

К ТЕОРИИ НЕОМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В БЕСЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Райчев О. Э.

Проведен теоретический анализ неомических явлений в бесщелевых полупроводниках. Учено взаимодействие горячих электронов с акустическими и оптическими фононами. Показано, что оптические фононы нельзя считать частью термостата: длинноволновые продольные оптические фононы «разогреваются» до температуры электронов. Получено выражение, описывающее энергетические потери электрон-дырочного газа в этих условиях. Рассчитана зависимость концентрации n электронов проводимости от напряженности E приложенного к полупроводнику электрического поля на интервале $E = (0 \div 30)$ В/см. Проведено сравнение теоретической зависимости с экспериментальными данными. Имеет место количественное согласие теории с экспериментом на всем рассматриваемом интервале значений E .

1. *Введение.* Известно (см., например, [1, 2]), что в бесщелевых полупроводниках (БП), помещенных в импульсное электрическое поле при низких температурах, наблюдается значительный рост проводимости σ с увеличением напряженности поля E . В результате вольтамперная характеристика БП оказывается нелинейной (неомической). В работах [1, 2] это явление наблюдалось экспериментально на образцах HgTe при температуре жидкого гелия. Было показано, что рост σ связан с увеличением концентрации n электронов проводимости в электрическом поле, а подвижность μ практически не зависит от поля.

Теоретическому изучению неомических явлений в БП в приближении электронной температуры посвящены работы [1, 3]. В [1] использовалась модель, согласно которой охлаждение горячих электронов происходит в процессе столкновений с тяжелыми дырками, имеющими температуру решетки. Однако в [3] было показано, что при низких температурах решетки дырки в БП разогреваются до температуры электронов. В этих условиях основным процессом, определяющим передачу энергии электронов решетке, является рассеяние горячих дырок на акустических фононах [3].

Однако учет энергетических потерь на акустических фононах был проведен в [3] некорректно: не принималось во внимание вырождение зоны Γ_8 . При расчетах использовалось сильно завышенное значение деформационной константы. Рассеяние на оптических фононах не рассматривалось в работах [1, 3] вообще. Между тем именно рассеяние на оптических фононах является определяющим механизмом энергетических потерь при достаточно высоких разогревах носителей тока.

В настоящей работе рассмотрено взаимодействие носителей тока как с акустическими, так и с оптическими фононами. Показано, что излучение оптических фононов горячими электронами приводит к «разогреву» длинноволновых продольных оптических фононов до температуры электронов. В разделах 3 и 4 получены формулы, описывающие мощность энергетических потерь носителей тока на акустических и оптических фононах. В разделе 5 эти формулы используются для нахождения зависимости концентрации n от напряженности приложенного электрического поля. Проведено сравнение теоретической зависимости с экспериментальной кривой $n(E)$ из работы [1].

2. *Общие положения.* Ограничиваясь случаем не слишком больших электрических полей, будем полагать, что электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне описываются квазиравновесными функциями распределения $f_{\mathbf{k}}^n$ и $f_{\mathbf{k}}^p$ соответственно. Эти функции имеют фермиевский вид

$$f_{\mathbf{k}}^{n,p} = \left[\exp \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{n,p} - \zeta_{n,p}}{T_{n,p}} + 1 \right]^{-1}. \quad (1)$$

Здесь ζ_n, ζ_p — эффективные химические потенциалы, T_n, T_p — эффективные температуры электронов и дырок. Законы дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{n,p}$ электронов и дырок будем считать изотропными и параболическими с эффективными массами m_n и m_p соответственно. При низких температурах электронный газ вырожден, а дырочный не вырожден. При этом концентрации n, p электронов и дырок с достаточной степенью точности описываются выражениями

$$n = \frac{(2m_n \zeta_n)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{T_n}{\zeta_n} \right)^2 \right], \quad p = \frac{(2m_p T_p)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} e^{\zeta_p/T_p}. \quad (2)$$

