

УДК 534.28 : 621.315.592

## АКУСТОЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ СО СЛОЖНОЙ СТРУКТУРОЙ ЗОН

*Н. С. Аверкиев, Ю. В. Илсавский, Е. В. Осипов,  
В. М. Стернин*

Построена теория поглощения звука свободными носителями заряда в полупроводниках со структурой валентной зоны типа Ge и Si. Выполнены систематические измерения коэффициента поглощения звука в кремнии *p*-типа в широком диапазоне концентраций и температур. Проанализированы различные механизмы упругого рассеяния дырок и показано, что в условиях эксперимента наиболее эффективным механизмом релаксации, вызывающим поглощение акустической волны, является рассеяние на заряженных примесях. В рамках предложенной теории вычислена подвижность дырок. Сделан вывод, что в рассмотренных кинетических процессах основную роль играет внутризонное рассеяние носителей заряда. Продемонстрировано хорошее согласие между теоретической и экспериментальной концентрационными зависимостями коэффициента поглощения звука при различных температурах.

Физические процессы в твердом теле можно рассматривать как взаимодействие тех или иных видов элементарных возбуждений. Основные из этих возбуждений — электроны и фононы, поэтому большой физический интерес представляет изучение акустоэлектронного взаимодействия. Природа взаимодействия звуковой волны с носителями заряда зависит от свойств кристалла. Наиболее общим является взаимодействие через деформационный потенциал. Несмотря на то что этот механизм присущ всем кристаллам, до настоящего времени он исследован недостаточно.

Особый интерес представляет деформационное взаимодействие в полупроводниках. Уже первые исследования [1, 2] показали, что акустоэлектронные явления в этом случае определяются тонкими особенностями кинетических свойств носителей вблизи края зон.

Для многодолинной зоны это взаимодействие представляет собой процесс перераспределения носителей между долинами в поле звуковой волны, и результат его может быть описан простой релаксационной формулой. Теоретическое рассмотрение подобных эффектов в вырожденной валентной зоне (типа валентной зоны кремния) значительно сложнее, чем в многодолинной. Это связано с тем, что здесь, вообще говоря, необходимо учитывать взаимосвязанные вклады всех трех подзон, энергетические спектры которых (зоны легких и тяжелых дырок) непараболические и анизотропные. Возможное перераспределение между различными типами дырок еще более усложняет анализ релаксационных процессов в такой зоне.

Отсутствие строгой теории (попытки использования упрощенных моделей [3, 4] не привели к успеху) тормозило дальнейшие экспериментальные исследования в этой области. Настоящая работа восполняет этот пробел. Теоретически рассмотрено взаимодействие звуковой волны через деформационный потенциал со свободными носителями в случае вырожденной валентной зоны и вычислен коэффициент поглощения звука дырками. В качестве объекта экспериментальных исследований выбран кремний, где в процессах релаксации участвуют дырки всех трех подзон.

# 1. Теория

Как известно [5], описание кинетических явлений в вырожденных зонах в случае, когда имеются зоны легких и тяжелых дырок, представляет собой сложную задачу. В работе [6] было указано, что уравнение для функции распределения в этом случае можно составить, вообще говоря, только в борновском приближении. Ситуация, с которой приходится сталкиваться при теоретическом вычислении коэффициента поглощения звука, однако, упрощается из-за того, что во всем интервале температур и концентраций примесей имеются малые параметры

$$ql \ll 1, \quad qr_s \ll 1, \quad \omega\tau_M \ll 1, \quad (1)$$

где  $r_s$  — радиус экранирования,  $\omega = 2\pi f$  — круговая частота звуковой волны,  $\tau_M$  — время максвелловской релаксации. Первое неравенство означает, что длина волны звука  $2\pi/q$  превосходит длину свободного пробега носителей заряда  $l$ , а два следующих неравенства в (1) показывают, что изменение плотности заряда, обусловленное акустической волной, полностью экранировано и имеет место нейтральность в каждой точке кристалла.

Кинетическое уравнение для функции распределения дырок  $f_i$  в  $i$ -й зоне имеет вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{V}_i \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial E_i(\mathbf{p}, \hat{\varepsilon})}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f_i}{\hbar \partial \mathbf{p}} = I_{\text{ст}}^i(f_1, f_2, f_3). \quad (2)$$

Здесь  $E_i(\mathbf{p}, \hat{\varepsilon})$  — энергия дырки в  $i$ -й зоне в присутствии деформации, описываемой тензором  $\hat{\varepsilon}$ ;  $\mathbf{V}_i = \partial E_i(\mathbf{p}, \hat{\varepsilon}) / \hbar \partial \mathbf{p}$ . Интеграл столкновений в (2) обращается в нуль равновесной функцией распределения  $f_i = f_{i0}(E_i(\mathbf{p}, \hat{\varepsilon}))$ .

Если искать решение системы (2) в виде  $f_i = f_{i0} + f'_i$ , где  $f'_i \ll f_{i0}$ , то уравнения для неравновесных  $f'_i$  в первом порядке по  $\hat{\varepsilon}$  примут вид

$$\frac{\partial f'_i}{\partial t} + \frac{\partial f_{i0}}{\partial E} E_i(\mathbf{p}, \hat{\varepsilon}) + \mathbf{V}_{i0} \frac{\partial f'_i}{\partial \mathbf{r}} = I_{\text{ст}}^i(f_1, f_2, f_3), \quad (3)$$

где  $\mathbf{V}_{i0} = \partial E_{i0}(\mathbf{p}) / \hbar \partial \mathbf{p}$ ;  $E_{i0}$  — спектр дырок в  $i$ -й зоне при  $\hat{\varepsilon} = 0$ . Систему (3) для  $f'_i$  следует дополнить уравнением электронейтральности

$$\sum_{i, \mathbf{p}} (f'_i + f_{i0}(E_i)) = \sum_{i, \mathbf{p}} f_{i0}(E_{i0}), \quad (3a)$$

которое необходимо для определения квазиэлектростатического потенциала  $\Phi$ , обусловленного переменной во времени звуковой волной. Дальнейшие упрощения связаны с тем, что кроме (1) имеется еще малый параметр  $\omega\tau \ll 1$ , где  $\tau$  — время релаксации, определяющее поглощение звука. Для оценок можно считать, что  $I_{\text{ст}}^i \sim -f'_i/\tau$ , поэтому в (3) члены  $\partial f'_i/\partial t$  и  $\mathbf{V}_{i0}(\partial f'_i/\partial \mathbf{r})$ , пропорциональные  $\omega\tau$  и  $ql$ , можно отбросить. Кроме того, поскольку в первом порядке по деформации  $\varepsilon$  концентрации дырок в зонах не изменяются (см. ниже), из (3a) следует, что вклад в коэффициент поглощения ультразвука, связанный с  $\Phi$  в линейном приближении по  $\omega\tau$ , отсутствует и поэтому ниже положено  $\Phi = 0$ .

