

УДК 621.315.592

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЙ ПЕРЕНОСА ГОРЯЧИХ ДЫРОК КРЕМНИЯ В $E \parallel H$ ПОЛЯХ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Додин Е. П., Красильник З. Ф.

Исследуются статическая и динамическая проводимости горячих дырок кремния в продольных электрическом и магнитном полях. Обсуждается возможность достижения инверсии тяжелых дырок с отрицательными массами и связанной с ней отрицательной дифференциальной проводимости.

Физические явления, обусловленные протеканием тока в  $p\text{-Si}$  в сильных электрических и магнитных полях, остаются недостаточно изученными в теоретическом плане прежде всего из-за сложности закона дисперсии, сильная непараболичность и анизотропия которого затрудняют аналитическое решение уравнения Больцмана и определение на его основе кинетических характеристик дырок. Интерес к кинетическим характеристикам горячих носителей в  $p\text{-Si}$  связан с возможными перспективами использования этого материала для полупроводниковых мазеров и лазеров на горячих дырках, реализованных в настоящее время на  $p\text{-Ge}$  [1, 2]. Действенным методом, позволяющим детально учесть особенности динамики и процессов рассеяния носителей в сложной зоне в сильных  $E, H$  полях, является численное статистическое моделирование, все шире используемое в физике полупроводников. Впервые этот метод был применен для  $p\text{-Si}$  в работе [3], в последующие годы появилось еще несколько работ, касающихся отдельных аспектов горячих носителей в  $p\text{-Si}$  [2, 4-7]. В работе [3], как и в ряде последующих, при моделировании использовались упрощающие предположения о характере закона дисперсии, о процессах рассеяния, искажавшие кинетические характеристики, чувствительные к резонансам (циклотронному, пролетному, . . .), к отдельным деталям функции распределения (анизотропии, инверсии). В данной работе излагаются процедура и результаты одночастичного моделирования методом Монте-Карло кинетических характеристик тяжелых дырок кремния<sup>1</sup> (основных носителей) в сильных  $E \parallel H$  полях<sup>2</sup> без таких предположений.

### 1. Закон дисперсии и эффективные массы

Закон дисперсии дырок кремния в области энергий  $\varepsilon \leq \hbar\omega_0$  ( $\hbar\omega_0 = 63.4$  мэВ — энергия оптического фонона), где в основном сосредоточена функция распределения горячих дырок, характеризуется значительной анизотропией и непараболичностью [8], причем непараболичность наиболее существенна при  $\varepsilon \sim \Delta/3$  ( $\Delta = 44$  мэВ — энергия спин-орбитального расщепления). При  $\varepsilon \ll \Delta/3$  и  $\varepsilon \gg \Delta/3$  анизотропия закона дисперсии различна: так, в области малых энергий эффективная масса тяжелых дырок максимальна в кристаллографическом направлении типа [111], а в области больших энергий — в направ-

<sup>1</sup> Вклад легких дырок в исследуемые явления обсуждается в случаях, когда он существен.

<sup>2</sup> Явления переноса и высокочастотные свойства  $p\text{-Si}$  в  $E \perp H$  полях см. в [2, 6, 7].

лени типа [110], эффективные массы легких дырок в этих направлениях соответственно минимальные. Секулярное кубическое уравнение для энергетического спектра дырок из работы [8] громоздко. На его разрешение в процедуре численного моделирования расходуется значительная доля машинного времени. В целях ускорения процедуры использовалось приближенное аналитическое выражение для закона дисперсии, построенное на основе работы [9],

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \frac{\Delta}{3} + \frac{p^2}{2m_0} [A - (B^2 + C^2\mu)^{1/2}] - \left[ \xi (3D)^2 (\mu^2 - 3q) \left( \frac{p^2}{2m_0} \right)^2 + \left( \frac{\Delta}{3} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (1)$$