В дальнейшем, следуя [3], будем полагать $T_p = T_n^1$, а также использовать условие, накладываемое на химические потенциалы [1, 3],

$$\frac{\zeta_n}{T_n} + \frac{\zeta_p}{T_p} = 0. \quad (3)$$

Для количественного описания неомического поведения БП будем использовать систему уравнений нейтральности и баланса. Уравнение нейтральности имеет вид

$$n + N_A = p + N_D, \quad (4)$$

где N_D и N_A — концентрации ионизованных доноров и акцепторов. Известно [4], что все присутствующие в БП доноры ионизованы, поэтому $N_D = \text{const}$. Уравнение баланса запишем в виде

$$en_{\mu} E^2 = P_a + P_o, \quad (5)$$

где P_a и P_o — мощности, теряемые электрон-дырочным газом при рассеянии на акустических и оптических фононах соответственно. Вычислению P_a и P_o посвящены два следующих раздела.

3. *Потери на акустических фононах.* Мощность энергетических потерь при рассеянии на фононах выражается формулой

$$P = \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \hbar \omega_{\lambda \mathbf{q}} W_{\lambda \mathbf{q}}, \quad (6)$$

в которой $W_{\lambda \mathbf{q}}$ — разность чисел излученных и поглощенных фононов с поляризацией λ и волновым вектором \mathbf{q} за единицу времени в единице объема, а $\hbar \omega_{\lambda \mathbf{q}}$ — энергия фонона. В дальнейшем будем полагать, что закон дисперсии акустических фононов линейный: $\omega_{\lambda \mathbf{q}} = s_{\lambda} q$, где s_{λ} — скорость звука. Дисперсией оптических фононов будем пренебрегать.

Рассмотрим внутризонное рассеяние на деформационном потенциале акустических фононов в вырожденной зоне Γ_8 . Тогда величина $W_{\lambda \mathbf{q}}$ выражается следующей формулой:

$$W_{\lambda \mathbf{q}} = \frac{\pi q}{\rho V^2 s_{\lambda}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', l} |\Xi_{\lambda l}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar \omega_{\lambda \mathbf{q}}) \times \\ \times \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \{ (N_{\lambda \mathbf{q}} + 1) f_{\mathbf{k}'}^l (1 - f_{\mathbf{k}}^l) - N_{\lambda \mathbf{q}} f_{\mathbf{k}}^l (1 - f_{\mathbf{k}'}^l) \}. \quad (7)$$

Здесь индекс λ нумерует продольную (L) и поперечные ($T1$ и $T2$) поляризации акустического фонона, а индекс l пробегает значения n и p . В формуле (7)

¹ Это равенство обосновано в [3] для случая, когда дырки теряют энергию только на акустических фононах. Рост энергетических потерь дырок на оптических фононах в сильных полях приводит к нарушению равенства $T_p = T_n$. Однако оценки показывают, что в рассматриваемом интервале полей различием T_n и T_p можно пренебречь.

$N_{\mathbf{q}}$ — равновесная функция распределения фононов, ρ — плотность кристалла, V — его объем. Функция $\Xi_{\lambda l}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ в изотропном приближении и при условии квазиупругого рассеяния имеет вид [5]

$$|\Xi_L|^2 = \left[\frac{1}{4} (a \pm b)^2 + \frac{9}{16} b^2 \right] - \left[\frac{3}{2} b \left(\frac{11}{4} b \pm a \right) \right] \cos \varphi + \left[\frac{3}{4} \left(a^2 - \frac{1}{4} b^2 \right) \right] \cos^2 \varphi, \quad (8)$$

$$|\Xi_{T_1}|^2 + |\Xi_{T_2}|^2 = \frac{9}{16} b^2 \sin^2 \varphi, \quad (9)$$

где $\varphi \equiv \widehat{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ — угол рассеяния, a и b — константы деформационного потенциала.

Верхний знак в (8) относится к зоне проводимости, а нижний — к зоне тяжелых дырок. Подставим (7) в (6) и перейдем от суммирования к интегрированию в квазиупругом приближении, учитывая (8) и (9). Ввиду сильного различия эффективных масс электронов и дырок подавляющий вклад в мощность энергетических потерь на акустических фононах происходит от дырок ($l=p$). Для мощности потерь получаем следующую формулу:

$$P_a = p \frac{\delta \sqrt{2} m_p^{5/2} T_p^{1/2}}{\pi^{3/2} \hbar^4 \rho} \left[\frac{1}{2} a^2 - ab + \frac{5}{4} b^2 \right] (T_p - T_0). \quad (10)$$

Здесь T_0 — температура решетки, а множитель в квадратных скобках имеет смысл эффективной деформационной константы.

