

ВЛИЯНИЕ МЕЖДЫРОЧНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ НА РАЗОГРЕВ И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА ТЕПЛЫМИ ДЫРКАМИ В *p*-Ge

Дедулевич С., Канцлерис Ж., Матулис А.

Рассчитаны функции распределения носителей тока в слабо греющем электрическом поле и концентрационная зависимость коэффициента поглощения света с длиной волны 10.6 мкм в *p*-Ge. Электрон-электронное взаимодействие учтено итерационным методом в двухчастичной процедуре Монте-Карло для теплых электронов. Получено хорошее совпадение расчетной зависимости коэффициента поглощения с экспериментальными данными.

1. Электрон-электронное (*e-e*) рассеяние не меняет ни суммарного импульса электронной системы, ни ее суммарной энергии, и поэтому оно не должно было бы влиять ни на омическую проводимость, ни на разогрев электронов в электрическом поле. Однако *e-e*-рассеяние перераспределяет электроны в импульсном пространстве и тем самым может изменять эффективность других механизмов рассеяния и таким образом влиять на все свойства полупроводника. Например, в случае низкотемпературного рассеяния оптическими фононами *e-e*-рассеяние, как было впервые указано в [1], открывает новый канал релаксации энергии и существенно изменяет форму функции распределения горячих носителей заряда. Так как с ростом средней энергии носителей заряда эффективность *e-e*-рассеяния уменьшается, то экспериментальные исследования данного эффекта проводились в основном в слабогреющем электрическом поле [2-5], причем следует отметить особенно работы [3, 5], где путем измерения коэффициента поглощения света фактически определялись функция распределения носителей заряда и ее зависимость от *e-e*-рассеяния.

Расчеты параметров, определенных из экспериментальных данных, как правило, выполнялись традиционным методом Монте-Карло [6-8]. Но в слабогреющих электрических полях сходимость указанного метода неудовлетворительна, и получить количественного совпадения между экспериментальными и расчетными данными не удавалось. К тому же в расчетах обычно основное внимание уделялось определению времени релаксации энергии τ_e , которое в экспериментах непосредственно не измерялось. Была предпринята попытка рассчитать коэффициент поглощения света в *p*-Ge путем решения кинетического уравнения с учетом *e-e*-рассеяния вариационным методом, однако и она не увенчалась успехом [5].

В настоящей работе представлены результаты расчета функции распределения носителей заряда в *p*-Ge. Для учета *e-e*-рассеяния применена итерационная процедура в рамках предложенного ранее двухчастичного метода Монте-Карло [9], позволяющая рассчитать поправки к симметричной части функции распределения в слабогреющем электрическом поле с относительно малыми затратами машинного времени. Рассчитана концентрационная зависимость коэффициента поглощения света с длиной волны 10.6 мкм в *p*-Ge при $T=80$ К применительно к экспериментам [3, 5].

2. В области слабогреющего электрического поля функция распределения носителей тока обычно представляется в виде разложения по степеням электрического поля

$$f(\mathbf{p}, t) = \Phi_0(x) + \frac{E}{E^*} \varphi_1(x, t) \cos \vartheta + \left(\frac{E}{E^*}\right)^2 \Phi_2(x). \quad (1)$$

Здесь введена безразмерная энергия носителя $x = \varepsilon/k_0 T$, T — температура решетки, ϑ — угол между постоянным электрическим полем E и импульсом p , E^* — некоторая константа, имеющая размерность электрического поля и введенная для сохранения одинаковой размерности для всех компонент функций распределения, $\Phi_0 = N_0 \exp(-x)$ — равновесная функция распределения, N_0 — нормировочный множитель. Предполагается, что зона параболическая и изотропная.

Подставляя разложение (1) в кинетическое уравнение Больцмана, получаем следующую систему уравнений для антисимметричной части функции распределения φ_1 и для E^2 -поправки к симметричной части функции распределения Φ_2 [9]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi_1(x, t) - \hat{S}_1(\varphi_1) = -\frac{\sqrt{2} e E^*}{\sqrt{m k_0 T}} x^{1/2} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi_2(x, t) - \hat{S}_0(\Phi_2) = -\frac{\sqrt{2} e E^*}{3 \sqrt{m k_0 T}} x^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x} (x \varphi_1). \quad (3)$$

Здесь e , m — заряд и эффективная масса носителя заряда, а символами \hat{S}_0 и \hat{S}_1 обозначены симметричная и антисимметричная части столкновительного члена кинетического уравнения.

