенціалу в тонкій плівці власного кремнію товщиною a (робота виходу $\sim 4.8\text{eV}$ $r_d \sim 9,5\text{мкм.}$), контактуючого з обох боків з металом (робота виходу $\sim 4.7\text{eV}$)
Крива 1 – $a=100\text{мкм.}$; крива 2 – $a=10\text{мкм.}$; крива 3 – $a=5\text{мкм.}$

Аналіз співвідношення для опору напівпровідника показує, що у випадку, коли час життя t (визначений в другому розділі) або швидкість рекомбінації на контактах S (За аналогією з t , в умовах квазінейтральності, S можна записати, як суму $S = s_n + s_p$, де s_n і s_p – параметри, що характеризують властивості контактів.) задовольняють умовам:

$$\frac{1}{\tau} \gg \left(\frac{\sigma_n + \sigma_p}{\sigma_n \sigma_p} \frac{n_0 p_0}{n_0 + p_0} \frac{e^2 a^2}{T} \right)^{-1} \quad \text{або} \quad S \gg \left(\frac{\sigma_n + \sigma_p}{\sigma_n \sigma_p} \frac{n_0 p_0}{n_0 + p_0} \frac{e^2 a}{T} \right)^{-1} \quad (4)$$

("нескінченна" швидкість рекомбінації), а також для електронного напівпровідника, $s_n \ll s_p$, співвідношення для опору має звичайний вигляд, тобто визначається тільки відповідними

11

електропровідностями – s_n і s_p для власного напівпровідника і s_n або s_p для електронного і діркового, відповідно. Якщо ж нерівності (4) не виконуються, то опір, а, отже, і струм через напівпровідник будуть залежати від величини рекомбінації (див. рис. 2).

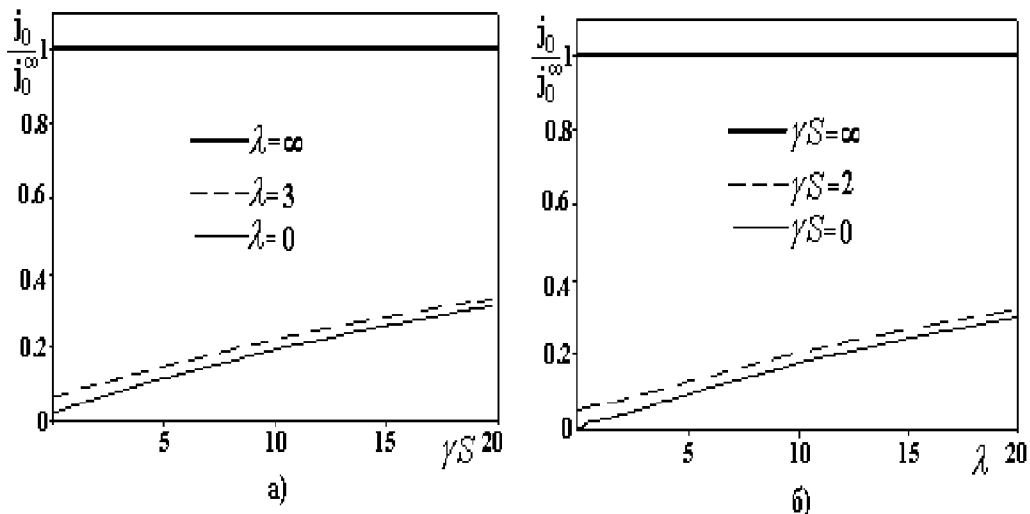


Рис. 2. Залежність струму для зразка германія p -типу ($p_0=2.5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$): а) від швидкості рекомбінації на контактах при різних величинах об'ємної рекомбінації; б) від швидкості об'ємної рекомбінації при різних величинах рекомбінації на

контактах. j_0^∞ – густина струму в електричному колі у випадку нескінченної швидкості об'ємної рекомбінації або рекомбінації на контактах; $l=3$ – відповідає час життя $t_p=1,1 \cdot 10^{-7} \text{ с}$; $gS=2$ – відповідає швидкості рекомбінації на контактах $S=20000 \text{ см/с}$.