где  $\mu = (p_x^2 p_y^2 + p_y^2 p_z^2 + p_z^2 p_x^2) / p^4$ ,  $q = p_x^2 p_y^2 p_z^2 / p^6$ ,  $A, B, C$  — зонные параметры ( $A = 4.27$ ,  $B = 0.63$ ,  $C = 5.03$ ),  $D = B - (B^2 + C^2/3)^{1/2}$ ,  $\xi = 0.79$  — подгоночный параметр. Энергия, определенная таким образом, отличается от «точного» значения, следующего из секулярного уравнения работы [8], не более чем на 10 % во всей области энергий  $\epsilon < 3\hbar\omega_0$ . Заметим, что к куда большим расхождениям в определении  $\epsilon(\mathbf{p})$  приводит существующий в литературе разброс данных о параметрах  $A, B, C$ .

## 2. Моделирование

Процедура численного моделирования явлений переноса тяжелых дырок включает в себя вычисление траектории свободного движения частицы во внешних полях  $\dot{\mathbf{p}} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c} \left[ \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{H} \right]$  и статистического розыгрыша актов внутрizonного

(в однозонном приближении) рассеяния на акустических и оптических фононах (примесным рассеянием в данной работе пренебрегали, полагая, что образец достаточно слабо легирован) [1]. Соответствующие плотности вероятностей перехода дырок из состояния  $\mathbf{p}$  до акта рассеяния в состояние  $\mathbf{p}'$  после акта рассеяния имеют вид

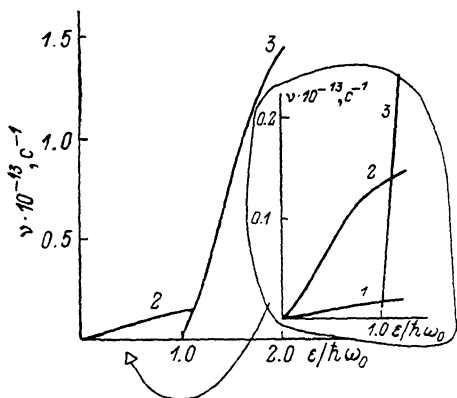


Рис. 1. Зависимость частот рассеяния тяжелых дырок кремния на акустических  $\nu_a$  (1, 2) и оптических  $\nu_o$  (3) фононах от энергии.

Т, К: 1 — 10, 2 — 77.

$$W_i(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} A_i \delta[\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon'(\mathbf{p}')], \quad (2)$$

где

$$A_i = A_o = \frac{\hbar (D_i K)^2}{2\rho\omega_0 V} \left\{ \frac{N_o}{N_o + 1} \right\}, \quad \epsilon'(\mathbf{p}') = \epsilon(\mathbf{p}') \pm \hbar\omega_0$$

для оптического рассеяния и

$$A_i = A_a = \frac{\kappa T E_{1s}^2}{2(2\pi)^2 \hbar \rho s^2}, \quad \epsilon'(\mathbf{p}') = \epsilon(\mathbf{p}')$$

для акустического рассеяния равномерно распределенных фононов. Здесь  $^3(D_i K) = 6 \cdot 10^8$  эВ/см — константа деформационного потенциала,  $\rho = 2.33$  г/см<sup>3</sup> — удельная плотность,  $\omega_0 = 9.6 \cdot 10^{13}$  с<sup>-1</sup> — характерная частота оптического фонона,  $V$  — объем кристалла,  $E_{1s} = 5$  эВ — константа акустического взаимодействия,  $s = 6.76 \cdot 10^5$  см/с — скорость звука,  $\kappa$  — константа Больцмана,  $T$  — температура решетки,  $N_o = \exp[(\hbar\omega_0/\kappa T) - 1]^{-1}$  — распределение Бозе—Эйнштейна. На рис. 1 представлены интегральные вероятности рассеяния тяжелых дырок на акустических и оптических фононах, полученные в результате численного интегрирования (2) с учетом непараболичности и анизотропии  $\epsilon(\mathbf{p})$ . Акустическое и оптическое рассеяния пропорциональны  $m_d^{3/2}(\epsilon)\epsilon^{1/2}$  и  $m_d^{3/2}(\epsilon - \hbar\omega_0)(\epsilon - \hbar\omega_0)^{3/2}$

<sup>3</sup> Приведенные далее параметры взяты из [3].