Мы сосредоточим основное внимание на функции $\Phi_2(x)$, а точнее на функции

$$F(x) = \sqrt{x} \Phi_2(x), \quad (4)$$

определяющей полевую поправку к плотности носителей заряда на энергетической оси. Эта функция и характеризует разогрев носителей заряда, а также определяет относительную полевую поправку к коэффициенту поглощения света в слабогреющем электрическом поле:

$$\frac{\Delta \alpha}{\alpha} = \frac{P_0}{e \mu_0 (E^*)^2} \frac{F(x_p)}{x_p^{1/2} e^{-x_p}}, \quad (5)$$

где P_0 — мощность, выделяющаяся в образце в пересчете на один носитель, $x_p = \varepsilon_p / k_0 T$ (ε_p — кинетическая энергия дырки, участвующей в переходе между зонами тяжелых и легких дырок под воздействием падающего на образец инфракрасного излучения), μ_0 — омическая подвижность, для расчета которой использовалось выражение

$$\mu_0 = \frac{2 \sqrt{2}}{3 \sqrt{\pi}} \frac{(k_0 T)^{1/2}}{\sqrt{m} E^*} \int_0^{\infty} \varphi_1(x) x dx. \quad (6)$$

Зависимость коэффициента $\Delta \alpha / \alpha$ и величины μ_0 от параметра E^* лишь формальная, ибо, как видно из (2)–(4), он входит в определение функций φ_1 и F . Значение E^* фактически определяет лишь масштабы функций распределения.

В случае ковалентного полупроводника, когда учитываются лишь рассеяние носителей ионизованными примесями и деформационное рассеяние на акустических и оптических фонах, оператор \hat{S}_1 имеет простой релаксационный вид и решение уравнения (2) находится аналитически. Поэтому численно приходится решать только уравнение (3) или аналогичное уравнение для функции $F(x)$, которое получается прямой подстановкой определения (4) в уравнение (3). Для решения указанного уравнения мы использовали предложенный ранее двухчастичный метод Монте-Карло, который оказался достаточно эффективным для численного решения неоднородных уравнений типа (3), когда не учитывалось e - e -рассеяние. Метод подробно описан в работе [9]. Суть его заключается в следующем. Согласно вероятностям, входящим в определение \hat{S}_0 , моделируется блуждание частицы по энергетической оси, а правая часть уравнения трактуется как генерационный член. Для набора статистики по многим процессам генерации частицы приходится считаться с законом сохранения числа частиц, которому удовлетворяет уравнение (3). Эти трудности удается избежать

путем одновременной генерации двух частиц (положительной и отрицательной) и моделирования их блуждания до аннигиляции.

Влияние e - e -рассеяния мы учли путем включения столкновительного члена в форме интеграла столкновений Ландау [10] в уравнение для симметричной части функции распределения (3). В линеаризованном виде он может быть представлен следующим образом:

$$\hat{S}_0^{(ee)}(\Phi) = \hat{S}_d^{(ee)}(\Phi) + \hat{S}_i^{(ee)}(\Phi), \quad (7)$$

где $\hat{S}_d^{(ee)}$ и $\hat{S}_i^{(ee)}$ — дифференциальная и интегральная части оператора, выражения для которых имеют следующий вид:

$$\hat{S}_d^{(ee)}(\Phi) = S_{ee} \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left[\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} + \Phi(x) \right] \int_0^x dx' \sqrt{x'} e^{-x'} \right\}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^{(ee)}(\Phi) = S_{ee} \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ e^{-x} \left[\int_0^x dx' \sqrt{x'} \Phi(x') - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2}{3} \left(x^{3/2} \int_x^\infty dx' \Phi(x') + \int_0^x dx' x'^{3/2} \Phi(x') \right) \right] \right\}. \quad (9) \end{aligned}$$

Константа S_{ee} , характеризующая интенсивность e - e -взаимодействия, выражается следующим образом:

$$S_{ee} = \frac{n_0 e^4}{2 \sqrt{2} \pi^{3/2} \epsilon_0^2 \epsilon^2 m^{1/2} (k_0 T)^{3/2}} \Lambda. \quad (10)$$

Здесь Λ — кулоновский логарифм, n_0 — концентрация носителей заряда, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная, ϵ — относительная диэлектрическая проницаемость.

При больших концентрациях носителей заряда необходимо учесть e - e -рассеяние и в уравнении (2) для антисимметричной части функции распределения. Мы этим пренебрегли, что, строго говоря, может быть обосновано только в области промежуточных концентраций [10].