Більш того, для діркового і власного напівпровідника, при виконанні умов обернених до (4), опір стає рівним: $R = 2a/s_n$, тобто визначається тільки електронними параметрами (умови обернені до (4) повинні при цьому виконуватися одночасно). Таким чином, вирази (4) визначають межі придатності звичайної лінійної теорії. Оцінки показують, що друге з нерівностей (4) більш жорстке і дає обмеження на розмір зразка, при якому справджується звичайна лінійна теорія. Наприклад, для германія ($n_i = 2,5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, рухливість електронів $u_n=3900$ і дірок $u_p=1800 \text{ см}^2/\text{Вс}$), при $T = 300\text{К}$ і $S \sim 10^2 \text{ см/с}$) $a \gg 0,1 \text{ см}$.

У п'ятому розділі отримане співвідношення для термоерс у рамках лінійної теорії переносу, що враховує виникнення і рекомбінацію нерівноважних носіїв. Воно має вигляд:

$$\varepsilon = 2a \left[\frac{(\alpha_n + \alpha_p) \sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p} \frac{12}{\lambda c \text{th} \lambda + \gamma S} - \frac{\alpha_n \sigma_n + \alpha_p \sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p} \right] \nabla T,$$

де $a_{n,p}$ – коефіцієнти диференціальної термоерс. Термоерс залежить не тільки від електронного і діркового коефіцієнтів термоерс і електропровідностей, а також від швидкостей об'ємної рекомбінації і рекомбінації на контактах.

Визначене співвідношення переходить у звичайний вираз лінійної теорії, якщо виконується хоча б одна з умов (4). Тобто, фізично це означає, що ми маємо велику швидкість рекомбінації і як наслідок відсутність нерівноважних носіїв. У іншому граничному випадку, коли одночасно виконуються умови обернені до (4), співвідношення для термоерс незалежно від типу напівпровідника матиме такий вигляд: $\varepsilon = -2aa_nST$. Це узгоджується з висновками про опір, які були отримані в попередньому розділі. Крім того, отримане співвідношення для термоерс може змінювати знак у залежності від величини швидкостей об'ємної рекомбінації і рекомбінації на контактах і навіть перетворитись в нуль (рис. 3).

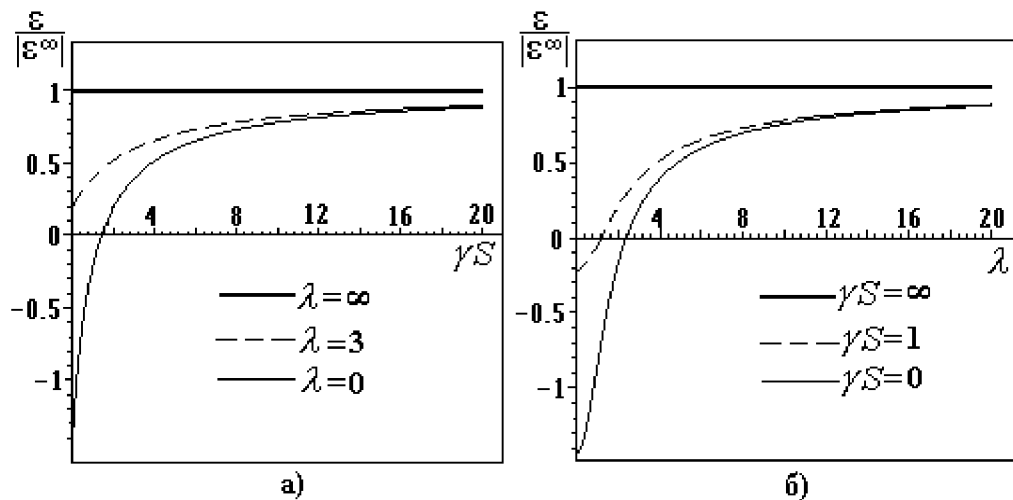


Рис. 3. Залежність термоерс для зразка германія *p*-типу ($p_0=2,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$): а) від швидкості рекомбінації на контактах при різних величинах об'ємної рекомбінації; б) від швидкості об'ємної рекомбінації при різних величинах рекомбінації на контактах. ϵ^Γ – термоерс розрахована по формулі звичайної лінійної теорії.

Цей результат важливий для оцінки очікуваної термоерс (а, отже, і коефіцієнта корисної дії термоелектричного генератора) при створенні тонкоплівкових термоелектричних перетворювачів,

13

оскільки саме у цьому випадку об'ємна рекомбінація може виявитися зовсім незначною. Він також може пояснити наявні в літературі дані про одержання набагато нижчих значень термоерс на епітаксимальних плівках, ніж очікувані по формулах традиційної теорії.