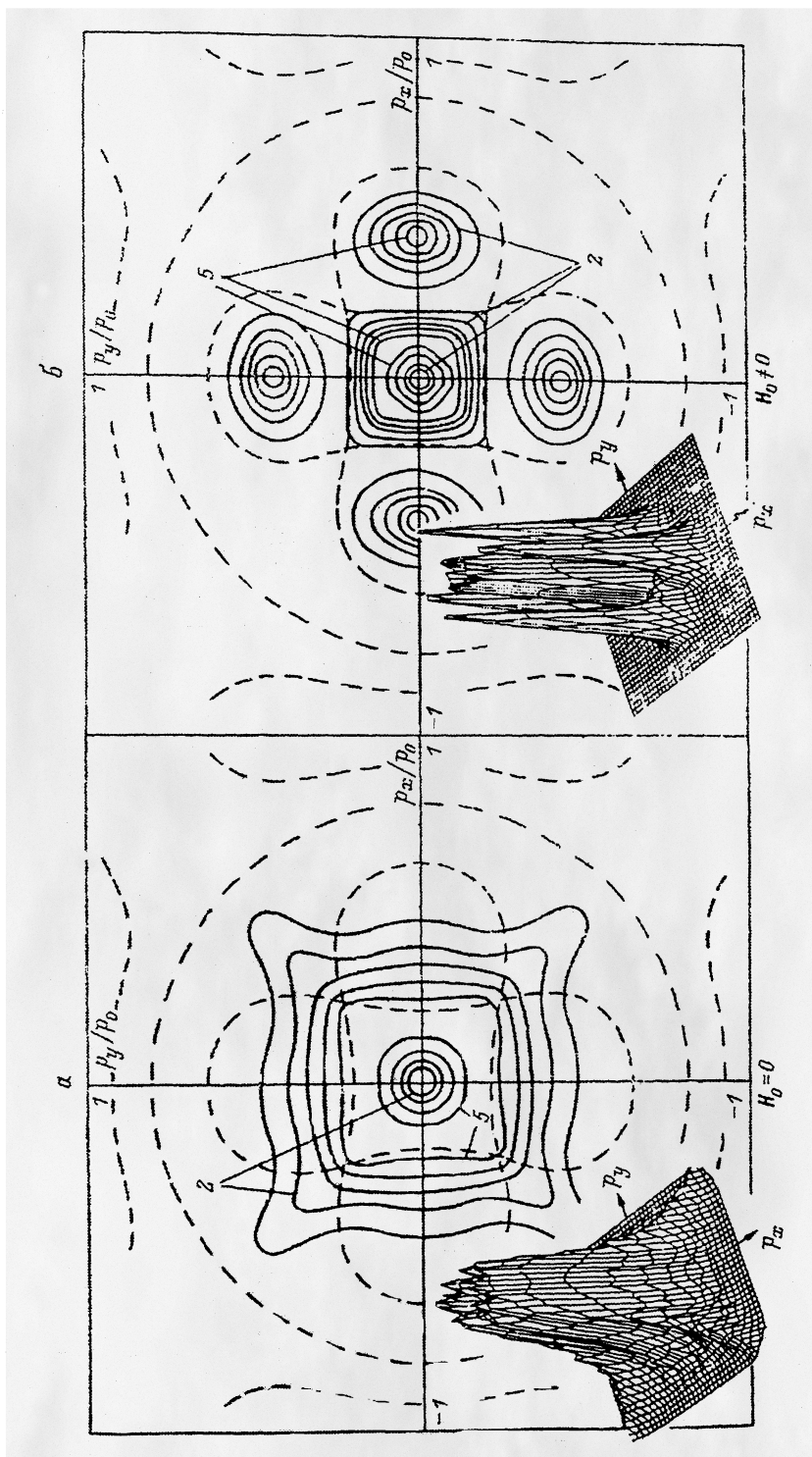


Рис. 2. Функции распределения тяжелых дырок кремния при  $T=6$  К, рассчитанные методом Монто-Карло.