Учет дифференциальной части оператора e - e -столкновений прост, ибо из выражения (8) видно, что он по своей форме совпадает со столкновительным оператором деформационного рассеяния на акустических фононах, входящего в определение \hat{S}_0 уравнения (3). С интегральной частью e - e -оператора дело обстоит сложнее. Выполняя дифференцирование в выражении (9), можно убедиться, что оператор $\hat{S}_i^{(ee)}$ является интегральным оператором, ядро которого не является положительно определенным. Поэтому это ядро нельзя трактовать, как вероятность перескока частицы между соответствующими точками энергетической оси, и, следовательно, оператор $\hat{S}_i^{(ee)}$ не может быть учтен моделированием блуждания частицы в процедуре Монте-Карло. С учетом вышеизложенного включение e - e -рассеяния в двухчастичную процедуру Монте-Карло было осуществлено следующим образом. Дифференциальная часть $\hat{S}_d^{(ee)}$ была присоединена к оператору \hat{S}_0 и по нему организован процесс блуждания частиц, а интегральная часть $\hat{S}_i^{(ee)}$ трактовалась, как поправка к генерационному члену правой части уравнения (3), которая учитывалась итерационным способом. В стартовом приближении полагалось, что $\hat{S}_i^{(ee)} = 0$. При больших концентрациях носителей заряда в качестве стартового приближения использовалась функция распределения, полученная в приближении доминирующего e - e -рассеяния.

Расчет проводился на ЭВМ «Эльбрус». Число ячеек на энергетической оси составляло 150, моделировалось 150 000 перескоков частиц на итерацию. В среднем требовалось 7—8 итераций, что обеспечивало погрешность расчета менее 10 %. Такой расчет занимал 3—4 мин машинного времени.

3. Расчеты проводились для полупроводника с параболической изотропной зоной и параметрами, соответствующими зоне тяжелых дырок в p -Ge. Использованные при расчете параметры: эффективная масса $0.3m_0$, константа акусти-

ческого деформационного потенциала 6 эВ, характерная температура оптических фононов 430 К, скорость звука $5.4 \cdot 10^3$ м/с, плотность $5.33 \cdot 10^3$ кг/м³. Множитель E^* мы выбрали согласно [9], что в случае p -Ge при $T=80$ К соответствовало $E^*=1.81 \cdot 10^3$ В/м.

Расчитанная предлагаемым методом функция распределения теплых дырок при учете акустического и e - e -рассеяния показана точками на рис. 1. Концентрация дырок $p_0=5.3 \cdot 10^{12}$ см⁻³, $T=80$ К. При учете только этих двух механизмов рассеяния кинетическое уравнение сводится к системе дифференциальных уравнений. Кривая 2 на том же рисунке показывает результат численного решения данной системы методом Рунге—Кутты. Для иллюстрации зависимости функции распределения от относительной интенсивности e - e -рассеяния на рис. 1 по-

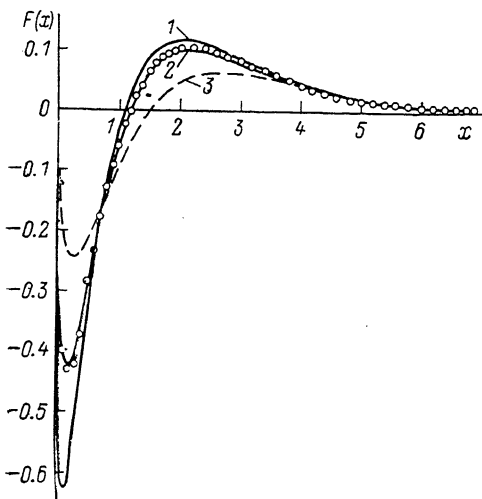


Рис. 1. Функция $F(x)$ при рассеянии на акустических фононах.

1 — без учета e - e -рассеяния, 2 — с учетом e - e -рассеяния ($p_0=5.3 \cdot 10^{12}$ см⁻³), 3 — при доминирующем e - e -рассеянии. Точки — расчет двухчастичным методом Монте-Карло. $E^*=1.81 \cdot 10^3$ В/м, $T=80$ К.

казаны еще две кривые. Кривая 1 $I_{\text{дв}}^{**}$ представляет собой аналитическое решение кинетического уравнения, когда имеется лишь рассеяние на акустических фононах, а кривая 3 изображает решение кинетического уравнения при доминирующем e - e -рассеянии. Как видно из рисунка, при примерно одинаковой интенсивности e - e -рассеяния и рассеяния на акустических фононах двухчастичный метод Монте-Карло дает неплохие результаты.