После этих упрощений система кинетических уравнений для зон тяжелых ( $i=1$ ), легких ( $i=2$ ) и дырок спин-отщепленной зоны ( $i=3$ ) при периодическом изменении  $\varepsilon_{ij}$  во времени ( $\varepsilon_{ij}(t) \sim \varepsilon_{ij}^{(0)} \exp(-i\omega t)$ ) примет вид

$$I_{\text{ст}}^i(f_1, f_2, f_3) = (-\partial f_{i0}/\partial E) \delta E_i(\mathbf{p}, \hat{\varepsilon}) i\omega, \quad (4)$$

$\delta E_i(\mathbf{p}, \hat{\varepsilon})$  — поправка первого порядка по деформации к энергии дырки в  $i$ -й зоне.

Система (4) весьма сложна, поскольку  $I_{\text{ст}}^i$  включают в себя процессы рассеяния как внутри зон, так и между зонами. В принципе  $I_{\text{ст}}^i$  содержат также часть, связанную с энергетической релаксацией дырок. Энергетическая релаксация дырок при низких температурах (ниже дебаевской)

связана с испусканием акустических фононов. Отношение времени энергетической релаксации  $\tau_E$  к времени релаксации по импульсу при рассеянии на акустических фононах  $\tau_p^\Phi$  порядка  $m^*v_S^2/E_0$ , где  $v_S$ ,  $m^*$ ,  $E_0$  — средние значения скорости звука, эффективной массы носителей и их характерной энергии. Величина  $E_0$  равна либо энергии Ферми  $E_F$ , либо  $kT$ ; в обоих случаях в рассматриваемой ситуации  $\tau_E/\tau_p^\Phi \sim 10^2$ . Конечная величина  $\omega\tau_E$  ограничивает применимость линейного приближения для функции распределения, а именно  $\Lambda\varepsilon\sqrt{\tau_E\tau} \ll E_0$ . При максимальных деформациях  $\Lambda\varepsilon \sim 10^{-3}$  эВ ( $\Lambda$  — константа деформационного потенциала) этот критерий выполняется и релаксация неравновесных  $f'_i$  будет определяться самыми быстрыми из упругих процессов.

Уравнения (4) для определения неравновесных добавок к функции распределения в присутствии звуковой волны подобны системе кинетических уравнений в присутствии постоянного электрического поля  $\mathcal{E}$ . В этом случае множитель  $\delta E_i(\mathbf{p}, \varepsilon) i\omega$  заменяется на  $e(\mathbf{V}, \mathcal{E})$ .

Для решения системы (4) необходимо определить интеграл столкновений. Существует несколько механизмов упругого рассеяния в полупроводниках: рассеяние на нейтральных и заряженных примесях и на акустических фононах. Ниже будут подробно рассмотрены последние два случая для *p*-Si и показано, что в условиях проведенных экспериментов рассеяние на нейтральных примесях незначительно.

Если интеграл столкновений содержит только упругие процессы, то уравнения (4) могут быть решены точно. Для этого разложим функции  $f'_i$  в ряд по сферическим функциям  $Y_{l,m}$  ( $l=0, 1, 2, \dots$ ),  $|m| \leq l$

$$f'_i(\mathbf{p}) = \sum_{l,m} A_{l,m}^i(E) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \quad (5)$$

где коэффициенты  $A_{l,m}^i$  зависят только от энергии;  $\vartheta, \varphi$  — полярные угловые координаты вектора  $\mathbf{p}$ . Оператор  $I_{от}^i$  имеет вид

$$I_{от}^i(f_1, f_2, f_3) = - \sum_{j, \mathbf{p}'} (f'_i(\mathbf{p}) - f'_j(\mathbf{p}')) w_{ij}(\mathbf{p}, \mathbf{p}'). \quad (6)$$

Здесь  $w_{ij}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = w_{ji}(\mathbf{p}', \mathbf{p})$  — вероятность перехода дырки из состояния с квазиимпульсом  $\mathbf{p}$  в подзоне  $i$  в состояние подзоны  $j$  с квазиимпульсом  $\mathbf{p}'$ . В рассматриваемом случае и в «сферическом» приближении (см. ниже)  $w_{ij}$  зависят только от энергии  $E_i(\mathbf{p}) = E_j(\mathbf{p}')$  и угла между  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$ , и в самом общем виде такая функция может быть разложена в ряд по полиномам Лежандра, а при использовании теоремы сложения — и в ряд по сферическим функциям  $Y_{l,m}$

$$\begin{aligned} w_{ij}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= \sum_l w_{ij}^{(l)} P_l(\Theta) \delta(E_i(\mathbf{p}) - E_j(\mathbf{p}')) = \\ &= \delta(E_i(\mathbf{p}) - E_j(\mathbf{p}')) \sum_l w_{ij}^{(l)} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) Y_{l,m}^*(\vartheta', \varphi'). \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь  $\Theta$  — угол между  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$ .

Теперь естественно разложить и правую часть (4) в ряд по  $Y_{l,m}$

$$\frac{\partial f_{i0}}{\partial E} \delta E_i(\mathbf{p}, \varepsilon) i\omega = \frac{\partial f_{i0}}{\partial E} i\omega \sum_{l,m} C_{l,m}^i(\mathbf{p}, \varepsilon) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (8)$$

Подставляя теперь (5) и (7) в (6) и затем (6) и (8) в (4), после умножения на  $Y_{l,m}^*(\vartheta, \varphi)$  и интегрирования по углам  $\vartheta$  и  $\varphi$  получаем алгебраическую систему для  $A_{l,m}^i$

$$\sum_j \tilde{w}_{ij}^{(l)} A_{l,m}^j = -i\omega \frac{\partial f_{i0}}{\partial E} C_{l,m}^i, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \tilde{w}_{ij}^{(l)} = & \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty p'^2 dp' \left[ \frac{4\pi}{2l+1} \delta(E_i(\mathbf{p}) - E_j(\mathbf{p}')) w_{ij}^{(l)} - \right. \\ & \left. - \delta_{ij} \cdot 4\pi \sum_{j'} \delta(E_i(\mathbf{p}) - E_{j'}(\mathbf{p}')) w_{ij}^{(0)}, \right. \end{aligned} \quad (10)$$

где  $V$  — нормированный объем.