$a$  —  $E=750$  В/см,  $H_0=0$ ;  $b$  —  $E=750$  В/см,  $H_0=50$  кЭ. На  $a, b$  приведены уровни  $f=\text{const}$  в одном из сечений пространства импульсов  $p_x=0.5p_0$ .  $f: 5 - 0.95$ ,  $4 - 0.8$ ,  $3 - 0.6$ ,  $2 - 0.4$ ,  $1 - 0.2$ . Номера уровней уменьшаются последовательно по мере удаления от  $b$  к  $2$  ( $4, 3, 1$  на рисунке не показаны). На вставках при ведены изометрические картины  $f(p_x, p_y)$ .

соответственно, причем масса плотности состояний  $m_{\tau}$  растет с энергией. При разогреве дырок сильным электрическим полем в интересующих нас условиях преимущественного рассеяния на оптических фононах

$$\nu_a \ll \omega_E \ll \nu_0 \quad (3)$$

[здесь  $\nu_a$ ,  $\nu_0$  — характерные частоты акустического и оптического рассеяния,  $\omega_E = eE/p_0$ ,  $p_0 = (2\hbar\omega_0 m_{\tau})^{1/2}$ ,  $m_{\tau}$  — эффективная масса тяжелых дырок в направлении дрейфа] проникновение дырок в область энергий  $\epsilon > \hbar\omega_0$  незначительно. Из-за непараболичности и анизотропии тяжелой подзоны кремния при акустическом рассеянии дырок с энергией  $\epsilon \sim \hbar\omega_0$  масса плотности конечных состояний близка к максимальному значению  $\sim 1.5 m_0$ , а при оптическом рассеянии — к минимальному  $\sim 0.5 m_0$ . Это столь существенно сказывается на частотах рассеяния, что неравенство (3) оказывается трудно выполнимым даже при очень низких температурах релаксации.

### 3. Функция распределения

В сильных электрических полях в условиях преимущественно неупругого рассеяния дырок на оптических фононах (3) формируется вытянутая вдоль поля  $E$  функция распределения — стриминг [10]. Проводимость полупроводника при стриминге падает с полем  $\sigma \simeq e^2 N / m \omega_E \sim 1/E$  ( $N$  — концентрация дырок), а дрейфовая скорость  $v_d \simeq eE / m \omega_E$  насыщается.

Как следует из результатов численного моделирования дрейфовой скорости тяжелых дырок кремния методом Монте-Карло, из-за невыполнимости условия (3)  $v_d$  монотонно растет с ростом  $E$  и ни при каких значениях поля  $E$  не насыщается в отличие от аналогичной характеристики  $p$ -Ge.

Вклад легких дырок в полный ток  $j = e(N_{\tau} v_{d,\tau} + N_{\lambda} v_{d,\lambda})$  незначителен, так как концентрация их мала и составляет  $N_{\lambda} \simeq (m_{d,\lambda} / m_{d,\tau})^2 N_{\tau} \simeq 0.018 N_{\tau}$ , а скорость дрейфа лишь в  $(m_{\tau} / m_{\lambda})^{1/2} \simeq 1.6$  раза превышает скорость дрейфа последних<sup>4</sup> [здесь  $(m_{d,\lambda})_{\tau}$  — массы плотности состояний легких и тяжелых дырок,  $m_{\lambda,\tau}$  — эффективные массы в направлении дрейфа]. Оценки выполнены для достаточно сильных электрических полей, при которых рассеяние дырок на оптических фононах происходит преимущественно в области энергий  $\epsilon > \hbar\omega_0 + \Delta/3$ .

