

Дифференциальные потоки энергии в слое твердотельной структуры

© М.Б. Керими

Центр технологий АН Туркменистана, Ашхабад, 744032, Туркменистан

В слое твердотельной структуры с плоскопараллельным строением распространение потоков энергии в равновесии и при его нарушении осуществляется дифференциальными потоками носителей заряда, фотонов, фононов и квазичастиц других видов. Совместное распространение указанных потоков отвечает специфичным закономерностям, обусловленным механизмами их рассеяния. В уравнениях распространения потоков и граничных условиях к ним необходимо учитывать последствия рассеяния и роль порождаемых потоков. Учет рассеяния потоков не только в толще слоя, но и на его границах, особенно в тонких слоях, оказывает существенное влияние на понимание того, как распространяются потоки квазичастиц и дифференциальные и интегральные потоки энергии.

В приближении времени релаксации краевые задачи о распространении дифференциальных потоков квазичастиц с учетом рассеяния потоков на границах слоя имеют одинаковый вид. В силу этого общие выводы, полученные ранее для потоков носителей заряда, справедливы и для потоков фотонов и фононов. В частности, потоки суперлинейно зависят от вероятностей их рассеяния на границах тонкого слоя, а также от отношения толщины слоя к характеристической длине свободного пробега. Выходящие из слоя потоки имеют такую же зависимость от указанных характеристик границ и безразмерного параметра толщины слоя. Чем меньше параметр толщины слоя, тем сильнее проявляется суперлинейная зависимость всех дифференциальных и интегральных потоков. При этом вследствие обмена дифференциальными потоками влияние соседних слоев на рассматриваемый оказывается более существенным.

Ключевые слова: кинетическая теория, дифференциальные потоки носителей заряда, фотонов, фононов, перенос энергии

В повседневной практике распространение потоков энергии в больших и малых объектах из твердотельных материалов часто играет важную роль. Попытки корректно описать различные способы переноса энергии в среде и у ее границ предпринимались неоднократно [1]. Перенос энергии в твердотельном материале осуществляется дифференциальными потоками носителей заряда, фотонов, фононов и других квазичастиц.

Физике распространения потоков квазичастиц и способам описания их взаимодействия посвящено немало исследований [2–8]. Первой фундаментальной монографией, где дано систематическое описание электронных и фононных процессов переноса, является [2]. Кроме основных представлений о поведении носителей заряда и фононов в кристаллической решетке, в этой книге рассмотрены взаимодействие между указанными квазичастицами и процессы рассеяния на дефек-

тах. Также в ней изложены вопросы, связанные с теплопроводностью кристаллической решетки и электропроводностью металлов и полупроводников; развиты формальная теория явлений переноса и представления о диффузионном и зеркальном отражении электронов и фононов от поверхности твердого тела; рассмотрены роль поверхности и зависимость кинетических коэффициентов от размеров образца.

Появление [2] заметно повлияло на развитие физики твердого тела. Однако выделение зеркального и диффузионного потоков как результата рассеяния потоков на границе представляется несколько искусственным. Поэтому полученные зависимости кинетических коэффициентов от размеров образца нельзя считать справедливыми для всех случаев рассеяния потоков на границах.

В [3] описано и проанализировано распространение потоков энергии в твердотельных материалах. Отмечено, что процессы переноса энергии играют фундаментальную роль в физике твердого тела. Рассмотрены механизмы переноса энергии в металлах, полупроводниках, диэлектриках, имеющих кристаллическое, поликристаллическое и аморфное строение. В каждом случае перенос энергии имеет особенности, в том числе температурные.

Очевидно, эти особенности связаны, помимо прочего, с распространением дифференциальных потоков носителей заряда, фотонов, фононов и других квазичастиц в среде объекта и у его границы.

Многие аспекты распределения носителей заряда по квазиимпульсу и координатам в рамках кинетической теории рассмотрены в [4], где, в частности, затронуты вопросы совместного распространения электронов и фононов в твердотельном материале, а также обсуждается эффект фононного увлечения электронов. Однако адекватные граничные условия совместного распространения указанных квазичастиц, которые играют особую роль в тонких твердотельных слоях и в материалах с крупнозернистым строением, в [4], как и в других указанных ранее работах, не рассматривались.

В некоторых источниках обсуждается влияние границ твердотельной среды на распространение дифференциальных и интегральных потоков квазичастиц и энергии, однако адекватное универсальное описание распространения потоков через границу отсутствует. Граничные условия совместного распространения дифференциальных потоков носителей заряда, фотонов, фононов и других квазичастиц применительно к частному случаю строения и состояния границ плоскопараллельного слоя твердотельной структуры приведены в [9]. Там же обсуждаются ситуации, в которых эти граничные условия остаются корректными.

Целью данной работы является изучение распространения потоков квазичастиц в плоскопараллельном слое твердотельной структуры с учетом их рассеяния не только в толще слоя, но и на его грани-

цах, а также исследование связанных с указанными потоками дифференциальных и интегральных потоков энергии. Поскольку многие современные электронные приборы создаются на основе твердотельных структур с тонкими слоями, эти исследования актуальны и представляют большой научный и практический интерес.

Микроскопическое строение твердотельного материала может быть весьма разнообразным, например, кристаллическим, поликристаллическим, микрокристаллическим, аморфным, однородно зернистым, композитным — смешанным в разных пропорциях и т. д., а объекты могут иметь разную форму и быть, в частности, многослойными. Энергетическое строение зон перечисленных материалов, как и их разнообразные спектральные характеристики, также могут быть существенно или принципиально различными. В силу этого исследование равновесного и неравновесного распространения дифференциальных и интегральных потоков энергии, переносимых носителями зарядов, фотонами, фононами и другими квазичастицами, а также суммарного полного потока энергии в общем случае представляется чрезвычайно сложным. Распространение потоков квазичастиц, а вместе с ними и потоков энергии через границу или поверхность оказывается еще более сложным процессом. Это объясняется особым физическим и энергетическим строением, а также распределением мелкомасштабных неоднородностей, в том числе микрорельефом, т. е. значительными различиями физических свойств границы или поверхности и толщи твердотельного материала.