Мощность, поглощаемая в единице объема, определяется как

$$P = 2 \sum_i \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \langle \delta E_i \cdot f_i \rangle = \text{Re } i\omega \sum_i \int d^3p (\delta E_i^* \cdot f_i) \frac{1}{(2\pi)^3}, \quad (11)$$

где  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по времени;  $\delta E_i$  — производная по времени от поправки первого порядка по деформации к энергии дырки в  $i$ -й зоне. Используя разложение (5) и (8), получим

$$\begin{aligned} P = & - \frac{\omega}{(2\pi)^3} \int_0^\infty p^2 dp \text{Im} \sum_i \sum_{l,m} C_{i,m}^l A_{i,m}^l = \\ = & \frac{\omega^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty p^2 dp \text{Re} \sum_i \sum_{j,l,m} \frac{\partial f_{i0}}{\partial E} (\tilde{w}_{ij}^{(l)})^{-1} C_{i,m}^{l*} C_{i,m}^l. \end{aligned} \quad (12)$$

Из (12) видно, что поглощаемая мощность определяется произведением коэффициентов  $A_{i,m}^l$  и  $C_{i,m}^l$  с одинаковыми  $l$  и  $m$ . Для дальнейшего

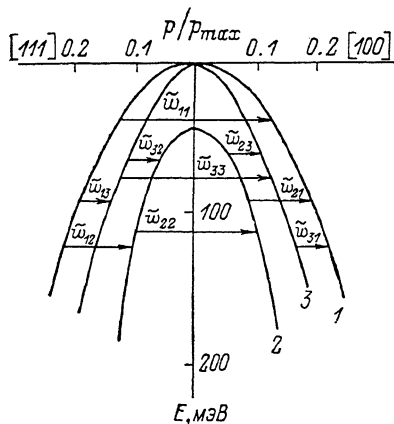


Рис. 1. Энергетический спектр дырок в кремнии в сферическом приближении.

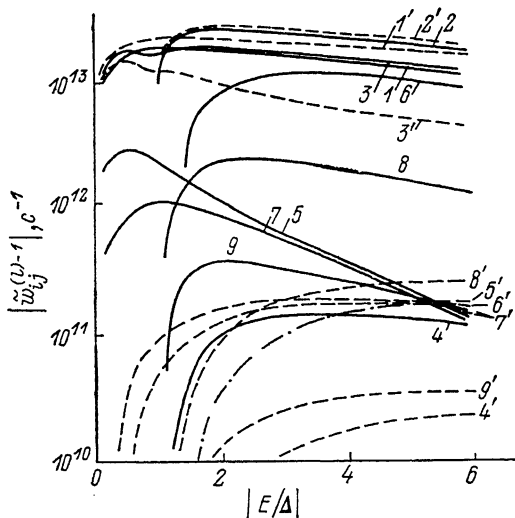


Рис. 2. Энергетические зависимости вероятностей  $\tilde{w}_{ij}^{(l)}$  при рассеянии дырок на заряженных примесях для  $N_a = 6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ,  $r_s = (\kappa kT / 4\pi N_a e^2)^{1/2}$  и указанных в тексте зонных параметрах.

Сплошные линии —  $l=2$ , штриховые — 4. 1 —  $\tilde{w}_{11}$ , 2 —  $\tilde{w}_{22}$ , 3 —  $\tilde{w}_{23}$ , 4 —  $\tilde{w}_{12}$ , 5 —  $\tilde{w}_{31}$ , 6 —  $\tilde{w}_{21}$ , 7 —  $\tilde{w}_{13}$ , 8 —  $\tilde{w}_{23}$ , 9 —  $\tilde{w}_{32}$ .

определения матрицы вероятностей  $\tilde{w}_{ij}^{(l)}$  и коэффициентов  $C_{i,m}^l$  воспользуемся трехзонной моделью в сферическом приближении (рис. 1). Это означает, что рассматриваются три сорта дырок (тяжелые и легкие дырки и дырки спин-отщепленной зоны) и предполагается, что «гофрировка» изоэнергетических поверхностей в подзонах отсутствует, а непараболичность спектра носителей обусловлена смешиванием состояний в подзонах легких дырок и спин-отщепленной. Такое приближение ранее использовалось в [7] для описания влияния дырок на упругие константы  $p$ -Si. В данном случае применение трехзонной модели позволяет аналитически

выполнить угловое интегрирование и получить «незацепляющиеся» уравнения (9) для  $l=2, 4$ .

Выражение для  $\delta E_i$  имеет вид [7, 8]

$$\delta E_i = (\alpha_1 \lambda_i^{(0)} - 2\beta_1/3)/12 (\lambda_i^{(0)2} - \Omega^2 - t^2), \quad (13)$$

где  $t = Bp^2$ ,  $\Omega = \Delta/3$ ,  $B < 0$ ,  $\Delta < 0$ . Величина  $|\Delta|$  представляет собой спин-орбитальное расщепление между зонами с  $i=1, 2$  и  $i=3$  при  $p=0$ . Значения  $\lambda_i^{(0)}$  определяются из решения кубического уравнения  $\lambda_i^{(0)3} - 3\lambda_i^{(0)}(\Omega^2 + t^2) + 2(\Omega^3 + t^3) = 0$

$$\lambda_1^{(0)} = \frac{\Delta}{3} + Bp^2, \quad \lambda_{2,3}^{(0)} = -\frac{\Delta}{6} - \frac{Bp^2}{2} \mp (\Delta^2 + 9B^2p^4 - 2\Delta Bp^2)^{1/2}. \quad (14)$$

