

## Влияние локальных тепловых колебаний на генерацию хемоэлектронов в гетероструктурах

Т.Т. Муратов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ташкентский государственный педагогический университет, г. Ташкент, Республика Узбекистан

Теоретически исследовано влияние локальных тепловых колебаний кристалла, инициированных воздействием энергии химической реакции адсорбции атомов водорода на поверхности «катализатора», на темп генерации высокоэнергетических электронов. Получены формулы для КПД хемогенератора, уточняющие соответствующие формулы из других работ. Указывается на существенную роль термостимулированных переходов электронов в зону проводимости полупроводника при высоких температурах.

**Ключевые слова:** поверхность катализатора, аккомодация, фононный канал, энергия Франка – Кондона, барьер Шоттки, КПД хемогенератора.

### Введение

Прямое преобразование химической энергии в электрическую может быть реализовано в хемогенераторах электрического тока [1], которые представляют собой полупроводниковые гетероструктуры с различными электронными параметрами. Перспективными материалами считаются полупроводники, поверхность которых обладает выраженными каталитическими свойствами. Каталитические свойства поверхности во многом обусловлены дефектами (мелкими и глубокими примесными центрами), расположенными на поверхности полупроводника и играющими роль «ловушек» для атомов и молекул газовой среды. Поверхность, выступая в качестве катализатора (К) образования (распада) молекул водорода, эффективно «приучает» его атомы, тем самым способствуя снижению энергетического барьера (энергии активации), по сравнению с газовой фазой. Энергия экзотермической гетерогенной реакции:  $H + K \rightarrow HK$ ,  $HK + H \rightarrow H_2 + K$  идет на возбуждение (образование) высокоэнергетических электронов, которые под действием электрического поля двойного слоя легко преодолевают потенциальный барьер на гетерогранице [1]. Аккомодация энергии химической реакции может идти по двум конкурирующим каналам: электронному и фононному. Через первый канал передача энергии экзотермической реакции носит ударный характер и непосредственно передается связанному электрону, генерируя тем самым высокоэнергетический электрон; при втором канале избыток энергии химической реакции расходуется на возбуждение высокоэнергетических фононов, которые энергично взаимодействуют с валентными электронами, раскачивая их в такт тепловым колебаниям кристаллической решетки. Адсорбированные молекулы  $H_2$  совершают колебания с частотами, существенно превышающими дебаевские частоты кристалла. Поэтому распад локальных колебаний молекул водорода на фононы затруднен и электронная аккомодация может доминировать над фононной [2]. Однако при высоких температурах, близких к критической, например, при температуре плавления, тепловые флуктуации резко возрастают [3], и возможен термостимулированный выброс валентного электрона в зону проводимости. В этой ситуации фононный канал аккомодации энергии может дать сопоставимый с электронным вклад. Термостимулированный выброс электрона возможен и при более низкой температуре из-за электрон-фононного взаимодействия [4]. В полупроводниках с сильной электрон-фононной связью следует учесть оба канала аккомодации химической энергии.

Цель данной работы – вывод теоретической формулы для КПД хемогенератора с учетом термостимулированного выброса электронов в зону проводимости с последующим анализом частных случаев [1, 5]. Вывод формулы основан на допущении о том, что для генерации хемоэлектронов внешний (оптический) электрон атома должен быть предварительно «раскачен» высокоэнергетическими фононами для разрыва связи с соседними атомами, ибо каждый внешний электрон образует парную химическую связь между ними. В этом смысле, в отличие от [1],  $\Theta_{\text{хар}}$  – некоторая часть тепловой энергии  $Q$  химической реакции  $H + H \rightarrow H_2 + Q\uparrow$ , которая идет на «раскачивание» валентного электрона, остальная часть – на его прямое (ударное) возбуждение.