В кристаллических структурах с плоскопараллельным строением (включая границы) распространение потоков квазичастиц и энергии не обременено многими факторами, влияющими на процессы детального микроскопического транспорта энергии. В этом случае перенос энергии осуществляется дифференциальными потоками (распространяющимися в малом телесном угле) носителей заряда, фотонов, фононов и других квазичастиц, зависящими от одной координаты и угла распространения относительно нормали к макроскопической границе. Распространение указанных потоков отвечает специфичным закономерностям, определяемым соответствующими адекватными уравнениями и граничными условиями. Адекватность описания физической картины в слое обеспечивается корректностью учета рассеяния дифференциальных потоков и результатов этого рассеяния. В частности, в результате рассеяния в толще слоя и на его границах возможно появление дифференциальных потоков квазичастиц не только данного, но и других видов.

В нано- и субмикронном масштабах поверхности и границы твердотельных слоев могут иметь очень сложное строение, которое не всегда в достаточной степени контролируется технологически, хотя современные технологии позволяют влиять на строение поверхно-

сти или границы слоя в довольно широких пределах. Указанный масштаб важен для изучения распространения потоков носителей заряда и других квазичастиц в рамках кинетической теории, поскольку характерная для объемных твердотельных материалов средняя длина свободного пробега носителей заряда l_e , а также характерные длины других квазичастиц могут иметь примерно те же значения. Следовательно, для сохранения «плоскопараллельности» микрорельеф границы и распределение других неоднородностей на границе и вдоль нее должны быть такими, чтобы границу можно было считать однородной в указанном масштабе характерных длин.

Наличие границ между тонкими слоями материалов существенно влияет на физические свойства и характеристики твердотельной структуры, в том числе тепловые. Влияние границ особенно заметно в тандемных или каскадных солнечных элементах, где имеется много твердотельных слоев с различными оптическими, электрическими, тепловыми свойствами и атомарным строением, а также множество границ разного качества. Каждая граница слоев твердотельной структуры имеет характерный микрорельеф и некоторые особенности в распределении мелких неоднородностей разной физической природы, т. е. особенности строения. Они зависят от многих факторов, в том числе от технологии создания слоя, температурных свойств материалов, качества (чистоты) используемых для наращивания слоя материалов, в частности полупроводниковых, атомарного и микромасштабного строения слоя, направления трансляционных векторов кристаллической решетки данного и смежного с ним слоев («подложки») относительно нормали к макроскопической границе и т. д.

В связи с последовательным расположением слоев имеется взаимное влияние свойств и характеристик слоев монолитной структуры, особенно при малой их толщине. Это связано с распространением потоков носителей заряда и других квазичастиц в структуре через границы как в равновесии, так и при его нарушении. Обмен квазичастицами на границе, осуществляемый дифференциальными потоками, зависит не только от строения и состояния границ, но и от объемных свойств каждого слоя [10]. Это влияет на свойства и характеристики структуры в целом, в том числе на эффективность фотоэлектрического преобразования солнечного элемента слоистой структуры. Если в структуре имеются толстые слои, то влияние соседних слоев сказывается в основном лишь вблизи их границ и роль влияния границ уменьшается по мере увеличения толщины слоя.

Феноменологическое описание распространения потоков энергии, в частности тепловой, является более крупномасштабным и более распространенным. Однако в этом случае сложно корректно учесть особенности микроскопического строения и состояния материальной среды и особенно ее границ. В частности, при описании тепловых

потоков характеристикой среды является коэффициент теплопроводности, а характеристикой границы — коэффициент теплопередачи. При распространении теплового потока (также осуществляемого носителями зарядов, фотонами, фононами и т. д.) через тонкие твердотельные слои, которые нельзя считать однородными по толщине, необходимо учитывать влияние строения и состояния границ на указанные коэффициенты при феноменологическом описании потоков энергии в толще слоя и на его границах.

Рассматриваемые коэффициенты зависят от строения и состояния толщии слоя и от качества границы, в том числе от однородности ее свойств в микромасштабе. В рамках крупномасштабной теории корректно учесть эту сложную зависимость практически невозможно. Каждому значению толщины слоя соответствуют определенные значения указанных коэффициентов, обусловленные строением и состоянием толщии слоя и его границ, а также наличием соседних слоев твердотельной структуры (классический размерный эффект).

Рассмотрим твердотельный слой (например, полупроводника), характерные размеры микрорельефа и неоднородности которого много меньше длины свободного пробега носителей заряда l_e (и других характерных длин l значимых потоков квазичастиц) и достаточно плотно и равномерно распределены по границе. В этом случае толщина слоя d при $d \geq l$ является статистически хорошо обусловленной величиной, а характеристики поверхности поддаются гомогенизации. Задача распространения потоков сводится к двумерной (плоскопараллельной).

Носители заряда в толще слоя имеют разные скорости и направления распространения. Как и другие квазичастицы, они создают дифференциальные потоки носителей и квазичастиц, переносящих энергию.

С границей непосредственно взаимодействуют в основном только те квазичастицы, которые находятся вблизи нее (в среднем на расстоянии не более l) и распространяются в сторону границы. В связи с этим у границы и в тонком слое в целом рационально выделить потоки, распространяющиеся к границе и от нее, например, соответственно $e^+(x, \mathbf{k})$ и $e^-(x, \mathbf{k})$ или $e^+(x, k, \Omega)$ и $e^-(x, k, \Omega)$. Когда направление вектора совпадает с направлением волнового вектора \mathbf{k} (здесь $\Omega \Rightarrow (\theta, \varphi)$, θ — полярный угол, φ — азимутальный угол), тогда волновой вектор \mathbf{k} (или \mathbf{K} для потока квазичастиц другого вида) характеризует энергию носителей заряда $\varepsilon(\mathbf{k})$ (или для квазичастицы $\hbar\omega(\mathbf{K})$ и т. п.). Аналогичную процедуру необходимо выполнить и для дифференциальных потоков других квазичастиц, например фотонов: $I^+(x, K, \Omega)$ и $I^-(x, K, \Omega)$ и фононов $f^+(x, k, \Omega)$ и $f^-(x, k, \Omega)$.

Рассмотрим общую физическую картину на границе раздела слоев. На элементарную площадку в форме круга на усредненной макроскопической границе (рис. 1) по разным направлениям падают диф-

ференциальные потоки носителей заряда и других квазичастиц, имеющие разную энергию. Интегрально (суммарно по всем волновым векторам полусферы) они создают плотность потока Q^+ каждого вида. Часть R этого падающего на границу потока отражается, часть T проходит ее, часть S теряется на ней. При этом, очевидно, должно выполняться условие $R + T + S = 1$. Для потока Q^- , падающего на границу с другой ее стороны, картина аналогична.