Спектр носителей при нулевой деформации вычисляется с использованием  $\lambda_i^{(0)}$

$$E_i = \lambda_i^{(0)} - Ap^2 - \Delta/3. \quad (14a)$$

В (13)–(14a) параметры  $A$  и  $B$  определяют форму зон и при  $\Delta \rightarrow \infty$  могут быть выражены через эффективные массы легких и тяжелых дырок. Выражения для  $\alpha_1$  и  $\beta_1$  получены в [8], их разложение по  $Y_{l,m}$  имеет вид

$$\alpha_1 = 24p^2 \sqrt{\frac{\pi}{5}} \left\{ Bb \left[ -3Y_{2,0} \varepsilon'_{zz} + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) \sqrt{\frac{3}{2}} (Y_{2,-2} + Y_{2,2}) \right] + \right. \\ \left. + Dd \sqrt{\frac{2}{3}} [i\varepsilon_{xy} (Y_{2,2} - Y_{2,-2}) + \varepsilon_{xx} (Y_{2,1} - Y_{2,-1}) - i\varepsilon_{yz} (Y_{2,1} + Y_{2,-1})] \right\},$$

$$\beta_1 = 18p^4 \sqrt{\frac{\pi}{5}} \left\{ -\frac{6}{7} b (D^2 + 4B^2) \varepsilon'_{zz} Y_{2,0} + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{xx}) \frac{3}{7} b \sqrt{\frac{2}{3}} (D^2 + 4B^2) \times \right.$$

$$\times (Y_{2,2} + Y_{2,-2}) + Dd \frac{2\sqrt{2}}{7} (D + 4B\sqrt{3}) [i\varepsilon_{xy} (Y_{2,2} - Y_{2,-2}) + \varepsilon_{xx} (Y_{2,1} - Y_{2,-1}) - \\ - i\varepsilon_{yz} (Y_{2,1} - Y_{2,-1})] + \frac{6}{7} b (B^2 - D^2/3) \left[ \sqrt{5} Y_{4,0} \varepsilon'_{zz} - (Y_{4,2} + Y_{4,-2}) \sqrt{2} (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) + \right. \\ \left. + (Y_{4,4} + Y_{4,-4}) \sqrt{\frac{7}{2}} \varepsilon'_{zz} \right] + Dd (B - D\sqrt{3}) \frac{2}{7} [(Y_{4,1} + \sqrt{7} Y_{4,-3}) (\varepsilon_{xx} - i\varepsilon_{yz}) +$$

$$\left. + (Y_{4,-1} + \sqrt{7} Y_{4,3}) (\varepsilon_{xx} + i\varepsilon_{yz}) + 2\sqrt{2} \varepsilon_{xy} (Y_{4,2} - Y_{4,-2}) \right\}. \quad (15)$$

Здесь  $b, d$  — константы деформационного потенциала;  $\varepsilon_{ij}$  — компоненты тензора деформаций  $\hat{\varepsilon}$ ;  $\varepsilon'_{zz} = \varepsilon_{zz} - \text{Sp } \hat{\varepsilon}/3$ .

Отметим, что вне рамок сферической модели спектр носителей в валентных подзонах при  $\hat{\varepsilon}=0$  зависит от трех параметров  $A, B$  и  $D$  и для вычисления  $E_i(p)$  необходимо решать кубическое уравнение. В используемом нами приближении в выражениях для  $E_i(p)$  (или  $\lambda_i^{(0)}$ ) положено  $B=D/\sqrt{3}$ , а для  $\alpha_1$  и  $\beta_1$  такого упрощения не делается. Можно сказать, что мы учитываем «гофрировку» энергетического спектра в первом порядке по  $(B-D/\sqrt{3})/\bar{B}$ , где  $\bar{B}$  — некоторое среднее значение  $B$  и  $D$ .

Из (13) и (15) видно, что  $\int_{\Omega} d\vartheta \sin \vartheta d\varphi \delta E_i(p, \hat{\varepsilon}) = 0$  и, следовательно,

$$\int_{\Omega} d\vartheta \sin \vartheta d\varphi f'_i(p) = 0, \text{ т. е. в первом порядке по } \hat{\varepsilon} \text{ концентрация дырок}$$

в каждой зоне не меняется [9]. Это свойство является характерным для сложной вырожденной зоны и отличает ее как от многодолинной зоны, так и от простой параболической. В последнем случае звуковая волна изменяет плотность заряда и величина релаксационного поглощения имеет дополнителную малость  $(qr_0)^2$  [10]. В многодолинном случае имеет место электронейтральность в каждой точке кристалла, однако она достигается за счет межминимумных переходов и поглощение акустической волны

обратно пропорционально вероятности переходов. В этом смысле можно сказать, что каждая подзона в сложной валентной зоне аналогична бесконечному числу долин, поскольку при заданной энергии каждому значению импульса соответствует своя зависимость от деформации  $\delta E_i(\mathbf{p}, \epsilon)$ . Поэтому величина коэффициента поглощения звука пропорциональна времени перехода дырок между состояниями с одинаковой энергией. В общем случае это время относится как к внутрizonным, так и к межzонным переходам.

Из (15) видно, что для акустической волны  $l=2, 4$ , т. е. отличны от нуля  $C_{2,m}^i$  и  $C_{4,m}^i$ , причем при  $\Delta \rightarrow \infty$   $C_{4,m}^i \rightarrow 0$ . Следовательно, при конечной величине  $\Delta$  необходимо вычислять  $w_{ij}^{(2)}$  и  $w_{ij}^{(4)}$ .

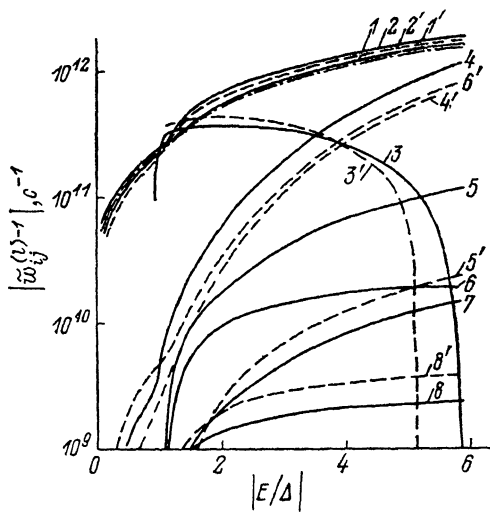


Рис. 3. Энергетические зависимости вероятностей  $\tilde{w}_{ij}^{(l)}$  при рассеянии дырок на длинноволновых акустических фононах при указанных в тексте зонных параметрах,  $T=300$  К.

Сплошные линии —  $l=2$ , штриховые — 4. 1 —  $\tilde{w}_{11}$ , 2 —  $\tilde{w}_{22}$ , 3 —  $\tilde{w}_{33}$ , 4 —  $\tilde{w}_{12}$ , 5 —  $\tilde{w}_{31}$ , 6 —  $\tilde{w}_{21}$ , 7 —  $\tilde{w}_{13}$ , 8 —  $\tilde{w}_{23}$ , 9 —  $\tilde{w}_{32}$ .