Характерный вид функции распределения тяжелых дырок кремния в сильных электрических полях изображен на рис. 2, а. Функция смещена в пространстве импульсов вдоль  $\hat{p}_z$  ( $\hat{p}_z \parallel E \parallel [001]$ ), ее симметрия относительно оси  $\hat{p}_z$  отражает симметрию 4-го порядка закона дисперсии. Особенностью распределения горячих тяжелых дырок при дрейфе в кристаллографическом направлении типа [001] является инвертированное распределение части дырок с отрицательными поперечными (к направлению  $\hat{p}_z$ ) эффективными массами в той области пространства импульсов, в которой по мере удаления от оси  $\hat{p}_z$  одновременно падает энергия и число дырок с данной энергией  $-(\partial f / \partial \epsilon)_{\parallel \hat{p}_z} > 0$ . Такие дырки способны усиливать электрическое поле  $E_{\perp} \perp E$ , но, как показывают соответствующие расчеты, в кремнии трудно реализовать условия, при которых это усиление превышало бы поглощение, вносимое остальными дырками<sup>5</sup> (ср. с аналогичной проводимостью  $p$ -Ge [11]).

### 4. Многопучковый стриминг и продольное магнитосопротивление

Магнитное поле  $H \parallel [001]$  существенно меняет характер стриминга (рис. 2, б), приводит к его развалу в пространстве импульсов на несколько пучков. Такой развал возникает из-за наличия нескольких конусов циклотронного

<sup>4</sup> О соотношении концентраций и скоростей легких и тяжелых дырок при стриминге см., например, в [10].

<sup>5</sup> Отрицательная проводимость  $p$ -Si подобного типа возможна в тонких пленках кремния при баллистическом дрейфе [5].

вращения (области I—III на вставке к рис. 3). Число конусов и знаки циклотронных масс зависят от кристаллографической ориентации поля  $H$ . Так, при  $H \parallel [011]$  таких конусов два в области энергий  $\epsilon < V/3$  и три — при  $\epsilon > \Delta/3$ , причем знаки циклотронных масс везде положительны. При  $H \parallel [001]$  имеется три типа конусов в области как малых, так и больших энергий (оси конусов II близки к направлениям типа  $[111]$  при  $\epsilon < \Delta/3$  и типа  $[110]$  — при  $\epsilon > \Delta/3$ ), знак циклотронной массы внутри конуса I отрицателен. В достаточно сильном магнитном поле, когда на периоде циклотронного вращения изменение угловой скорости из-за сноса дырки полем  $E$  незначительно, дырки дрейфуют вдоль осей конусов, сохраняя площадь орбиты — адиабатически инвариант-

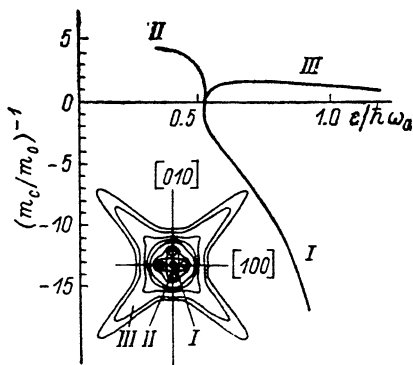


Рис. 3. Три ветви (I—III) циклотронных масс в одном из сечений фазового пространства  $p_x = 0.5p_0$ ,  $H \parallel [001]$ , соответствующие различным траекториям циклотронного вращения (см. вставку). I — дырки с отрицательными циклотронными массами.

ную величину. При не очень сильном рассеянии носителей это приводит к накоплению дырок вдоль осей конусов циклотронного вращения и формированию многопучкового стриминга [12].