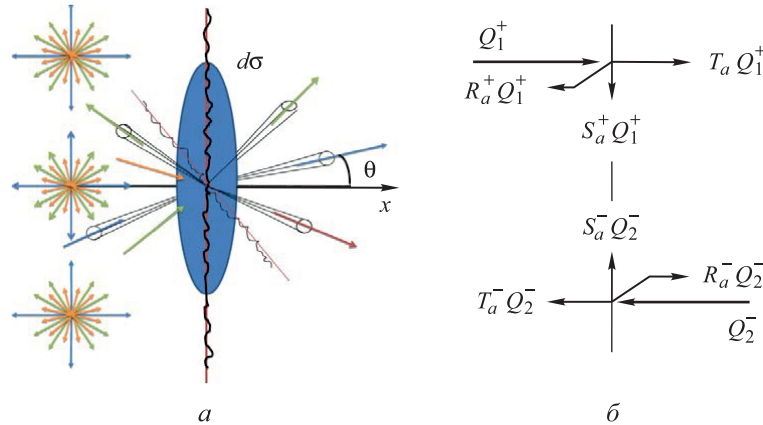


Рис. 1. Рассеяние дифференциальных потоков носителей заряда, падающих на элементарную площадку $d\sigma$ (а), и результаты рассеяния интегральных потоков Q^+ и Q^- на $d\sigma$ (б)

Собирая все потоки, записанные через соответствующую функцию распределения носителей заряда (и других квазичастиц) в каждом слое, нетрудно получить интегральное граничное условие для потоков. Заметим, что учет не только факта потери части потока на границе, но и последствий такого взаимодействия с границей, в частности порождения потоков квазичастиц разных видов, переопределяет указанные выше доли при сохранении условия $R_* + T_* + S_* = 1$. Напомним, что интегральные потоки определяются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} Q^+(\mathbf{k}) &= \int_{\nu^+} q^+(x, k, \Omega) \mu k^2 dk d\Omega; \\ Q^-(\mathbf{k}) &= \int_{\nu^-} q^-(x, k, \Omega) \mu k^2 dk d\Omega. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $\mu = |\cos \theta|$; $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$, а областями интегрирования являются правая и левая полусферы пространства квазиимпульсов или ячейки Вигнера — Зейтца для носителей заряда.

При рассеянии каждого дифференциального потока как в толще слоя, так и на его границах могут появиться потоки квазичастиц не только данного вида (с другими величинами аргументов k, Ω), но и другие потоки. В частности, дифференциальные потоки атомов, падающие на поверхность слоя, приводят к появлению потоков фоонов, а возможно, и носителей заряда в слое.

Взаимодействие дифференциальных потоков на границах слоя обычно отличается от объемного в силу различного их строения и состояния. В общем случае как на границе, так и в толще плоскопараллельного слоя характер взаимодействия потоков может зависеть от координат. Очевидно, что перечень учитываемых потоков квазичастиц разных видов следует рационально ограничить в соответствии с их значимостью в рассматриваемых условиях. При этом не нужно забывать, что значимость потока необходимо определять не только в толще, но и на границах слоя. Наиболее ярко эта особенность проявляется при баллистическом и квазibalлистическом распространении потоков квазичастиц, когда рассеяние потоков на границах преобладает над рассеянием в толще слоя. Более детально эти вопросы рассмотрены в [9]. Там же впервые приведены интегральные граничные условия общего вида для распространения взаимодействующих дифференциальных потоков квазичастиц разного вида.

В граничных условиях к задаче совместного распространения потоков разных видов для каждого потока необходимо учитывать как прямые, так и обратные процессы рассеяния, особенно при равновесии. В этом случае граничное условие для слоя, расположенного в границах $a \leq x \leq b$, для проекции позитивной составляющей потока носителей заряда $e^+(\mathbf{k})$ с модулем волнового вектора \mathbf{k} , распространяющегося под углом θ к оси OX , нормальной относительно макрограницы, и аналогично, например, для потока фотонов $I^+(\mathbf{K})$ имеет интегральный вид:

$$e^+(\mathbf{k})\mu = e_a^+(\mathbf{k})\mu + \int_{V^-} P_{ee}^-(\mathbf{k}, \mathbf{k}_*)e^-(\mathbf{k}_*)\mu_*dV_{k_*} + \int_{W^-} P_{eI}^-(\mathbf{k}, \mathbf{K}_*)I^-(\mathbf{K}_*)\mu_*dW_{K_*}; \quad (2)$$

$$I^+(\mathbf{K})\mu = I_a^+(\mathbf{K})\mu + \int_{V^-} P_{Ie}^-(\mathbf{K}, \mathbf{k}_*)e^-(\mathbf{k}_*)\mu_*dV_{k_*} + \int_{W^-} P_{II}^-(\mathbf{K}, \mathbf{K}_*)I^-(\mathbf{K}_*)\mu_*dW_{K_*}. \quad (3)$$

Здесь $\mu = |\cos \theta|$; $P_{ee}^-(\mathbf{k}, \mathbf{k}_*)$ — вероятность рассеяния потока $e^-(\mathbf{k}_*)$ в поток $e^+(\mathbf{k})$; $P_{eI}^-(\mathbf{k}, \mathbf{K}_*)$ — вероятность рассеяния потока $I^-(\mathbf{K}_*)$ с порождением вклада в поток $e^+(\mathbf{k})$ (P_{Ie}^- , P_{II}^- — по аналогии); простран-

ственные координаты плоскости $x = a$ в падающих из рассматриваемого слоя и рассеянном потоках не обозначены; $e^+_a(\mathbf{k}), f^+_a(\mathbf{k})$ — потоки, вошедшие в данный слой через границу из соседнего слоя. Они содержат также два практически аналогичных интегральных члена от падающих на элементарную площадку $d\sigma$ дифференциальных потоков из соседнего слоя, расположенного левее границы при $x = a$. Направление потока носителей заряда совпадает с соответствующим волновым вектором \mathbf{k} , если закон дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ изотропен. Именно этот случай и сохраняет задачу плоскопараллельной. Остальные обозначения аналогичны. Интегрирование подразумевается как по модулю, так и по телесному углу в пределах полусферы в пространствах соответствующего волнового вектора.