4. *Потери на оптических фононах.* Рассмотрим случай, когда концентрация электронов в зоне проводимости не слишком высока, так что выполняется неравенство $\zeta_n \ll \hbar \omega_0$, где $\hbar \omega_0$ — энергия продольного оптического фонона. Легко убедиться, что при этом частота межзонного рассеяния электронов на оптических фононах намного превосходит частоту внутризонного рассеяния. При межзонном рассеянии волновые векторы поглощенных и излученных фононов лежат в сравнительно узкой области:

$$|\mathbf{q}| < k_0 \equiv \sqrt{\frac{2\omega_0}{\hbar} (m_p + m_n)}. \quad (11)$$

Если с оптическими фононами взаимодействуют горячие электроны, то частота излучения фононов намного превосходит частоту поглощения. Избыточные излученные фононы должны покинуть область (11). Оказывается, однако (см. далее), что частота ухода оптических фононов из области (11) гораздо меньше, чем частота генерации этих фононов горячими электронами. Поэтому продольные оптические фононы с волновыми векторами $|\mathbf{q}| < k_0$ «разогреваются» до температуры T_1 , близкой к температуре электронов.

Неравновесную функцию распределения $N_{\mathbf{q}}^0$ продольных оптических фононов можно представить в виде

$$N_{\mathbf{q}}^0 = \begin{cases} [\exp(\hbar\omega_0/T_1) - 1]^{-1}, & |\mathbf{q}| < k_0, \\ [\exp(\hbar\omega_0/T_0) - 1]^{-1}, & |\mathbf{q}| > k_0. \end{cases} \quad (12)$$

Вычислим мощность, передаваемую электронами оптическим фононам в процессе межзонного рассеяния. Она выражается формулой

$$P_0 = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar \omega_0^2}{V^2 x^*} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \frac{I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}}}{q^2} \delta(\epsilon_{\mathbf{k}}^* + \epsilon_{\mathbf{k}'}^* - \hbar\omega_0) \times \times \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}', \mathbf{q}} \{ (N_{\mathbf{q}}^0 + 1) f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^* f_{\mathbf{k}}^* - N_{\mathbf{q}}^0 (1 - f_{\mathbf{k}}^*) (1 - f_{\mathbf{k}'}^*) \}, \quad (13)$$

где $x^{*-1} = \kappa_{\infty}^{-1} - \kappa_0^{-1}$, а κ_0 и κ_{∞} — статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости кристалла соответственно. В выражении (13) $I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{q}} = 3/4 \sin^2 \varphi$ — квадрат модуля интеграла перекрытия электронных состояний, участвующих

в переходе. Переходя в (13) от суммирования к интегрированию и интегрируя с учетом (12), получим

$$P_0 = \frac{e^2 \omega_0^3 m_p^{3/2} m^{1/2}}{2\pi \hbar^2 v^*} (e^{-\hbar\omega_0/T_n} - e^{-\hbar\omega_0/T_0}). \quad (14)$$

В условиях равновесия мощность (14) должна быть равна мощности, отводимой из области (11). Для вычисления последней необходимо рассмотреть все элементарные процессы, приводящие к уходу фононов из области (11), и выделить из них наиболее «быстрые». Согласно оценкам, таким процессом является распад продольного оптического фонона из области (11) на поперечный оптический и акустический фононы. Мощность, отводимую из области (11) в результате таких процессов, можно выразить формулой (см. [6])

$$P_0 = 2 \sum_{\substack{\lambda, \mathbf{q}', \mathbf{q}'' \\ |\mathbf{q}| < k_0}} \frac{2\pi v}{V^2 \omega_T s_\lambda q'} |\Omega|^2 \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_T - \hbar s_\lambda q') \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'+\mathbf{q}''} \times \\ \times \{N_{\mathbf{q}}^0 (N_{\mathbf{q}'} + 1) (N_{\mathbf{q}''} + 1) - (N_{\mathbf{q}}^0 + 1) N_{\mathbf{q}'} N_{\mathbf{q}''}\}, \quad (15)$$