У процесі розрахунків були також отримані співвідношення для квазірівнів Фермі електронів і дірок. Їх аналіз показав, що квазірівні неосновних носіїв можуть бути немонотонними функціями координати, коли напівпровідник знаходиться під впливом постійного градієнту температури. Така поведінка квазірівнів Фермі з'являється тільки при наявності градієнту температури і не була відома раніше ні для яких лінійних явищ переносу.

ВИСНОВКИ

1. Побудовано теорію лінійних явищ переносу в біполярних напівпровідниках та напівпровідниках *p*-типу, що враховує виникнення і рекомбінацію нерівноважних носіїв заряду. На основі розробленої теорії отримані співвідношення для опору і термоерс біполярного напівпровідника при врахуванні нерівноважних носіїв.
2. В загальному випадку показано, що неможливо описати протікання струму в електричному колі метал – дірковий напівпровідник – метал, як для лінійних так і нелінійних явищ переносу, за допомогою лише одного типу носіїв заряду.
3. Показано, що рівноважна контактна різниця потенціалів всередині тонкої напівпровідникової плівки, яка знаходиться між двома металами, буде меншою, ніж різниця робіт виходу напівпровідника і металу.
4. Показано, що опір і термоерс біполярного напівпровідника залежать не тільки від провідностей і коефіцієнтів диференціальної термоерс, але і від швидкостей об'ємної

рекомбінації і рекомбінації на контакті нерівноважних носіїв. Співвідношення для R і e співпадають з відповідними формулами традиційної теорії лінійних явищ переносу тільки у випадку гранично великих швидкостей рекомбінації.

5. Отримано найбільш загальне співвідношення для опису рекомбінації в лінійному (по концентрації нерівноважних носіїв) наближенні і при наявності температурного поля в напівпровіднику.

6. Показано, що в біполярних напівпровідниках взагалі неможливо коректно ввести концепцію часу життя носіїв. Виняток має місце тільки при умові квазінейтральності, коли для електронів і дірок існує єдиний час життя.

7. Вперше найбільш повно сформульовані граничні умови на контакті двох провідних середовищ, що враховують як процеси рекомбінації нерівноважних носіїв на контакті, так і

14

можливість протікання струму в електричному колі. Вони відповідають і реальним умовам експериментів, які проводяться для дослідження кінетичних властивостей напівпровідників, і реальним умовам роботи напівпровідникових приладів.

8. Отримано умови придатності побудованої теорії з яких випливає, що для опису явищ переносу в тонкоплівкових напівпровідникових пристроях (доки ці явища можна описувати в рамках лінійної теорії) доцільно користуватися теорією, викладеною в даній роботі. Застосування формул традиційної теорії лінійних явищ переносу можливе у випадку, коли об'ємну або поверхневу швидкості рекомбінації нерівноважних носіїв можна вважати нескінченною.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Гуревич Ю.Г., Логвинов Г.Н., Эспехо Г., Титов О.Ю., Мериуц А. Роль неравновесных носителей в линейном токопереносе (закон Ома) // ФТП. – 2000. – Т.34, №7. – С.783-786.
2. Volovichev I.N., Espejo G., Gurevich Yu.G., Titov O.Yu., Meriuts A. Recombination in semiconductors: appearance of nonequilibrium carriers due to injection or redistribution in the sample // Jap. J. Appl. Phys. – 2002. - Vol.41. - P.182-184.
3. Gurevich Yu.G., Logvinov G.N., Volovichev I.N., Espejo G., Titov O.Yu, Meriuts A. The role of non-equilibrium carriers in the formation of thermo-e.m.f. in bipolar semiconductors // Phys. Stat. Sol. (b) – 2002. – Vol.231, №1. – P.278-293.
4. Meriuts A.V., Lyubimov O.I., Volovichev I.N., Gurevich Yu.G., Espejo G., Titov O.Yu Linear transport in bounded semiconductors under a thermal field: emergence of nonequilibrium charge carriers // FM – 2002. – Vol.9, №2. – P.176-181.
5. Titov O.Yu, Meriuts A., Espejo G., Volovichev I.N., Gurevich Yu.G., Lyubimov O.I. Thermal and electric transport in semiconductors under a thermal field: emergence of nonequilibrium charge carriers // High Temperatures-High Pressures. – 2001. - Vol.33. - P.65-71. (Proceedings of the 15th ECTP, Wurzburg, Germany – 1999. –P.737-743.)
6. Espejo G., Volovichev I.N., Gurevich Yu.G., Logvinov G.N., Meriuts A., Titov O.Yu. Thermal field – the source of the emergence of nonequilibrium charge carriers in semiconductors // Proceedings of the 25 International Thermal Conductivity and 13 Thermal expansion Symposium, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, USA. – 1999. - P.213-223.
7. Titov O.Yu., Espejo G., Gurevich Yu.G., Meriuts A., Logvinov G.N. Nonlinear and nonequilibrium heat and electric transport in semiconductors: characterization and