Скорость дрейфа дырок с энергией  $\epsilon \sim \hbar\omega_0$  в направлении поля  $E \parallel [001]$  на осях циклотронных конусов типа II (см. вставку на рис. 3) почти в 4 раза

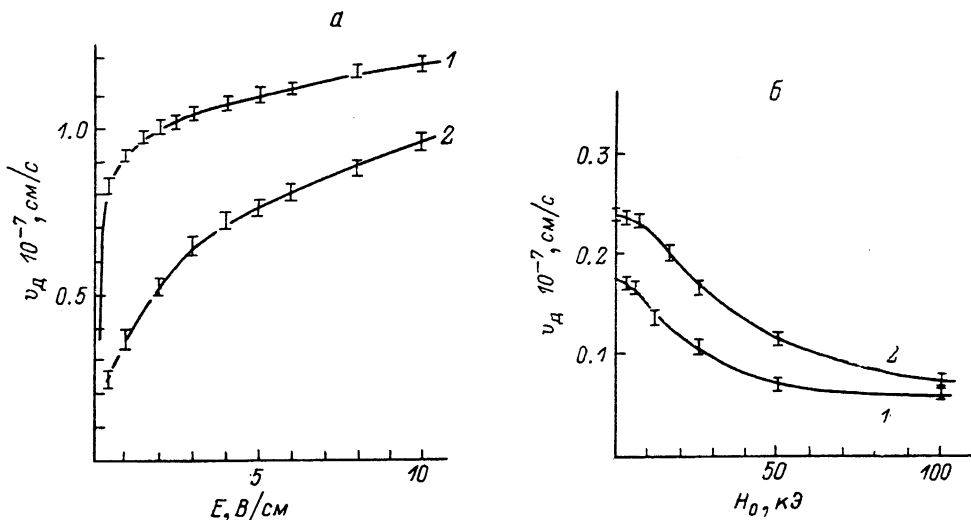


Рис. 4. Зависимости скорости дрейфа тяжелых дырок кремния от электрического и магнитного полей, рассчитанные методом Монте-Карло;  $E \parallel H \parallel [001]$  (метками на кривых указана точность счета).

а)  $T, K$ : 1 — 6, 2 — 77; б) 1 — 1, 2 — 1.8 кВ/см;  $T = 77 K$ .

меньше, чем дрейфовая скорость дырок с той же энергией на оси конуса I. Поэтому «перекачивание» дырок магнитным полем из центрального пучка в боковые приводит к аномально большому продольному магнитному сопротивлению (рис. 4) (ср. с магнитосопротивлением равновесных дырок кремния [13]). Вкладом легких дырок в магнитосопротивление можно пренебречь, так как гофрировка легкой подзоны не столь существенна, а концентрация, как отмечалось выше, значительно меньше, чем концентрация тяжелых дырок.

## 5. Циклотронный резонанс (ЦР) и отрицательная дифференциальная проводимость (ОДП)

ЦР равновесных тяжелых дырок кремния обусловлен резонансным поглощением электромагнитной волны «дырочной» круговой поляризации дырками из области III (рис. 3) с циклотронной массой  $m_c \approx 0.5 m_0$  при  $T = 4$  К [14]. Накопление дырок в боковых конусах типа II в условиях многопучкового стриминга приводит к появлению новой линии ЦР дырок с массой  $m_c \approx 0.2 \div 0.3 m_0$ , причем при низких температурах эта линия оказывается доминирующей (рис. 5). Дырки с отрицательной циклотронной массой (ОЦМ) (рис. 3, конус I) резонансны с электромагнитной волной «электронной» круговой поляризации. Как видно из рис. 2, б, в распределении таких дырок имеется инверсия. С подобного рода инверсией связаны ОДП и генерация электромагнитного излучения в мазере на ЦР тяжелых дырок германия с ОЦМ [11]. Для достижения ОДП на ЦР необходимо накопление достаточно большого числа дырок  $N^-$  в конусе ОЦМ. При низких температурах (12 К) превышение неравновесной концентрации дырок с ОЦМ  $N^-$  над равновесным значением  $N_0^-$  максимально в полях  $E \approx 750 \div 1000$  В/см и составляет  $N^-/N_0^- \approx 1.5$  (в  $p$ -Ge соответственно  $N^-/N_0^- \approx 4.3$  при  $E = 100$  В/см). При 77 К накопление горячих дырок с ОЦМ в кремнии практически от-