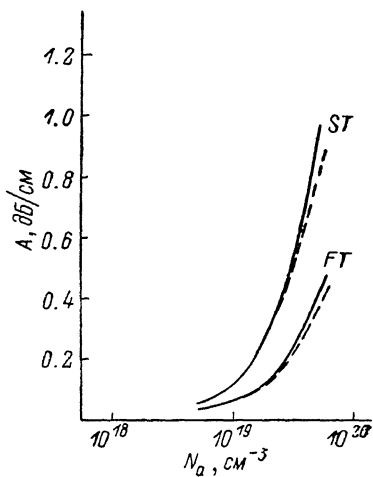


Рис. 4. Расчетные концентрационные зависимости коэффициента поглощения звука дырками.

Сплошные линии — рассеяние только на заряженных примесях, штриховые — рассеяние на заряженных примесях и акустических фононах.

Мы определили  $w_{ij}^{(l)}$  для конкретных механизмов рассеяния в борновском приближении. В случае ионизованных примесей потенциал выбрался в виде

$$V(r) = (e^2/\kappa r) \exp(-r/r_0), \quad (16)$$

$$w_{ij}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \int \psi_{i,\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \psi_{j,\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) d^3r, \quad (17)$$

где  $\kappa$  — диэлектрическая проницаемость среды;  $\psi_{i,\mathbf{p}}$ ,  $\psi_{j,\mathbf{p}'}$  — волновые функции дырок с импульсами  $\hbar\mathbf{p}$  и  $\hbar\mathbf{p}'$  в зонах  $i$  и  $j$  соответственно. Явный вид  $w_{ij}$ , вычисленных с помощью  $\psi_{i,\mathbf{p}}$  в рамках сферической модели, приведен в Приложении. Все вероятности  $\tilde{w}_{ij}^{(l)}$  вычисляются аналитически, однако сами выражения очень громоздки, и мы их не приводим. Для примера на рис. 2 показаны зависимости  $\tilde{w}_{ij}^{(l)}$  от энергии дырки для кремния. При  $E \leq |\Delta|$  все вероятности переходов, связанные со спин-отщепленной зоной, равны нулю. Напротив, как видно из рис. 2, при  $E \geq 2|\Delta|$  величины  $\tilde{w}_{22}^{(2)}$ ,  $\tilde{w}_{33}^{(2)}$ ,  $\tilde{w}_{11}^{(2)}$ ,  $\tilde{w}_{21}^{(1)}$  одного порядка и их роль в процессах релаксации примерно одинакова. Необходимость учета спин-отщепленной зоны подчеркивает то обстоятельство, что вероятности  $\tilde{w}_{22}^{(4)}$ ,  $\tilde{w}_{11}^{(4)}$ ,  $\tilde{w}_{33}^{(4)}$  также отличны от нуля и имеют тот же порядок величины. Это отражает тот факт, что близость спин-отщепленной зоны приводит к сильному искажению спектра для первых двух зон.

Для описания рассеяния носителей на длинноволновых акустических фононах воспользуемся методом деформационного потенциала. С учетом

трех валентных подзон гамильтониан электрон-фононного взаимодействия получается из матрицы, определяющей спектр носителей, с заменой произведений  $p_i p_j$  на  $\epsilon'_{ij}$  и переобозначением констант [9]. Величины  $\epsilon'_{ij}$  определяют деформацию, создаваемую акустическими колебаниями

$$\epsilon'_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = \frac{i}{2} [\epsilon_i^v(\mathbf{q}) q_i + \epsilon_j^v(\mathbf{q}) q_j], \quad (18)$$

где  $\mathbf{u}$  — вектор смещения;  $\mathbf{q}$  — волновой вектор фонона;  $v$  — поляризация фонона сорта  $v=1, 2, 3$ , соответствующего одной продольной моде и двум поперечным. На рис. 3 показаны для иллюстрации зависимости  $\bar{w}_{ij}^{(l)}$  от энергии при рассеянии на акустических длинноволновых фононах в предположении, что  $\hbar\omega \ll kT$  ( $T=300$  К), из которых видно, что вероятности рассеяния на фононах на порядок меньше, чем на примесях. Выражения для  $\bar{w}_{ij}^{(l)}$  весьма громоздки и поэтому здесь не приводятся.

Для определения поглощаемой мощности  $P$  надо в (12) подставить явный вид  $(\bar{w}_{ij}^{(l)})^{-1}$  и  $C_{i,m}^j$ . Величина  $P$  пропорциональна интенсивности звуковой волны и вследствие малости параметра  $ql \ll 1$  не должна зависеть от направлений  $\mathbf{q}$ , поэтому выражение для  $P$  должно содержать квадратичные по  $\epsilon_{ij}$  комбинации, не изменяющиеся при преобразованиях кубической симметрии

$$P = Q [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + (\epsilon_{yy} - \epsilon_{zz})^2 + (\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx})^2] + R (\epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{yz}^2 + \epsilon_{zx}^2). \quad (19)$$

В (19) не содержатся члены вида  $(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})^2$ , поскольку соответствующая деформация отвечает сдвигу всех зон как целого и поэтому не приводит к релаксации. Из (19) следует, что поглощаемая мощность звуковой волны определяется двумя независимыми константами  $Q$  и  $R$ , и выражение (19) может служить для проверки самосогласованности экспериментальных данных.

Коэффициент поглощения  $A$  определяется как отношение  $P$  к плотности потока звуковой энергии  $\dot{S}$ . Концентрационная зависимость  $A$  для рассеяния на ионизованных примесях и фононах при  $T=300$  К с учетом всех трех подзон была рассчитана для кремния при следующих значениях параметров:  $A = -15.810 \cdot 10^{-16}$  эВ·см<sup>2</sup>,  $B = -2.86 \cdot 10^{-16}$  эВ·см<sup>2</sup>,  $\bar{B} = -8.019 \cdot 10^{-16}$  эВ·см<sup>2</sup>,  $D = -20.581 \cdot 10^{-16}$  эВ·см<sup>2</sup>,  $|b| = 1.2$  эВ,  $|d| = 2.7$  эВ,  $|\Delta| = 0.044$  эВ. В качестве равновесной функции распределения бралась  $f_0 = [1 + \exp((E - \mu)/kT)]^{-1}$ ; химический потенциал  $\mu$  определялся из уравнения, приведенного в [7];  $r_0$  вычислялся по формуле Дебая  $r_0 = (\chi kT / 4\pi N_a e^2)^{1/2}$ .

Результаты вычислений приведены на рис. 4, из которого видно, что в интервале концентраций  $10^{18} - 10^{20}$  см<sup>-3</sup> поглощение звуковой волны связано с рассеянием на примесях, а величина  $A$  при концентрациях  $\sim 10^{19}$  см<sup>-3</sup> составляет  $\sim 1$  дБ/см. Учет рассеяния на фононах слабо сказывается на величине  $A$ , поскольку соответствующие вероятности переходов относительно малы (рис. 2, 3).