applications for thin films // Proceedings of the 9th Latin American Congress, La Habana, Cuba. – 1999. - P.143-145.

15

8. Espejo G, Meriuts A., Titov O.Yu., Logvinov G.N., Volovichev I.N., Gurevich Yu.G. Thermoelectric transport in semiconductors – emergence of nonequilibrium charge carriers // Proceedings of the 18th International conference on Thermoelectrics Baltimore, Maryland, USA. – 1999. - P.598-600.
9. Titov O.Yu., Espejo G., Gurevich Yu.G., Meriuts A., Logvinov G.N. The novell approach to the thermoelectric phenomena // Proceedings of the 5th European workshp on thermoelectrics, Padubice - Liarne Bohdanec, Czech Republic. – 1999. - P.110-113.
10. Espejo G., Volovichev I.N., Gurevich Yu.G., Meriuts A., Logvinov G.N., Titov O.Yu. Thermal field – the source of the emergence of nonequilibrium charge carriers in semiconductors // Proceedings of the 22nd International Conference On Microelectronics, Nis, Yugoslavia. – 2000. - P.181-184.
11. Espejo G., Meriuts A., Titov O.Yu., Gurevich Yu.G. Electrical transport in p-type semiconductor: the role of recombination // Third international school-conference, Chernivtsi, Book of abstracts. – 1999. – P.75.
12. Meriuts A., Espejo G., Titov O.Yu., Gurevich Yu.G. Transport in metal-p-type semiconductor thin film-metal structure // VII International conference of physics and technology of thin films, Ivano-Frankivsk, Book of abstracts. – 1999. – P.11.

АНОТАЦІЇ

Меріуц А.В. Роль нерівноважних носіїв заряду в лінійних явищах переносу в обмежених напівпровідниках. – Рукопис.

Дисертація на здобуття вченого ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків. – Інститут монокристалів НТК “Інститут монокристалів” НАН України, Харків, 2002. Дисертація присвячена дослідженню впливу нерівноважних носіїв заряду на лінійні процеси переносу в напівпровідниках. На прикладі лінійного струмопереносу і формування термоерс у біполярних напівпровідниках та напівпровідниках *p*-типу показано, що в лінійній теорії явищ переносу, у загальному випадку, неможна знехтувати зміною локальної концентрації носіїв при як завгодно слабкому зовнішньому впливі. Тому для коректного опису процесів лінійного переносу необхідне врахування рекомбінації нерівноважних носіїв. Урахування об'ємної рекомбінації та рекомбінації на контактах напівпровідника і метала здійснено у межах відомого формалізму, який базується на використанні рівнянь неперервності.

16

Встановлено, що при наявності градієнту температури в напівпровіднику у виразах для об'ємної рекомбінації з'являється додатковий член, пропорційний цьому градієнту. Сформульовані найбільш повні граничні умови до рівнянь неперервності, що враховують як рекомбінацію електронів і дірок на контакті двох середовищ, так і протікання струму через контакт. Отримані граничні умови можуть бути застосовані також при розв'язанні нелінійних задач.

На основі розробленої теорії отримані співвідношення для опору і термоерс біполярного напівпровідника. Показано, що вони істотно залежать від темпів об'ємної рекомбінації і рекомбінації на контакті. Вказані межі придатності отриманих формул.

Ключові слова: біполярний напівпровідник, електрон, дірка, нерівноважні носії заряду, рекомбінація, електропровідність, термоерс.

Meriuts A.V. The role of nonequilibrium carriers of charge in linear transport phenomena in bounded semiconductors. – Manuscript.

PhD Thesis by speciality 01.04.10 – physics of semiconductors and dielectrics. – Institute for Single Crystals of STC “Institute for Single Crystals” National Academy of Science of Ukraine, Kharkov, 2002.