Поток $e^+_a(\mathbf{k})$, входящий в слой через границу $x = a$, в общем случае может либо отсутствовать (на поверхности), либо содержать один или несколько интегралов (в соответствии с ролью потоков квазичастиц разных видов, учитываемых в граничном условии), аналогичных приведенным выше с областями интегрирования по позитивной части пространств волновых векторов материала смежного слоя. На другой границе слоя, расположенной при $x = b$, граничные условия имеют аналогичный вид. Подобные условия связывают потоки $e^+(a, k, \Omega)$ и $e^-(a, k, \Omega)$, а также потоки $I^+(b, K, \Omega)$ и $I^-(b, K, \Omega)$ с учетом возможного обмена квазичастицами между смежными слоями и взаимного влияния рассеяния потоков разных видов на границах.

В случае плоскопараллельного слоя указанные потоки зависят лишь от азимутального угла θ , однако использование телесного угла Ω позволяет заметно укоротить интегральные математические выражения. Рис. 2 поясняет математическую запись интегральных граничных условий. В качестве потоков q могут рассматриваться потоки носителей заряда, фотонов или фононов и другие потоки, которые вносят заметный вклад в некий выделенный дифференциальный поток $q = (q_{in} + q_{ex})$ от рассеивающихся внутренних и внешних потоков, падающих на границу справа и слева. Падающие на элементарную площадку $d\sigma$ с разных сторон от границы потоки для наглядности на рисунке разнесены вдоль границы.

Граничные условия (2), (3) можно использовать и при квантовомеханическом описании распространения квазичастиц, если на границе имеются условия, позволяющие локально выбрать плоскую элементарную площадку $d\sigma$ соответствующих данному теоретическому описанию размеров, с однородными свойствами или характеристиками (в частности, с вероятностью рассеяния $P^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}^*)$ и $P^-(\mathbf{k}, \mathbf{k}^*)$ для плотности потока вероятности $j(a, k, \Omega)$). При выполнении условий плоскопараллельности слоя в масштабах квантовой или кинетической теории уравнения распространения потоков и определение потоков непосредственно в выражениях (1)–(3) должны задаваться в рамках соответствующей теории.

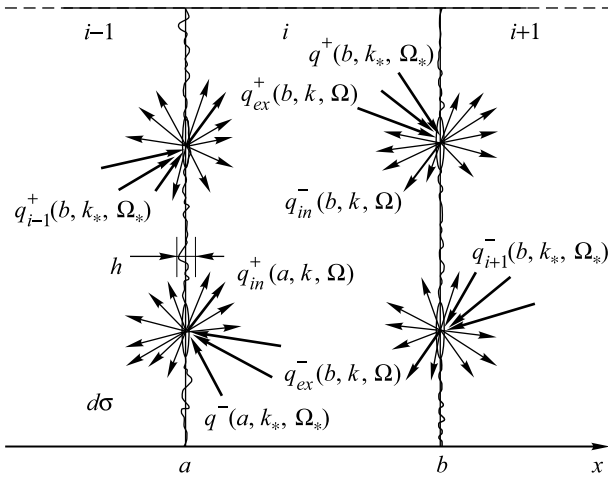


Рис. 2. Рассеяние дифференциальных потоков на границах внутреннего слоя плоскопараллельной твердотельной структуры, при котором происходит обмен носителями и энергией между слоями

Закономерности распространения дифференциальных потоков носителей заряда в приближении времени релаксации в плоскопараллельном слое твердотельной структуры с корректным учетом рассеяния потоков носителей на границах слоя изучены в [9–15]. Отмечено, что особенности распространения потоков наиболее сильно проявляются в тонком слое. В частности, показано, что потоки носителей заряда нелинейно зависят от вероятностей их рассеяния на границах слоя и существенно зависят от отношения толщины слоя к характеристической длине свободного пробега носителей заряда. Из полученного решения краевой задачи следует, что в силу возможности обмена носителями заряда свойства соседних слоев могут значительно влиять на электронные свойства рассматриваемого тонкого слоя.

Закономерности распространения дифференциальных потоков фотонов в плоскопараллельной среде подробно изложены в [16]:

$$\cos \theta \frac{dI(x, K, \Omega)}{dx} = -\alpha_K(x)I(x, K, \Omega) + \varepsilon(x, K, \Omega), \quad (4)$$

где $\alpha_K(x)$ — коэффициент поглощения света с модулем волнового вектора \mathbf{K} (здесь \mathbf{K} характеризует направление распространения потока и энергию фотонов); $\varepsilon(x, K, \Omega)$ — коэффициент излучения света, или плотность генерации потока фотонов.

Последнее слагаемое в уравнении (4) описывает излучение света, вызванное разными обстоятельствами, в том числе непосредственно распространением потоков фотонов. При наличии в рассматриваемом твердотельном слое дифференциальных потоков не только фотонов,

но и квазичастиц других видов возможно, что их распространение также приводит к излучению фотонов соответствующей энергии с разным направлением их распространения. Таким образом, коэффициент $\varepsilon(x, K, \Omega)$ в общем случае является составным, а число слагаемых в нем обусловлено ролью потоков квазичастиц разного вида, а также наличием соответствующих обстоятельств и условий их распространения.

Распространение всех разнонаправленных дифференциальных потоков ($I^+(x, K, \Omega)$ при $\cos \theta > 0$ и $I^-(x, K, \Omega)$ при $\cos \theta < 0$, отдельно) в плоскопараллельной среде связано только с одной координатой x , направленной вдоль нормали, т. е. по толщине слоя.

В общем виде как при наличии внутренних источников излучения в толще слоя, так и при их отсутствии граничные условия к уравнению распространения дифференциальных потоков (4) в плоскопараллельном слое твердотельной структуры, расположенном в границах $a \leq x \leq b$, имеют вид [17]

$$I^+(a, K, \Omega)\mu = I_a^+(K, \Omega)\mu + \int_{V^-} P_{ia}^-(k, \Omega, C_*, \Omega_*) I^-(a, K_*, \Omega_*) \mu_* K_*^2 dK_* d\Omega_*; \quad (5)$$

$$I^-(b, K, \Omega)\mu = I_b^-(K, \Omega)\mu + \int_{V^+} P_{ib}^+(K, \Omega, K_*, \Omega_*) I^+(b, K_*, \Omega_*) \mu_* K_*^2 dK_* d\Omega_*. \quad (6)$$

Здесь $I^+(a, K, \Omega)$ — модуль плотности дифференциального потока фотонов с волновым вектором \mathbf{K} , распространяющегося от границы $x = a$ в направлении $\Omega \Rightarrow (\theta, \varphi)$ в толщу слоя (одинакового при любом значении φ); $\mu = |\cos \theta|$, $I_a^+(K, \Omega)$ — модуль плотности потока фотонов, вошедшего в слой через эту границу из соседнего слоя (этот поток также выражается аналогичным интегралом, поскольку является результатом рассеяния вперед всех падающих на границу дифференциальных потоков фотонов в соседнем слое).