в которой v — объем ячейки, ω_T — частота поперечного оптического фонона, \mathbf{q} , \mathbf{q}' и \mathbf{q}'' — волновые векторы распадающегося, излученного акустического и излученного оптического фононов соответственно. Множитель 2 перед знаком суммы в (15) возникает от суммирования по поперечным оптическим ветвям, а суммирование по акустическим ветвям учитывается индексом λ . Что касается величины Ω , то ее вычисление представляет собой сложную задачу, для решения которой необходимо знать по крайней мере силы взаимодействия атомов в кристалле. Вычисление Ω осложняется еще и тем, что оба излученных в рассматриваемом процессе фонона не являются длинноволновыми. Однако можно ожидать, что по порядку величины

$$|\Omega|^2 \sim \hbar^2 \omega_0^3 / M a_0^2, \quad (16)$$

где M — суммарная масса атомов в ячейке, a_0 — постоянная решетки. Подставляя (16) в (15) и производя вычисления, получим

$$P_0 \simeq \frac{\hbar^2 (\omega_0 - \omega_T) \omega_0^3 \omega_0^3}{\pi^3 s^3 \rho a_0^2} (e^{-\hbar\omega_0/T_1} - e^{-\hbar\omega_0/T_0}), \quad (17)$$

где $s^{-3} = 1/3 (s_L^{-3} + 2s_T^{-3})$. Приравнявая (14) и (17) и производя оценки,² легко найти $T_1 \simeq T_n$. Таким образом, «узким горлом» процесса передачи энергии электронов решетке через оптические фононы является отвод энергии из «горячей» области (11). В этих условиях мощность энергетических потерь на оптических фононах выражается формулой (17), в которой необходимо положить $T_1 = T_n$.

5. *Зависимость $n(E)$.* Применим полученные результаты для нахождения полевой зависимости концентрации электронов проводимости в HgTe. Подставляя выражения (2), (10), (17) в уравнения (4) и (5), а также учитывая равенства $T_n = T_p = T_1$ и условие (3), выпишем систему (4), (5) в виде

$$\frac{(2m_n T_0)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \Theta^{3/2} \eta^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8\eta^2}\right) = N_D + \frac{(2m_p T_0)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} \Theta^{3/2} e^{-\eta}, \quad (18)$$

$$e_{\mu} E^2 \frac{(2m_n T_0)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \Theta^{3/2} \eta^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8\eta^2}\right) = \frac{\hbar^2 (\omega_0 - \omega_T) \omega_0^3 \omega_0^3}{\pi^3 s^3 \rho a_0^2} e^{-\hbar\omega_0/T_0} \Theta + \\ + \frac{8m_p^2 T_0^3}{\pi^3 \hbar^2 \rho} \left[\frac{1}{2} a^2 - ab + \frac{5}{4} b^2\right] e^{-\eta} \Theta^2 (\Theta - 1), \quad (19)$$

где все переменные величины, характеризующие электрон-дырочный газ, выражены через два безразмерных параметра — приведенный химический потенциал $\eta \equiv \zeta_n / T_n$ и перегрев $\Theta \equiv T_n / T_0$. Наличие акцепторов не учитываем, $N_A = 0$.

Система (18), (19) позволяет рассчитывать зависимость от поля величин η и Θ (а следовательно, n и p). Концентрация доноров N_D определяется по известному

² Значения материальных параметров HgTe, используемые при оценках, см. в следующем разделе.

из экспериментальной значению концентрации n_0 электронов в отсутствие поля. Подвижность μ также предполагается известной из эксперимента. На рис. 1 показана зависимость $n(E)$ для HgTe, построенная на основании численного решения системы (18), (19). Использовались следующие численные значения параметров HgTe: $\hbar\omega_0 \approx 17$ мэВ, $\hbar\omega_T \approx 15$ мэВ, $a_0 = 6.5 \cdot 10^{-8}$ см, $s_L = 2.8 \cdot 10^5$ см/с, $s_T = 1.6 \cdot 10^5$ см/с, $\rho = 8.1$ г/см³, $a \approx 2.7$ эВ, $b \approx -1.3$ эВ, $x_0 \approx 20$, $x_\infty \approx 15$, $m_n = 0.03m_0$, $m_p \approx 0.5m_0$ (m_0 — масса свободного электрона) [7]. Значения $n_0 = 2 \cdot 10^{15}$ см⁻³, $\mu \approx 10^5$ см²/В·с, $T_0 = 4.2$ К взяты из эксперимента [1].