Формулы для  $Q$  и  $R$  значительно упрощаются, если считать, что спин-отщепленная зона удалена на величину, намного превосходящую  $E_F$  или  $kT$  ( $|\Delta| \rightarrow \infty$ ), т. е. эта зона не участвует в поглощении звука

$$P = \frac{\omega^2}{90\pi} \frac{1}{|\bar{B}|} \{ 18B^2 b^2 [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + (\epsilon_{yy} - \epsilon_{zz})^2 + (\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx})^2] + \\ + 12D^2 d^2 (\epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{yz}^2 + \epsilon_{zx}^2) \} \int_0^\infty p^4 dp \frac{(\bar{w}_{22}^{(l)} + \bar{w}_{21}^{(l)}) (\partial f_{10} / \partial E) + (\bar{w}_{11}^{(l)} + \bar{w}_{21}^{(l)}) (\partial f_{20} / \partial E)}{\bar{w}_{11}^{(l)} \bar{w}_{22}^{(l)} - \bar{w}_{12}^{(l)} \bar{w}_{21}^{(l)}}, \quad (20)$$

где  $l=2$ ,  $B^2 = (D^2 + 2B^2)/5$ . В случае рассеяния на заряженных примесях при  $r_0^{-2} \gg (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2$  все интегралы в (10) вычисляются аналитически и (20) принимает вид

$$P = \frac{\omega^2}{B^2} \frac{\chi^2 \hbar}{360 (2\pi)^3} \frac{1}{r_3^4 e^4 n_0} \frac{87/5 + (\gamma^2 + \gamma^{-2})/5 + (\gamma^3 + \gamma^{-3})}{8/5 + 4(\gamma^3 + \gamma^{-3})/5} \{18B^2 b^2 [(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + (\epsilon_{yy} - \epsilon_{zz})^2 + (\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx})^2] + 12D^2 d^2 (\epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{yz}^2 + \epsilon_{zx}^2)\}. \quad (21)$$

Здесь  $e$  — заряд электрона;  $n_0$  — концентрация рассеивающих примесей;  $\gamma = (m_2/m_1)^{1/2}$ ;  $f_0(0)$  — значение функции распределения при  $E=0$ ;  $m_1, m_2$  — эффективные массы. В случае сильного вырождения  $f_0(0)=1$ , а в противоположном предельном случае  $f(E) \sim \exp(-E/kT)$ ,  $p^{1/2} (\hbar^2/m_1 kT)^{1/2} \ll 1$  ( $p$  — концентрация дырок)

$$f_0(0) = \frac{2p}{1 + \gamma^3} \left( \frac{\pi \hbar^2}{2m_1 kT} \right)^{3/2}. \quad (22)$$

Коэффициент поглощения, вычисленный по формулам (20)–(22) для кремния, пренебрежимо мал (при концентрации  $N_a = 6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ,  $T = 300 \text{ К}$  для  $FT$  волны в кремнии он равен  $0.026 \text{ дБ/см}$ ). Важность учета спин-отщепленной зоны определяется не столько ее непосредственным

Таблица 1

Компоненты тензора  $\epsilon$  и коэффициент поглощения  $A$  для различных типов звуковой волны

Тип волны	q	u	Создаваемые деформации	P	S	A
FT	[100]	[010]	$\epsilon_{xy} = \epsilon$	$R\epsilon^2$	$2\rho v_{FT}^3 \epsilon^2$	$R/2\rho v_{FT}^3$
ST	[110]	[110]	$\epsilon_{xx} = -\epsilon_{yy} = \epsilon$	$6Q\epsilon^2$	$2\rho v_{ST}^3 \epsilon^2$	$3Q/\rho v_{ST}^3$
L <sub>100</sub>	[100]	[100]	$\epsilon_{xx} = \epsilon$	$2Q\epsilon^2$	$1/2\rho v_{L_{100}}^3 \epsilon^2$	$4Q/\rho v_{L_{100}}^3$
L <sub>110</sub>	[110]	[110]	$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{xy} = \epsilon$	$(2Q + R)\epsilon^2$	$2\rho v_{L_{110}}^3 \epsilon^2$	$(2Q + R)/2\rho v_{L_{110}}^3$

$$A_{L_{100}} = 4/3 (v_{ST}/v_{L_{100}})^3 A_{ST}, \quad A_{L_{110}} = 1/3 (v_{ST}/v_{L_{110}})^3 A_{ST} + (v_{FT}/v_{L_{110}})^3 A_{FT}.$$

участием в поглощении звука (так как число занятых состояний в ней порядка нескольких процентов), сколько отмеченным выше искажением  $E(p)$  зон легких и тяжелых дырок из-за наличия спин-отщепленной зоны.

В рамках рассматриваемой модели рассчитана также подвижность. Для этого надо определить величины  $\tilde{w}_{ij}^{(l)}$  с  $l=1$ . Выражение для плотности тока ( $\mathcal{E} \parallel z$ ) имеет вид

$$j_z = \frac{e^2 \mathcal{E}}{3\pi^2} \int_0^\infty dE \frac{\partial f_0}{\partial E} \{ \rho_1(E) [V_1^{(2)}(E) (\tilde{w}_{22}^{(1)} \tilde{w}_{33}^{(1)} - \tilde{w}_{32}^{(1)} \tilde{w}_{23}^{(1)}) + V_1 V_2 (\tilde{w}_{32}^{(1)} \tilde{w}_{13}^{(1)} - \tilde{w}_{12}^{(1)} \tilde{w}_{33}^{(1)}) + V_1 V_3 (\tilde{w}_{12}^{(1)} \tilde{w}_{33}^{(1)} - \tilde{w}_{22}^{(1)} \tilde{w}_{13}^{(1)})] + [1 \rightarrow 2, 3] + [1 \rightarrow 3, 2] \} \{ \tilde{w}_{11}^{(1)} (\tilde{w}_{22}^{(1)} \tilde{w}_{33}^{(1)} - \tilde{w}_{32}^{(1)} \tilde{w}_{23}^{(1)}) + \tilde{w}_{21}^{(1)} \tilde{w}_{13}^{(1)} (\tilde{w}_{32}^{(1)} - \tilde{w}_{33}^{(1)}) + \tilde{w}_{31}^{(1)} \tilde{w}_{23}^{(1)} (\tilde{w}_{12}^{(1)} - \tilde{w}_{13}^{(1)}) \}^{-1}. \quad (23)$$

Здесь скорости  $V_i = \partial E_i / \hbar \partial p$  выражаются через энергию  $E$ ;  $\rho_i(E)$  — плотность состояний в  $i$ -й подзоне;  $[1 \rightarrow 2, 3]$  означает, что в первом слагаемом в фигурной скобке надо переставить индексы 1 и 2.