Смысл всех обозначений в граничном условии (6) у границы слоя $x = b$ и пояснений к ним аналогичен смыслу обозначений, описанных выше для границы при $x = a$. Области интегрирования в (5) и (6) соответствуют бесконечной левой V^- и правой V^+ полусферам. Все входящие в рассматриваемый слой дифференциальные потоки $I_a^+(K, \Omega)$ и (или) $I_b^-(K, \Omega)$ могут отсутствовать, например на поверхности, если на нее не падает свет. Заметим, что случай зеркального отражения света поверхностью является частным случаем приведенного граничного условия.

Если на границах слоя генерируются потоки фотонов вследствие рассеяния на них потоков других квазичастиц, то граничные условия усложняются (см. выражения (2), (3) или [9]).

Совместно с уравнением (4), рассматриваемым отдельно для дифференциальных потоков, направленных вперед $I^+(x, K, \Omega)$ (при $\mu = \cos \theta > 0$) и назад $I^-(x, K, \Omega)$ (при $-\mu = \cos \theta < 0$), интегральные граничные условия (5), (6) определяют характер распространения влияющих друг на друга дифференциальных и интегральных потоков фотонов по толщине слоя и через его границы. Если излучением фотонов в слое можно пренебречь, то формально интегро-дифференциальное уравнение (4) значительно упрощается и становится обыкновенным однородным дифференциальным уравнением первого порядка для плотности дифференциальных потоков фотонов $I^+(x, K, \Omega)$ и $I^-(x, K, \Omega)$.

Для указанного случая решение, позволяющее учесть лишь рассеяние потоков фотонов на границах слоя (5), (6), было найдено ранее [17]. Также было получено согласованное решение о распространении дифференциальных потоков фотонов (рассеянного света) в дву- и трехслойной твердотельных структурах (без собственного излучения в толще слоев и на границах), имеющих плоскопараллельное строение.

Математическая постановка рассматриваемой краевой дифференциально-интегральной задачи во многом совпадает с постановкой задачи о распространении дифференциальных потоков носителей заряда в тонком плоскопараллельном слое. В силу этого решения данных задач имеют много общего. Результаты и выводы, полученные после анализа найденных решений, также во многом совпадают с результатами и выводами общего характера, приведенными для описания распространения потоков носителей заряда в тонких плоскопараллельных слоях твердотельной структуры. В частности, нелинейный характер зависимости дифференциальных и интегральных потоков фотонов от вероятностей рассеяния потоков света на границах слоя и значительно нелинейная зависимость указанных потоков от оптической толщины $\alpha_k d$ слоя имеют место и при распространении потоков фотонов в оптически тонком слое. Наличие внешних к рассматриваемому слою потоков $I^+(a, K, \Omega)$ и $I^-(b, K, \Omega)$, проникающих в слой через соответствующие границы, влияет на распространение потоков $I^+(x, K, \Omega)$ и $I^-(x, K, \Omega)$ в данном слое, а также в соседних слоях. Глубина проникновения потока в слой, когда о ней можно говорить, определяется в основном оптическими свойствами материала слоя.

Способы описания того, как распространяются потоки фотонов в твердом теле (в основном без учета взаимного влияния потоков квазичастиц разных видов), обобщенно рассмотрены в [5]. В применении к плоскопараллельному слою кинетическое уравнение для неравновесных фотонов $N(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ в приближении времени релаксации, сведен-

ное к уравнениям распространения дифференциальных потоков фононов $f^+(x, k, \Omega)$ и $f^-(x, k, \Omega)$ с волновым вектором \mathbf{k} при наличии источников фононов в толще слоя, и граничные условия к нему, учитывающие рассеяние этих и внешних к рассматриваемому слою потоков на границах, образуют краевую дифференциально-интегральную задачу, аналогичную задаче о распространении потоков фотонов (4)–(6).

Все или часть вошедших в рассматриваемый слой дифференциальных потоков $f_a^+(k, \Omega)$ и (или) $f_b^-(k, \Omega)$ могут отсутствовать, например на поверхности, если отсутствуют условия для их распространения в соседней среде, в частности в вакууме. Однако указанные потоки фононов могут порождаться внешними дифференциальными потоками других частиц, в том числе потоками молекул или атомов, падающими на поверхность слоя.

Поскольку в твердом теле реально распространяются фононы разных типов и поляризаций (акустические и оптические), которые рассеиваются по-особому как на границе, так и в толще слоя, то для фононов каждого типа необходимо решать аналогичные задачи. Если взаимовлияние этих потоков на их распространение заметно, то необходимо решать задачу о совместном распространении дифференциальных потоков фононов разных типов и потоков квазичастиц другого вида.

Граничные условия общего вида для рассеяния дифференциальных потоков фононов на границах слоев твердотельной структуры позволяют определить решение, согласованное по всем слоям структуры. Отметим, что фононы не могут распространяться через поверхность слоя или структуры. Однако перенос энергии в среду, окружающую слой или структуру, осуществляться может, в частности за счет передачи энергии потокам молекул и атомов, падающих на указанные поверхности. Ясно, что процесс передачи энергии от потоков молекул или атомов среды потокам фононов на поверхности также имеет место и зависит не только от характеристик падающих потоков, но и от строения и состояния границы.

В силу очевидной аналогии в постановке дифференциально-интегральных краевых задач о распространении дифференциальных потоков носителей заряда, фотонов и фононов в тонком плоскопараллельном слое общие выводы о распространении фононов во многом совпадут с результатами и выводами общего характера, полученными ранее при исследовании распространения потоков носителей заряда. В частности, выводы о нелинейной зависимости дифференциальных и интегральных потоков фононов, направленных к обеим границам слоя, от вероятностей их рассеяния на границах, а также о существенной зависимости этих решений от отношения толщины слоя d к характеристической длине свободного пробега фононов

$\lambda_f(k)$ справедливы также для тонкого слоя. Чем меньше безразмерный параметр толщины слоя, тем сильнее проявляется суперлинейная зависимость всех дифференциальных и интегральных потоков фононов в данном слое и выходящих из него слоях. При этом обмен дифференциальными потоками с соседними слоями оказывает более существенное влияние на рассматриваемый тонкий слой.