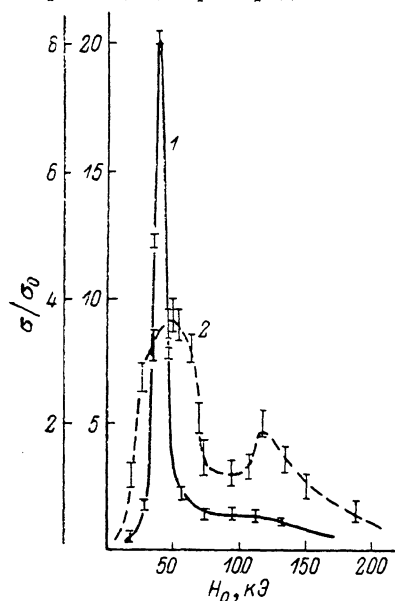


Рис. 5. Циклотронное поглощение тяжелых дырок кремния в сильных электрических полях  $E \parallel H \parallel [100]$ , полученное прямым моделированием переменного тока в поле  $E_1 \perp E$  круговой «дырочной» поляризации частоты  $\omega = \nu_0 = 3.5 \cdot 10^{12}$  с $^{-1}$ .

$E_1 = 200$ ,  $E = 1000$  В/см,  $\sigma_0 = e^2 N / m_0 \nu_0$ ,  $T$ , К: 1 (правая шкала) — 6, 2 (левая шкала) — 77.

сутствует (в  $p$ -Ge  $N^-/N_0^- \approx 3$  при  $E = 1000$  В/см). Более слабое, чем в  $p$ -Ge, накопление дырок с ОЦМ в  $p$ -Si связано как с особенностями анизотропии и непараболичности тяжелой валентной подзоны Si (фазовый объем конуса ОЦМ падает с ростом  $\epsilon$  от 10 % при  $\epsilon \ll \Delta/3$  до 2.5 % при  $\epsilon \sim \hbar\omega_0$ , в то время как в  $p$ -Ge он практически не зависит от  $\epsilon$  и составляет  $\sim 6$  %), так и со сложностями формирования стриминга из-за относительно сильного акустического рассеяния (см. разделы 2, 3).

Линия ЦР дырок с ОЦМ рассчитывалась путем прямого моделирования высокочастотного тока в переменном электрическом поле  $E_1 \perp E$ . Пик линии ЦР в полях  $E \sim 500$  В/см приходится на дырки с массой  $m_c \approx 0.25 m_0$ , а знак поглощения отрицательный для полей  $E \leq 1.8 \cdot 10^3$  В/см, если учитывать один механизм рассеяния — на оптических фонах. Учет акустического рассеяния даже при низких температурах решетки ( $T \approx 6$  К) приводит к значительному уширению функции распределения и, как следствие, к резкому сужению области ОДП. Абсолютное значение отрицательной проводимости при этом того же порядка, что и уровень флуктуаций, имеющих место в процессе прямого моделирования тока, наведенного переменным электрическим полем  $E_1$  конечной амплитуды.

Таким образом, можно сделать следующее заключение.