На рис. 2 представлены расчитанные предлагаемым методом функции распределения для p -Ge при $T=80$ К с концентрацией ионизованных примесей $N_I=2 \cdot 10^{15}$ см⁻³ без учета (кривая 1) и с учетом рассеяния дырок друг на друге

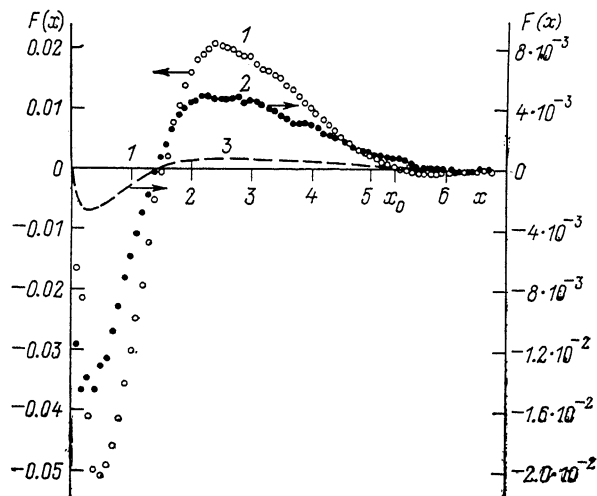


Рис. 2. Функция $F(x)$ для p -Ge при $T=80$ К и $N_I=2 \cdot 10^{15}$ см⁻³.

1, 2 — расчет двухчастичным методом Монте-Карло без учета и с учетом e - e -рассеяния ($p_0=N_I$) соответственно; 3 — расчет при доминирующем e - e -рассеянии. $E^*=1.81 \cdot 10^3$ В/м, $D=9 \cdot 10^{10}$ эВ/м.

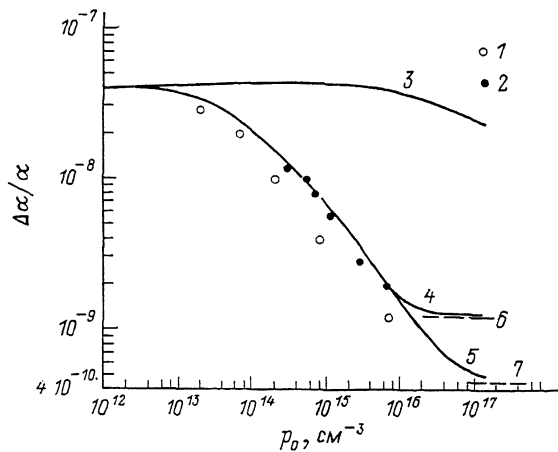
(кривая 2). Предполагалось, что $p_0=N_I$. Кривая 3 показывает решение кинетического уравнения при доминирующем e - e -рассеянии. На рисунке x_0 обозначает энергию оптического фонона. Константа связи, характеризующая интенсивность взаимодействия с оптическими фононами, принималась $D=9 \cdot 10^{10}$ эВ/м [11]. Как видно из рисунка, в отсутствие e - e -рассеяния в области $x > x_0$ отчетливо выделяется область энергий, в которой концентрация дырок из-за эмиссии оптических фононов становится ниже равновесной. Из сравнения кривых 2 и 3 видно, что концентрация дырок $2 \cdot 10^{15}$ см⁻³ еще недостаточна для полной максвеллизации функции распределения, однако междырочные столкновения уже существенно изменяют интенсивность испускания оптических

фононов, о чем свидетельствует исчезновение провала на кривой 2 в области $x > x_0$.

На рис. 3 точками показаны экспериментальные зависимости [3, 5] относительного изменения коэффициента поглощения инфракрасного излучения с длиной волны $\lambda=10.6$ мкм в слабогрееющем электрическом поле от концентрации дырок при вводимой в образец мощности электрического поля на один носитель 1 эВ/с . Как следует из (5), для расчетов $\Delta\alpha/\alpha$ необходимо знать функцию распределения теплых дырок при энергии ϵ_p , соответствующей на данной длине волны переходу между зонами тяжелых и легких дырок. Величину $\epsilon_p=23.7$ мэВ мы позаимствовали из работы [12]. Функция распределения рассчитывалась двухчастичным методом Монте-Карло (сплошные кривые) и в приближении доминирующего e - e -рассеяния (штриховые).

Рис. 3. Зависимость относительного изменения коэффициента поглощения $\Delta\alpha/\alpha$ от концентрации дырок при вводимой в образец мощности 1 эВ/с на один носитель.