Наличие источников излучения фононов в толще слоя или на его границах может влиять на распространение фононов и потоков других квазичастиц в рассматриваемом слое и соседних с ним слоях.

Определение «тонкий плоскопараллельный слой» (имеется в виду толщина слоя) в теории распространения фононов и потоков фотонов и в теории распространения носителей заряда трактуется по-разному. Этот вывод общего характера представляется весьма актуальным и имеет не только научный, но и большой практический интерес.

Возможно более детальное, а также менее детальное, но более подробное описание распространения потоков носителей заряда, фотонов, фононов и других квазичастиц, нежели обычное феноменологическое описание. Вместе с тем существует более или менее подробное описание распространения потоков энергии. Следует заметить, что более точный учет влияния рассеяния потоков в рамках как квантовомеханической, так и кинетической теории требует адекватной спецификации вероятностей их рассеяния. В частности, для потоков фотонов следует различать рассеяние параллельной и перпендикулярной относительно вектора напряженности электрического поля составляющей потока. Классификация потоков фононов еще более детальная: существуют продольные и поперечные колебания (фононы акустических и оптических ветвей). При этом следует также различать рассеяние параллельной и перпендикулярной составляющих каждого из этих потоков, учитывать возможное изменение области интегрирования при малых значениях толщины слоя (квантовые разменные эффекты). Такая постановка задачи является труднообозримой, хотя и более адекватной.

Конкретный характер энергетической зонной диаграммы рассматриваемого твердотельного материала может внести заметные коррективы в оценку роли того или иного механизма рассеяния, характеристик вероятностей рассеяния и возможности образования дифференциальных потоков квазичастиц других видов как в толще слоя, так и на его границах. Физическая картина в слое структуры зависит от спектрального диапазона падающих и входящих в слой дифференциальных потоков носителей заряда, фотонов, фононов и других квазичастиц. Не все из них распространяются в слое баллистически или квазibalлистически, когда начинает проявляться классический размерный эффект.

В силу сложности такого теоретического описания, видимо, иногда целесообразно использовать менее детальное описание [17, 18]. Оно связано с распространением интегральных потоков Q квазичастиц разного вида (1) с учетом их взаимодействия как в толще слоя, так и на его границах. Рис. 3 соответствует взаимодействию интегральных потоков носителей заряда и фононов (суммарно всех типов) на некоторой границе.

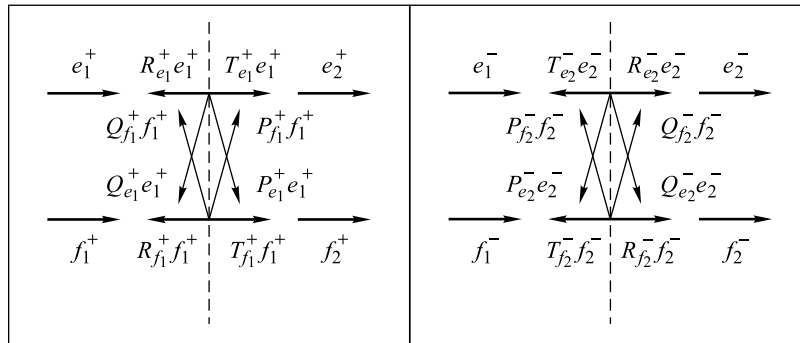


Рис. 3. Взаимное влияние интегральных потоков на границе

Необходимо отметить, что не все падающие на границу носители заряда и фононы могут пересечь границу: часть из них отразится, часть может преобразоваться или исчезнуть, породив поток другого вида. Например, поток фононов не может пересечь поверхность, но некоторая часть падающего потока фотонов может выйти за пределы слоя. Такое описание распространения потоков квазичастиц и энергии в твердотельных материалах и слоях хотя и не самое детальное, однако более точное, чем обычное феноменологическое описание.

Очевидно, физическая картина интегральных потоков в элементарном слое толщи с элементарной площадкой $d\sigma$ круглой формы (в элементарном плоском цилиндре) в общем виде аналогична картине на границе. Взаимодействующие потоки распространяются в обе стороны от рассматриваемого почти плоского элементарного цилиндра и влияют на взаимное распространение потоков в целом. В этом случае задача оказывается одномерной, что упрощает интерпретацию результатов.

Результаты настоящей работы и выводы сводятся к следующему. Для изучения распространения дифференциальных и интегральных потоков энергии в слоях твердотельной структуры необходимо исследовать совместное распространение как дифференциальных, так и интегральных потоков носителей заряда, фотонов, фононов и других квазичастиц. В частности, такая постановка задачи важна при разработке структуры эффективного солнечного элемента или фотодетектора, особенно каскадного или многослойного. В случае много-

слоистой структуры в силу различия свойств слоев закономерности распространения возбуждения в слоях могут значительно различаться и по-разному порождать в слоях потоки носителей заряда, фононов и других квазичастиц, которые по-своему рассеиваются на границах. При этом доли переноса энергии потоками различных квазичастиц будут изменяться по толщине каждого слоя и от одного слоя к другому. Это может привести к различному тепловому нагреву слоев, что, в частности, негативно скажется на эффективности фотоэлектрического преобразования, особенно при концентрированном облучении.

Если взаимодействие дифференциальных потоков квазичастиц разного вида как в толще, так и на границах слоя незначительное, то общая задача распадается на отдельные задачи распространения потоков квазичастиц разных видов. Для этого случая получены новые результаты и выводы общего характера. Рассмотренные закономерности распространения дифференциальных потоков квазичастиц разных видов в большинстве случаев позволяют достаточно просто определить микроскопический перенос энергии дифференциальными потоками носителей заряда, фотонов или фононов по отдельности.

Учет межвидового взаимодействия дифференциальных потоков только на границах слоя усложняет задачу. Еще более сложной задача оказывается при наличии межвидового взаимодействия потоков и в толще, и на границах слоя. При этом согласование решений общей задачи распространения потоков в двуслойной или многослойной структуре является отдельной самостоятельной задачей. Поскольку потоки разных квазичастиц рассеиваются в толще и на границах слоев по-разному, при выделении главных потоков, ответственных за перенос энергии в структуре, это необходимо учитывать. Распространение потоков энергии в тонком слое (при квазибаллистическом и баллистическом режимах распространения потоков) во многом обусловлено соответствующими зависимостями вероятностей рассеяния потоков квазичастиц разных видов именно на границах слоя; эти зависимости определяются субмикронным строением и состоянием границ слоя.