## 2. Эксперимент

Исследования проводились на монокристаллических образцах  $p$ -Si с различным содержанием примеси бора. Образцы представляли собой прямоугольные параллелепипеды, вырезанные в направлениях [100] и [110]. Торцы образцов полировались плоскопараллельно с точностью  $0.5'$ .

Поглощение звука, для возбуждения которого использовались пластинки ниобата лития, измерялось для быстрой поперечной  $FT$ , медленной поперечной  $ST$  и продольной  $L$  волн, распространяющихся в направлениях [100] и [110] (табл. 1) с точностью  $0.1 \text{ дБ см}$ . Измерения проводи-



лись эхо-импульсным методом на частоте 730 мГц для продольных и 720 мГц для поперечных волн. Величина вклада дырок  $A$  вычислялась как разность между экспериментальными значениями коэффициента поглощения в легированном и чистом образцах. Кроме того, вычиталось фоновое поглощение, не зависящее от температуры и концентрации. В качестве чистого использовался образец с  $N_a = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , где влияние дырок на поглощение звука пренебрежимо мало.

Таблица 2

Экспериментальные и рассчитанные по (19) значения  $A$  (дБ/см) для продольных волн  $L_{100}$  и  $L_{110}$

$N_a, \text{ см}^{-3}$	$T = 300 \text{ К}$						$T = 78 \text{ К}$					
	$A_{ST}$	$A_{FT}$	$A_{L_{100}}$		$A_{L_{110}}$		$A_{ST}$	$A_{FT}$	$A_{L_{100}}$		$A_{L_{110}}$	
			эксп.	расч.	эксп.	расч.			эксп.	расч.	эксп.	расч.
$4.5 \cdot 10^{18}$	0.4	0.2	0.4	0.1	0.2	0.1	0.7	0.4	0.5	0.2	0.3	0.1
$1.2 \cdot 10^{19}$	0.6	0.4	0.1	0.1	0.2	0.1	0.9	0.7	0.2	0.2	0.3	0.2
$6 \cdot 10^{19}$	1.4	0.7	0.1	0.3	0.2	0.2	1.3	0.9	0.2	0.3	0.2	0.3

Экспериментальные результаты приведены в табл. 2. Для проверки самосогласованности экспериментальных данных там же представлены вычисленные с помощью (19) значения коэффициента поглощения продольных волн  $L_{100}$  и  $L_{110}$ . Заметим, что для  $p$ -Si с большой концентрацией примесей имеет место заметный разброс значений  $A$ , что наблюдалось и другими авторами [11]. Это связано, по-видимому, с разным качеством образцов (дефекты, комплексы и т. п.). Учитывая это, согласие  $A_{L_{расч}}$  и  $A_{L_{эксп}}$  для продольных волн можно считать удовлетворительным.

### 3. Обсуждение результатов

При сопоставлении теории и результатов эксперимента возникает задача правильного выбора радиуса экранирования потенциала заряженной примеси в зависимости от уровня легирования. Вычисление  $r_s$  по формуле Дебая в интервале концентраций  $10^{18} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$  не является точным, поскольку  $e^2 N_a^{1/2} / \chi k T < 1$ , т. е. условие применимости формулы для  $r_s$  нарушено. Поэтому величина  $r_s$  рассматривалась как параметр, который выбирался так, чтобы вычисленная с помощью (23) дрейфовая подвижность равнялась экспериментальной [12]. При вычислении подвижности считалось, что дырки рассеиваются только на ионизованных примесях. Результаты расчетов  $r_s(N_a, T)$  показаны на рис. 5, а соответствующие им величины  $A$  — на рис. 6.

Для наилучшего совпадения результатов теории и эксперимента величина  $B$  при  $T=78$  и 300 К выбиралась равной соответственно  $(1.35$  и  $1.53) \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{см}^2$ . Такое небольшое различие естественно объясняется температурной зависимостью параметров зон [13].

Обсудим теперь возможный вклад рассеяния на нейтральных примесях. Действительно, если оценить обратное время релаксации за счет упругих столкновений с нейтральными примесями по формуле [14]

$$\tau_0^{-1} = \frac{20 \chi \hbar^3}{m^* e^2} p_0, \quad (24)$$

где  $p_0$  — концентрация нейтральных примесей, то при  $p_0 \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$  величина  $\tau_0^{-1}$  для  $p$ -Si составляет  $10^{13} \text{ с}^{-1}$ , т. е. того же порядка, что и для заряженных примесей. Однако в исследуемом интервале температур вели-

чина коэффициента поглощения становится заметно больше ошибки измерений при  $N_a > 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , когда все примеси ионизованы и  $p_0 \ll \ll N_a$ . В области  $N_a < 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  значения  $P$  и  $A$  при рассеянии на нейтральных примесях могут быть оценены по формулам типа (21), если в них положить  $r_s = a_B$ ; однако в этом диапазоне концентраций поглощение звука свободными дырками столь мало, что сравнение теории с экспериментом теряет смысл.

Следует подчеркнуть, что коэффициент поглощения звука дырками не имеет ярко выраженной зависимости от типа акустической деформации. В частности, отношение коэффициентов поглощения  $ST$  и  $FT$  волн порядка 2 и слабо меняется с температурой и концентрацией. Эта ситуация принципиально отличается от той, которая характерна для эффекта пьезосопротивления в  $p$ -Si [15], когда для разных деформаций сдвига

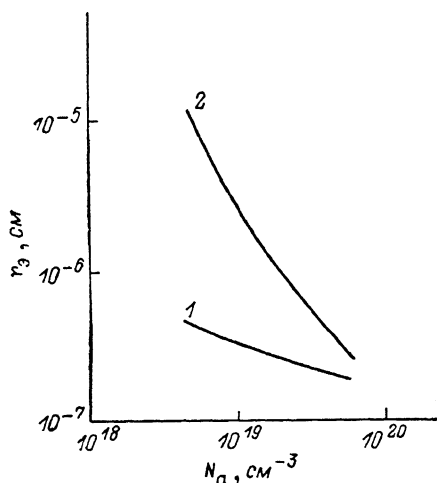


Рис. 5. Концентрационные зависимости эффективного радиуса экранирования  $r_s$  при  $T=78$  (1) и 300 К (2).