Точки — эксперимент, сплошные кривые — расчет методом Монте-Карло без учета (3) и с учетом (4, 5) e - e -рассеяния, штриховые — расчет при доминирующем e - e -рассеянии ($p_0=N_I$). Данные работ: 1 — [3], 2 — [5]. $D \cdot 10^{-11}$, эВ/м: 3, 4, 6 — 0.9; 5, 7 — 1.5.



Из сравнения экспериментальных и расчетных данных, приведенных на рис. 3, видно, что без учета e - e -рассеяния (кривая 3) описать экспериментальные результаты не удается. Рассчитанные с учетом e - e -рассеяния кривые 4 и 5 качественно описывают оба экспериментальных результата. В количественном отношении лучшее совпадение достигнуто с результатами работы [5]. При расчете использовались две константы связи с оптическими фононами, соответствующие предельным значениям, встречающимся в литературе [11, 13]. Видно, что в области малых и промежуточных концентраций дырок зависимости, рассчитанные с обеими константами связи, совпадают. Различие появляется при доминирующем e - e -рассеянии. Видно, что при $D=1.5 \cdot 10^{11} \text{ эВ/м}$ [13] концентрация дырок, необходимая для полной максвеллизации функции распределения, почти на порядок выше, чем в случае $D=9 \cdot 10^{10} \text{ эВ/м}$. В указанной области p_0 отсутствуют экспериментальные данные. Однако и при их наличии сделать вывод о величине D не представляется возможным без учета вклада e - e -рассеяния в уравнение (2).

Были проведены расчеты и для случая компенсированных образцов. Оказалось, что с ростом компенсации $\Delta\alpha/\alpha$ незначительно возрастает. Так, при $N_I=2p_0=4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ $\Delta\alpha/\alpha$ увеличивается на 5 %, что не выходит за пределы погрешности расчета.

В заключение отметим, что представленные на последнем рисунке результаты расчетов при двух значениях D являются красивой иллюстрацией проявления составного механизма рассеяния, предложенного в [1]. В области малых и средних p_0 e - e -взаимодействие является самым медленным этапом составного механизма рассеяния и оно контролирует испускание оптических фононов. Поэтому $\Delta\alpha/\alpha$ уменьшается с ростом p_0 и не зависит от D , а в области больших концентраций, наоборот, самым медленным этапом становится оптическое рассеяние. Как следствие этого, $\Delta\alpha/\alpha$ зависит от D , но перестает зависеть от p_0 .

Л и т е р а т у р а

- [1] Левинсон И. Б., Мажуолите Г. Э. — ЖЭТФ, 1966, т. 50, в. 4, с. 1048—1054.
 [2] Dienys V., Kancleris Z. — Phys. St. Sol. (b), 1975, v. 67, N 1, p. 317—323.
 [3] Болтаев А. П., Певин Н. А. — ФТП, 1976, т. 10, в. 5, с. 911—917.

- [4] Ашмонтас С. П., Субачюс Л. Е. — ФТП, 1983, т. 17, в. 5, с. 930—936.
[5] Воробьев Л. Е., Стафеев В. И., Фирсов Д. А. — ФТП, 1983, т. 17, в. 5, с. 796—802.
[6] Jacoboni C. — In: Proc. XIII Int. Conf. Semicond. (Italy), 1976, p. 1195—1205.
[7] Brunetti R., Jacoboni C., Matulionis A., Dienys V. — Physica, 1985, v. 134B, p. 369—373.
[8] Рагуотис Р. А., Сельмистрайтис Г. Г. — В кн.: Тез. докл. VI симп. по плазме и неустойчивостям в полупроводниках. Вильнюс, 1986, с. 180—181.
[9] Kancleris Ž., Matulis A. — J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1987, v. 20, N 9, p. 1273—1284.
[10] Asche M., Sarbei O. G. — Phys. St. Sol., 1969, v. 33, N 1, p. 9—57.
[11] Takeda K., Sakui K., Taguchi A. et al. — J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1983, v. 16, N 5, p. 729—745.
[12] Васильева М. А., Воробьев Л. Е., Стафеев В. И. — ФТП, 1967, т. 1, в. 1, с. 29—33.
[13] Пожела Ю., Реклайтис А. — ФТП, 1977, т. 11, в. 4, с. 709—715.

Институт физики полупроводников
АН ЛитССР
Вильнюс

Получена 28.06.1987
Принята к печати 25.11.1987