Исследования кинетических явлений горячих дырок кремния методом Монте-Карло пока далеки по своей полноте от уровня аналогичных исследований германия — материала с более простой энергетической зоной; они нуждаются в дальнейшем развитии. С одной стороны, это уточнение модели, связанное с учетом примесного механизма рассеяния, рассеяния на нулевых акустических колебаниях, межподзонных переходов, с другой — совершенствование самого

метода Монте-Карло с целью определения динамических линейных характеристик не только путем прямого моделирования, но и через статическую функцию распределения [15]. Последнее позволило бы значительно ускорить процедуру моделирования и снизить уровень флуктуаций (см. раздел 5).

Сопоставление детальных расчетов гальваномангнитных характеристик, циклотронных частот горячих дырок кремния, более чувствительных к значениям зонных параметров, чем характеристики равновесных носителей, с данными эксперимента позволило бы уточнить значения этих параметров.

Развитую и апробированную на кремнии процедуру моделирования процессов переноса носителей заряда в сильных электрическом и магнитном полях можно было бы применить к полупроводниковым соединениям *p*-типа элементов III группы таблицы Менделеева и фосфора — материалам со схожим с кремнием законом дисперсии, но отличающимся более сильной связью с оптическим фононом.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Сб. ст. полупроводниковые лазеры на циклотронном резонансе. Горький, 1986. 175 с.
- [2] Андронов А. А., Мазов Л. С., Митягин Ю. А. и др. Субмиллиметровые лазеры на горячих дырках в полупроводниках. Горький, 1986. 185 с.
- [3] Ottaviani G., Reggiani L., Canali C., Nava F., Alberigi-Quaranta A. // *Phys. Rev. B*. 1975. V. 12. N 8. P. 3318—3328.
- [4] Jacoboni C., Reggiani L. // *Rev. Mod. Phys.* 1983. V. 55. N 3. P. 645—705.
- [5] Pozela Y. K., Starikov E. V., Shiktorov P. N. // *Physica*. 1985. V. 134B. P. 223—227. Стариков Е. В., Шикторов П. Н. // Взаимодействие электромагнитных волн с полупроводниками и полупроводниково-диэлектрическими структурами и проблемы создания интегральных КВЧ схем. Саратов, 1985. Ч. 2. С. 105—106.
- [6] Стариков Е. В., Шикторов П. Н. // Тез. докл. XIII Всес. совещ. по теории полупроводников. Ереван, 1987. С. 240.
- [7] Гавриленко В. И., Додин Е. П., Красильник З. Ф., Чернобровцева М. Д. // *ФТП*. 1987. Т. 21. В. 3. С. 484—488.
- [8] Kane E. O. // *J. Phys. Chem. Sol.* 1956. V. 1. N 1/2. P. 82—89.
- [9] Штивельман К. Я. // *ФТТ*. 1960. Т. 2. В. 3. С. 499—501. 1960. Т. 2. В. 4. С. 644—650.
- [10] Валов В. А., Козлов В. А., Мазов Л. С., Нефедов И. М. // Горячие электроны в полупроводниках: стриминг и анизотропные распределения в скрещенных полях. Горький, 1983. С. 5—43.
- [11] Андронов А. А., Белянцев А. М., Гавриленко В. И., Додин Е. П., Красильник З. Ф., Никоноров В. В., Павлов С. А., Шварц М. М. // *ЖЭТФ*. 1986. Т. 90. В. 1. С. 367—385.
- [12] Андронов А. А., Додин Е. П., Красильник З. Ф. // *Письма ЖЭТФ*. 1986. Т. 43. В. 8. С. 373—376.
- [13] Зеегер К. *Физика полупроводников*. М., 1977. 615 с.
- [14] Dersselhaus G., Kip A. F., Kittel C. // *Phys. Rev.* 1955. V. 98. N 2. P. 368—384.
- [15] Стариков Е. В., Шикторов П. Н. // *ФТП*. 1988. Т. 22. В. 1. С. 72—78.

Институт прикладной физики АН СССР  
Горький

Получена 11.02.1988  
Принята к печати 21.09.1988