Адекватные граничные условия совместного распространения указанных дифференциальных потоков на границах слоя позволяют корректно описать их распространение в обоих направлениях через каждую из границ в толще слоя и в структуре. Однако полное адекватное описание и исследование совместного распространения дифференциальных потоков носителей заряда, фотонов и фононов с взаимодействием и на границе, и в толще слоя в настоящее время является актуальной проблемой физики твердого тела, хотя начало решению этой проблемы положено.

Более детальные выводы о распространении потоков в слоях могут быть получены при конкретизации всех перечисленных выше за-

дач. В частности, необходимо задать зависимости вероятностей рассеяния потоков на границах, конкретизировать зависимости времени релаксации и длины свободного пробега от квазиимпульса и координаты, а также определить координатную и квазиимпульсную зависимости плотности генерации потоков всех главных квазичастиц в толще слоя. Если рассматривается твердотельная структура, то указанные зависимости должны быть определены для каждого ее слоя. Поскольку в многослойной структуре оптические, электронные и фононные свойства слоев могут сильно различаться и зависеть от температуры, задача о совместном распространении потоков по толщине структуры в целом становится комплексной проблемой.

Корректное решение этой проблемы применительно к плоскопараллельной твердотельной структуре позволит найти закономерности распространения интегральных потоков квазичастиц и энергии как в равновесии, так и при его нарушении, а также получить характеристики структуры в целом. Результаты исследований имеют перспективу быть использованными также при моделировании технологических, в том числе нанотехнологических, процессов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Босворт Р.Ч.Л. *Процессы теплового переноса*. Москва, ГИТТЛ, 1957, с. 29.
- [2] Займан Дж. *Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах*. Москва, Изд-во Иностранная литература, 1962, 488 с.
- [3] Берман Р. *Теплопроводность твердых тел*. Москва, Мир, 288 с. Гл. 4. Фононы и уравнение Больцмана, с. 31–48.
- [4] Аскеров Б.М. *Электронные явления переноса в полупроводниках*. Москва, Наука, 1985, 320 с.
- [5] Рейсленд Дж. *Физика фононов*. Москва, Мир, 1975, 366 с.
- [6] Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*. Москва, Наука, 1984, 510 с.
- [7] Ridley В.К. *Electrons and phonons in semiconductor multilayers*. Cambridge University Press, 2009, 410 p.
- [8] Лесовик Г.Б., Садовский И.А. Описание квантового электронного транспорта с помощью матриц рассеяния. *УФН*, 2011, т. 181, № 10, с. 1041–1096.
- [9] Керими М.Б. Интегральные граничные условия для потоков носителей заряда в тонком плоскопараллельном слое. *Физические основы приборостроения*, 2015, т. 4, № 3, с. 46–57.
- [10] Kerimi М.В. The solution of the kinetic equation with integrated boundary conditions for a plane-parallel layer of solid-state structure. *European Science and Technology. Materials of 7th International scientific conference*. Munich, April 23–24, 2014, vol. II, p. 473–482.
- [11] Kerimi М.В. Charge carriers flux losses at boundary of two-layer structure. *The Development of Science in the 21st Century: Natural and Technical Sciences. The collection of Scientific Papers*, Ron Bee & Associates, New York, 2015, pp. 68–76. DOI: 10.17809/06(2015)-09. URL: http://archiv.gpscience.org/wp-content/uploads/2015/05/0415_ny68-76.pdf
- [12] Керими М.Б. Распространение потока носителей заряда через границу. *X Белорусско-Российский семинар «Полупроводниковые лазеры и системы»*. Сб. ст. Минск, Беларусь, 26–29 мая 2015 г., с. 165–169.

- [13] Керими М.Б. Распространение потока носителей заряда в тонком слое плоскопараллельной твердотельной структуры с учетом рассеяния на границах слоя. *ФТП*, 2017, т. 51, вып. 8, с. 1096–1104.
- [14] Kerimi M.B. On the Propagation of a Flux of Charge Carriers in the Thin Layer of a Plane-Parallel Solid-State Structure with Scattering at the Boundaries of the Layer Taken into Account. ISSN 1063-7826, *Semiconductors*, 2017, vol. 51 (8), pp. 1052–1061.
- [15] Соболев В.В. *Перенос лучистой энергии в атмосферах звезд и планет*. Москва, ГИТТЛ, 1956, с. 28.
- [16] Керими М.Б. Оптические и фотоэлектрические явления в полупроводниковых микро- и наноструктурах. *Материалы II Междунар. конф. «Оптические и фотоэлектрические явления в полупроводниковых микро- и наноструктурах» (Республика Узбекистан, Фергана, 2011)*, с. 218–221.
- [17] Керими М.Б., Сидняев Н.И. Распространение тепла в тонком плоскопараллельном слое. *Междунар. туркмено-турецкая науч.-практ. конф.* Ашхабад, 2013.
- [18] Керими М.Б. Дифференциальные потоки энергии в твердом теле. *Тез. докл. Междунар. науч. конф. FARM–2017. Москва, 27–29 октября 2017 г.* Москва, 2017, с. 187–189.

Статья поступила в редакцию 12.01.2018

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Керими М.Б. Дифференциальные потоки энергии в слое твердотельной структуры. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2018, вып. 3.
<http://dx.doi.org/10.18698/2308-6033-2018-3-1744>

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на Международной конференции «Фундаментальные и прикладные задачи механики FARM–2017», посвященной 170-летию со дня рождения великого русского ученого Николая Егоровича Жуковского, Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 24–27 октября 2017 г.

Керими Мухамед Бегенчевич — канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Центра технологий Академии наук Туркменистана. Область научных интересов: физика полупроводников и твердотельных структур, оптоэлектроника.
e-mail: mb8krmi@gmail.com

Differential energy fluxes in a layer of solid structure

© M.B. Kerimi

Technology Center of the Academy of Sciences of Turkmenistan,
Ashgabat, 744032, Turkmenistan

In the layer of a solid structure with a plane-parallel structure, the propagation of energy fluxes in equilibrium and at its violation is realized by differential fluxes of charge carriers, photons, phonons and quasiparticles of other species. The joint propagation of these fluxes corresponds to specific regularities due to the mechanisms of their scattering. In the equations of flux propagation and their boundary conditions, it is necessary to take into account the consequences of scattering and the role of the generated fluxes. Taking into account the scattering of fluxes not only in the thickness of the layer, but also on its boundaries, especially in thin layers, significantly increases the understanding of how the fluxes of quasiparticles, differential and integral energy fluxes propagate. In the approximation of the relaxation time, the boundary value problems on the propagation of differential fluxes of quasiparticles with allowance for the scattering of fluxes at the boundaries of the layer have the same form. Hence, the general conclusions obtained earlier for the charge carrier fluxes are also valid for the fluxes of photons and phonons. In particular, the fluxes superlinearly depend on the probabilities of their scattering at the boundaries of a thin layer, and also on the ratio of the thickness of the layer to the free path characteristic length. Fluxes emerging from the layer have the same dependence on the indicated characteristics of the boundaries and the dimensionless parameter of the thickness of the layer. The smaller the layer thickness parameter, the stronger is the superlinear dependence of all differential and integral fluxes. In this case, due to the exchange of differential fluxes, the effect of neighboring layers on the considered layer is more significant.