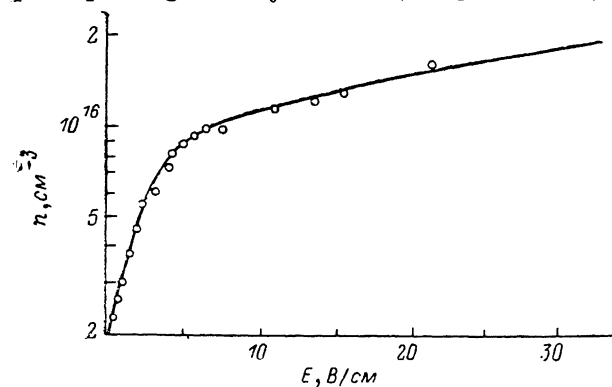


Рис. 1. Зависимость концентрации электронов проводимости от приложенного поля для HgTe.

Сплошная линия — теория, экспериментальные точки — из работы [1].

При малых полях $E < 5$ В/см преобладает механизм энергетических потерь на акустических фоновых, а при $E > 5$ В/см более существенными становятся потери на оптических фоновых и наклон кривой $n(E)$ резко изменяется. На рис. 2 показана зависимость перегрева θ от поля. Видно, что «включение» механизма потерь на оптических фоновых происходит при $T_n \approx 17$ К ($\theta \approx 4$).

На рис. 1 нанесены также экспериментальные точки, взятые из работы [1]. Видно, что теория хорошо согласуется с экспериментом. Согласие имеет место и при больших полях, когда существенными являются

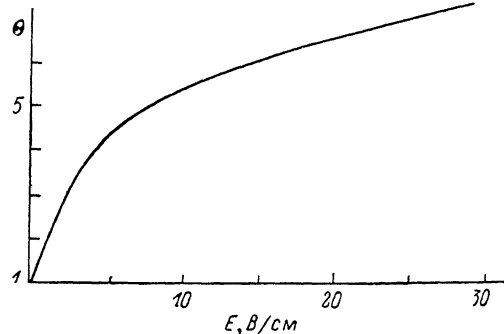


Рис. 2. Зависимость электронного перегрева $\theta = T_n/T_0$ от приложенного поля.

ся потери на оптических фоновых, несмотря на то что предэкспоненциальный множитель в формуле (17), выражающей мощность этих потерь, оценивался вместе с Ω лишь по порядку величины. Полученное количественное согласие теории и эксперимента в этой области полей является отчасти случайным, а отчасти обусловленным тем, что концентрация n слабо (логарифмически) зависит от указанного множителя.

В заключение обратим внимание на то, что изложенные в настоящей работе теоретические соображения могут стать основой экспериментального метода, содержание которого состоит в использовании измеренной в БП зависимости $n(E)$ для более точного определения величины Ω , характеризующей фоновый фоновый взаимодействие.

Л и т е р а т у р а

- [1] Бенеславский С. Д., Иванов-Омский В. И., Коломиец Б. Т., Смирнов В. А. — ФТТ, 1974, т. 16, в. 6, с. 1620—1629.
- [2] Иванов-Омский В. И., Коломиец Б. Т., Смирнов В. А. — ФТП, 1974, т. 8, в. 3, с. 620—621.
- [3] Михеев В. М., Поморцев Р. В. — ФТП, 1977, т. 11, в. 5, с. 908—913.
- [4] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. — ЖЭТФ, 1972, т. 62, в. 2, с. 713—724.
- [5] Бир Г. Л., Нормантас Э., Пякус Г. Е. — ФТТ, 1962, т. 4, в. 5, с. 1180—1195.
- [6] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М., 1979. 527 с.
- [7] Dubowski J. J., Dietl T., Szymanska W., Galazka R. R. — J. Phys. Chem. Sol., 1981, v. 42, N 5, p. 351—362.