The thesis is devoted to study the influence of nonequilibrium carriers of charge on linear electric current and generation of thermo-e.m.f in bounded semiconductors. It is shown that in the theory of linear transport phenomena in general case it is impossible to neglect the change of local concentration of carriers at even under any weak external perturbation, therefore it is necessary to consider the bulk and surface recombination in the contact for correct description of linear transport processes. The bulk and surface recombination in the contacts were taken into account jointly with continuity equations known formalism.

It has been shown that in the linearized equation for the bulk recombination the additional term arises which is proportional to the temperature gradient. The boundary conditions for continuity equations have been formulated containing electron and hole recombination at the contact between two media as well as the current flow through this contact. The obtained boundary conditions are applied for the nonlinear problems also.

The expressions for the resistance and thermo-e.m.f of bipolar semiconductor have been obtained within the framework of this theory. It has been shown that they depend on the electron and hole conductivity as well as on the contacts and bulk recombination rate. The limits of applicability of the obtained results are specified.

Keywords: bipolar semiconductor, electrons and holes, electric conductivity, thermo-e.m.f., nonequilibrium carriers of charge, generation, recombination.

17

Мериуц А.В. Роль неравновесных носителей заряда в линейных явлениях переноса в ограниченных полупроводниках. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников и диэлектриков. – Институт монокристаллов НТК “Институт монокристаллов” НАН Украины, Харьков, 2002.

Диссертация посвящена исследованию влияния неравновесных носителей заряда на линейные явления переноса в полупроводниках. В работе, на примере процессов линейного токопереноса и формирования термоэдс в биполярных полупроводниках и полупроводниках р-типа показано, что в линейной теории переноса, в общем случае, нельзя пренебречь изменением локальной концентрации носителей при сколь угодно слабом внешнем воздействии. Поэтому, для корректного описания линейных процессов переноса необходимо учитывать появление неравновесных носителей при протекании тока через ограниченный полупроводник и их рекомбинацию. Учет объемной рекомбинации и рекомбинации на контактах полупроводника и металла, проведен в рамках известного формализма основанного на использовании уравнений непрерывности. Показано, что протекание тока в цепи металл – дырочный полупроводник – металл, как для линейных, так и для нелинейных явлений переноса, в общем случае не может быть описано с помощью только одного типа носителей. Показано, что в условиях стационарного потока, в общем случае, в биполярном полупроводнике нельзя ввести время жизни неравновесных носителей. Время жизни можно ввести только при выполнении условий квазинейтральности. Только в этом случае справедливы линеаризованные выражения для рекомбинации (как объемной,

так и поверхностной) часто используемые в современной литературе в качестве общих выражений. Установлено, что при наличии градиента температуры в полупроводнике в линеаризованных выражениях для рекомбинации появляется дополнительный член, пропорциональный этому градиенту и не зависящий от концентрации неравновесных носителей. Сформулированы наиболее полные граничные условия к уравнениям непрерывности, позволяющие учесть как рекомбинацию электронов и дырок на контакте двух сред, так и протекание тока через контакт. Полученные граничные условия применимы также для нелинейных задач.

На основе разработанной теории линейных явлений переноса получены выражения для сопротивления и термоэдс биполярного полупроводника. Показано, что эти выражения существенно зависят от скоростей объемной рекомбинации и рекомбинации на контакте. Так, например, в случае слабой рекомбинации, термоэдс и ток в полупроводнике p -типа могут изменить знак. Получены условия, определяющие пределы применимости формул обычной теории и формул, полученных с учётом неравновесных носителей. Сделаны численные оценки, из

18

которых следует, что при описании явлений переноса в тонкоплёночных полупроводниковых устройствах, в линейном приближении, целесообразно использовать формулы, учитывающие неравновесные носители.

Основные результаты работы могут быть использованы при расчете характеристик биполярных полупроводниковых элементов и элементов p -типа, что позволит получать более точные теоретические оценки их рабочих параметров. Использование результатов работы может быть также полезным при оптимизации тонкоплёночных полупроводниковых термогенераторов и других устройств на основе многослойных композиций из полупроводниковых и металлических плёнок.

Ключевые слова: биполярный полупроводник, электрон, дырка, неравновесные носители заряда, рекомбинация, электропроводность, термоэдс.