Keywords: charge carriers, photons, phonons, differential fluxes, integral fluxes, energy transfer

REFERENCES

- [1] Bosworth R.C.L. *Heat Transfer Phenomena. The Flow of Heat in Physical Systems*. Assoc. Gen. Publ. PTY. Ltd., Sydney, John Wiley & Sons Inc., New York, 1952. [In Russ.: Bosworth R.C.L. Protsessy teplovogo perenosa. Moscow, GITTL Publ., 1957, p. 29].
- [2] Ziman J.M. *Electrons and Phonons. The Theory of Transport Phenomena in Solids*. Oxford at the Clarendon Press, 1960. [In Russ.: Ziman J.M. Elektrony i fonony. Teoriya yavleniy perenosa v tverdykh telakh. Moscow, IL Publ., 1962, 488 p.].
- [3] Berman R. *Thermal Conduction in Solids*. The Clarendon Press, Oxford, 1976. [In Russ.: Teploprovodnost tverdykh tel. Moscow, Mir Publ., 288 p.].
- [4] Askerov B.M. *Elektronnyye yavleniya perenosa v poluprovodnikakh* [Electronic transport phenomena in semiconductors]. Moscow, Nauka Publ., 1985, 320 p.
- [5] Reissland J.A. *The Physics of Phonons*. John Wiley & Sons Ltd., London-New York-Sydney-Toronto, 1973 [In Russ.: Reissland J.A. Fizika fononov. Moscow, Mir Publ., 1975, 366 p.].
- [6] Gantmakher V.F., Levinson I.B. *Rasseyaniye nositeley toka v metallakh i poluprovodnikakh* [Scattering of current carriers in metals and semiconductors]. Moscow, Nauka Publ., 1984, 510 p.
- [7] Ridley B.K. *Electrons and phonons in semiconductor multilayers*. Cambridge University Press, 2009, 410 p.

- [8] Lesovik G.B., Sadovskiy I.A. *Uspekhi fizicheskikh nauk — Physics-Uspekhi (Advances in Physical Sciences)*, 2011, vol. 181, no. 10, pp. 1041–1096.
- [9] Kerimi M.B. *Fizicheskie osnovy priborostroeniya — Physical Bases of Instrumentation*, 2015, vol. 4, no. 3, pp. 46–57.
- [10] Kerimi M.B. The solution of the kinetic equation with integrated boundary conditions for a plane-parallel layer of solid-state structure. *European Science and Technology. Materials of 7th International scientific conference*. Munich, April 23–24, 2014, vol. II, p. 473–482.
- [11] Kerimi M.B. Charge carriers flux losses at boundary of two-layer structure. *The Development of Science in the 21st Century: Natural and Technical Sciences. The collection of Scientific Papers*. Ron Bee & Associates, New York, 2015, pp. 68–76. DOI: 10.17809/06(2015)-09. Available at: http://archiv.gpscience.org/wp-content/uploads/2015/05/0415_ny68-76.pdf
- [12] Kerimi M.B. Rasprostranenie potoka nositeley zaryada cherez granitsu [Propagation of the carrier flux through the boundary]. *Poluprovodnikovye lazery i sistemy. Sb. st. X Belorussko-Rossiyskogo seminara. 26–29 maya 2015 g.* [Semiconductor lasers and systems. Coll. art. X Belarusian-Russian seminar. May 26–29]. Minsk, Belarus, pp. 165–169.
- [13] Kerimi M.B. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov — Semiconductors*, 2017, vol. 51, no. 8, pp. 1096–1104.
- [14] Kerimi M.B. On the Propagation of a Flux of Charge Carriers in the Thin Layer of a Plane-Parallel Solid-State Structure with Scattering at the Boundaries of the Layer Taken into Account. *Semiconductors*, 2017, vol. 51 (8), pp. 1052–1061.
- [15] Sobolev V.V. *Perenos luchistoy energii v atmosferakh zvezd i planet* [The transfer of radiant energy in the atmospheres of stars and planets]. Moscow, GITTL Publ., 1956, p. 28.
- [16] Kerimi M.B. Opticheskie i fotoelektricheskie yavleniya v poluprovodnikovykh mikro- i nanostrukturakh [Optical and photoelectric phenomena in semiconductor micro- and nanostructures]. *Materialy II Mezhdunar. konf. "Opticheskiye i fotoelektricheskiye yavleniya v poluprovodnikovykh mikro- i nanostrukturakh" (Respublika Uzbekistan, Fergana)* [Materials II Intern. Conf. "Optical and photoelectric phenomena in semiconductor micro- and nanostructures" (Republic of Uzbekistan, Fergana)], 2011, pp. 218–221.
- [17] Kerimi M.B., Sidnyaev N.I. Rasprostranenie tepla v tonkom ploskoparallelnom sloe [Heat propagation in a thin plane-parallel layer]. *Mezhunarodnaya turkmeno-turetskaya nauchno-prakticheskaya konferentsiya* [The international Turkmen-Turkish scientific and practical conference]. Ashkhabad, 2013.
- [18] Kerimi M.B. Differentsialnye potoki energii v tverdom tele [Differential energy fluxes in a solid]. *Tez. dokl. Mezhdunar. nauch. konf. FARM–2017* [FARM-2017 Intern. Sc. Conf. abstr.]. Moscow, October 27–29, 2017. Moscow, 2017, pp. 187–189.

Kerimi M.B., Cand. Sc. (Phys.-Math.), Leading Research Fellow, Technology Center of the Academy of Sciences of Turkmenistan. Research interests: physics of semiconductors and solid-state structures, optoelectronics. e-mail: mb8krmi@gmail.com