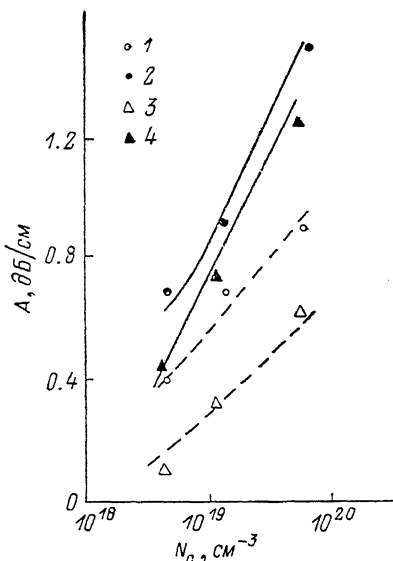


Рис. 6. Сравнение результатов расчета и эксперимента для  $A$ .

Сплошные линии — расчет для  $ST$  волны, штриховые — для  $FT$  волны. Точки — эксперимент при  $T=78$  (1, 2, 4) и 300 К (3).

изменение сопротивления имеет разный знак и величину, причем соотношение эффектов резко меняется с температурой и концентрацией дырок. Различие связано с тем, что при изучении эффектов пьезосопротивления прикладываемые механические напряжения велики (параметр  $b\varepsilon/E_0 \sim 1$ ), и разные деформации вызывают различное изменение спектра носителей и вероятностей переходов. Что касается акустических волн, то соответствующие деформации малы ( $b\varepsilon/E_0 \sim 10^{-4}$ ) и фактически зонная структура и вероятности переходов не изменяются.

Таким образом, в работе выполнены систематические измерения акустического поглощения в  $p$ -Si для разных типов волн в области температур и концентраций, когда дырки являются свободными, а акцепторы полностью ионизованы. Разработана теория акустического поглощения в полупроводниках со сложной структурой валентной зоны. Численный расчет для  $p$ -Si демонстрирует удовлетворительное согласие теории с экспериментом. Показано, что в исследуемом диапазоне температур и концентраций коэффициент поглощения звука обусловлен преимущественно рассеянием дырок на заряженных примесях, причем основную роль играют внутрizonные переходы. Продемонстрирована важность учета спин-отщепленной зоны, связанная с искажением энергетического спектра зон легких и тяжелых дырок.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

При рассеянии на ионизованных примесях выражения для  $w_{ij}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = w_{ij}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = w_{ij}(E, \Theta)$  имеют вид

$$\begin{aligned}
 w_{11} &= w_0 (1 - 3 \sin^2 \Theta/4), \\
 w_{2(3), 2(3)} &= \\
 &= w_0 \frac{\left\{ B^4 p^8 (1 + 3 \cos^2 \Theta) - 2B^2 p^4 (1 - 3 \cos^2 \Theta) \left( e \pm B \frac{p^2}{2} \mp \frac{\Delta}{2} \right) + \left( e \pm B p^2 \mp \frac{\Delta}{2} \right)^4 \right\}}{2e \left( e \pm B p^2/2 \mp \Delta/2 \right)}, \\
 w_{1, 2(3)} &= w_0 \frac{3}{4} \frac{B^2 p'^4 \sin^2 \Theta}{e' \left( e' \pm B p'^2/2 \mp \Delta/2 \right)}, \\
 w_{23} &= w_0 \left\{ B^4 p^4 p'^4 (1 + 3 \cos^2 \Theta) + 2B^2 p'^2 p^2 \left( e + \frac{B p^2}{2} - \frac{\Delta}{2} \right) \left( e' - \frac{B p'^2}{2} + \frac{\Delta}{2} \right) \right\} \times \\
 &\times (1 - 3 \cos^2 \Theta) + \left( e + \frac{B p^2}{2} - \frac{\Delta}{2} \right)^2 \left( e' - \frac{B p'^2}{2} + \frac{\Delta}{2} \right)^2 \left\{ 4e e' \left( e + \frac{B p^2}{2} - \frac{\Delta}{2} \right) \times \right. \\
 &\quad \left. \times \left( e' - \frac{B p'^2}{2} + \frac{\Delta}{2} \right) \right\}^{-1}. \quad (\text{П. 1})
 \end{aligned}$$

Здесь

$$w_0 = \frac{32\pi^3 e^4}{\kappa^2 \hbar V^2} \frac{1}{r_s^{-2} + (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2}, \quad e(p) = \frac{(\Delta^2 - 2\Delta B p^2 + 9B^2 p^4)^{1/2}}{2}, \quad e' = e(p'), \quad (\text{П. 2})$$

первый знак относится к  $i=2$ , а второй к  $i=3$ . При  $|\Delta| \rightarrow \infty$  все (П. 1) переходят в соответствующие формулы из [9].

### Л и т е р а т у р а

- [1] Weinreich G. et al. // Phys. Rev. 1959. V. 114. N 1. P. 33—44.
- [2] Keyes R. W. // IBM J. Res. Develop. 1961. V. 5. N 4. P. 266—278.
- [3] Csavinszky P., Einspruch N. G. // Phys. Rev. 1963. V. 132. N 6. P. 2434—2439.
- [4] Csavinszky P. // J. Appl. Phys. 1965. V. 36. N 12. P. 3723—3727.
- [5] Бир Г. Л. и др. // ФТТ. 1962. Т. 4. № 5. С. 1180—1195.
- [6] Дьяконов М. И., Хаецкий А. В. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 5. С. 1843—1850.
- [7] Аверкиев Н. С. и др. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 7. С. 2005—2012.
- [8] Fjeldly T. A. // Phys. Rev. 1973. V. B8. N 10. P. 4723—4733.
- [9] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 584 с.
- [10] Гуревич В. Л., Эфрос А. Л. // ЖЭТФ. 1963. Т. 44. № 6. С. 2131—2143.
- [11] Mason W. P., Bateman T. B. // Phys. Rev. 1964. V. 134. N 5A. P. 1387—1394.
- [12] Irvin J. C. // Bell Syst. Techn. J. 1962. V. 41. N 2. P. 387—410.
- [13] Ottawiani G. et al. // Phys. Rev. 1975. V. B12. N 8. P. 3318—3329.
- [14] Erginsoy C. // Phys. Rev. 1950. V. 79. N 6. P. 1013—1014.
- [15] Bir G. L. et al. // Proc. Int. Conf. Semicond. Phys. Paris, 1963. P. 529—535.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
19 сентября 1988 г.  
В окончательной редакции  
28 октября 1988 г.