Нелинейные волны взаимодействующих носителей заряда в полупроводниках

© В.Е. Степанов

Сибирский физико-технический институт,
634050 Томск, Россия

(Получена 2 февраля 1998 г. Принята к печати 29 апреля 1998 г.)

Теоретически обнаружено проявление эффектов неидеальности носителей заряда в полупроводниках, учитываемых через уравнение состояния в рамках гидродинамического приближения. Нелинейные члены по плотности в уравнении состояния, обусловленные неидеальностью, приводят к существованию уединенных и периодических волн для возмущений плотности носителей заряда.

Модель идеального газа для носителей заряда полупроводников как в равновесных, так и в неравновесных явлениях является доминирующей. Такие представления естественно основываются на малой величине средней потенциальной энергии $\langle V \rangle = e^2 n^{1/3}/\varepsilon$ (n — плотность, ε — диэлектрическая проницаемость) в сравнении со средней кинетической энергией $\langle T \rangle$. Для классического газа $\langle T \rangle = kT$ и для квантового (вырожденного) газа $\langle T \rangle = (3/5)[(3\pi)^2\hbar^2 n^{2/3}/2m^*]$ (m^* — эффективная масса), поэтому критерий идеальности имеет место только в области низкой плотности носителей заряда для классического газа и только в области высокой плотности для квантового газа. Для всех остальных значений плотности важно учитывать взаимодействие между носителями заряда (случай сильной связи). В анализе случая сильной связи нет прогресса в течение длительного времени и, например, состояние проблемы, зафиксированное в [1], остается справедливым и сегодня. Реализация традиционной программы, в которой исходя из гамильтониана определяется спектр возбуждений и на этой основе строится теория равновесных и неравновесных явлений, оказывается затруднительной.

Рассмотрим макроскопическое проявление неидеальности, для определенности в классическом электронном газе полупроводников. В макроскопическом случае отклонения от идеальности можно учесть через уравнение состояния. Из микроскопического рассмотрения следует, что наряду с кинетическим давлением существует давление, обусловленное взаимодействием между электронами, определяемое выражением [2]

$$P_{\text{int}} = \int (\mathbf{s}\nabla_s)\frac{e^2}{\varepsilon s} g_2(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)\, d\mathbf{s},$$

где g_2 — усредненная по импульсам двухчастичная корреляционная функция. Поскольку вычисление корреляционной функции для кулоновской системы затруднительно, используем концепцию локально-равновесного состояния, являющуюся необходимым атрибутом гидродинамического описания. В равновесии давление взаимодействия определяется выражением $P_{\text{int}} = -\partial F_{\text{int}}/\partial V$, где F_{int} — свободная энергия взаимодействия. В этом выражении гидродинамические переменные (для исследуемого случая только плотность n) объявляются функциями координат и времени. В дальнейшем используем разложение свободной энергии взаимодействия по плотности, полученное в [3] с применением мацубаровской техники. Это разложение включает самосогласованную поправку Дебая–Хюккеля и следующую корреляционную. Для суммы P кинетического давления и давления взаимодействия имеем

$$(kTn_0)^{-1}P \equiv p = n(1 - \sqrt{\pi}\alpha n^{1/2}/3) - \frac{\pi}{6}\alpha^2 n^2(\ln 4\pi\alpha^2 n + 1), \qquad (1)$$

где $\alpha = (e^2 n_0^{1/3}/\varepsilon kT)^{3/2}$ — параметр неидеальности, n_0 — средняя равновесная плотность электронов, определяемая из глобальной электрической нейтральности, и используется безразмерная плотность $n \to n/n_0$. Для неидеального классического электронного газа полупроводников решается система уравнений гидродинамического приближения

$$\begin{cases} \dfrac{dp}{dn}\nabla n = -n\mathbf{E} + \dfrac{\mathbf{J}}{en_0 D}, \\ \operatorname{div}\mathbf{E} = \mathrm{k}^2(1-n), \qquad \mathrm{k}^2 = 4\pi e^2 n_0/\varepsilon kT, \\ \dfrac{\partial n}{\partial t} - \dfrac{1}{en_0}\operatorname{div}\mathbf{J} = 0, \end{cases} \qquad (2)$$

где D — коэффициент диффузии и используется безразмерный потенциал $\varphi \to e\varphi/kT$. Рассмотрим равновесное состояние, положив в (2) плотность тока J равной нулю. В этом случае зависимость $n(\varphi)$, которая для идеального газа является известным распределением Больцмана, находится из уравнения

$$\frac{dp}{dn}\frac{dn}{d\varphi} = n \qquad (3)$$

с дополнительным условием $n(0) = 1$. Решение уравнения (3) имеет вид

$$\varphi = \ln n + \alpha\sqrt{\pi}(1 - \sqrt{n}) - \frac{\pi}{3}\alpha^2(n\ln nA - \ln A), \qquad (4)$$

где $A = (\mathrm{e}^{1/3}4\pi\alpha^2)^{3/2}$, e — основание натуральных логарифмов. В точке $n = n_{\mathrm{e}}$, определяемой уравнением

$$\frac{dp}{dn} = 0, \qquad (5)$$

$\varphi(n)$ достигает максимума. Решение уравнения (5) определяет границу устойчивости однородного состояния [4].

Дальнейший анализ проводится для одномерного случая. Один раз система (2) интегрируется, возникающий при этом интеграл H равен

$$H = \frac{E^2}{2} + V(n), \tag{6}$$

что естественно назвать гамильтонианом. Для "потенциальной энергии" $V(n)$ из (1) и (2) получаем выражение

$$V(n) = \mathrm{k}^2\left[\varphi(n) - p(n)\right]. \tag{7}$$

Первые два уравнения системы (2) являются уравнениями движения Гамильтона, возникающими из гамильтониана, определяемого из (6) и (7), если переменную

$$\tau = -\int n\left(\frac{dp}{dn}\right)^{-1} dx \tag{8}$$

считать аналогичной времени. Анализ на фазовой плоскости (E, n) показывает, что имеются две особые точки: гиперболическая точка $n = 1$ и эллиптическая точка $n = n_c$. На рисунке представлены зависимости $\varphi(n)$, $V(n)$ и фазовый портрет системы. Значение $H = V(1)$ определяет сепаратрису. Решением на сепаратрисе является статическая уединенная волна — солитон; для $H < V(1)$ существуют периодические решения — это общие результаты нелинейной динамики гамильтоновых систем [5]. Ввиду сложности выражения (7) используем экстраполяцию

$$V(n) = V(1) + 6\left[V(1) - V(n_c)\right] \times \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{n-1}{n_c-1}\right)^2 + \frac{1}{3}\left(\frac{n-1}{n_c-1}\right)^3\right]. \tag{9}$$

Это выражение хорошо аппроксимирует (7) в актуальной области электронных плотностей и к тому же совпадает с аналогичной величиной в стационарной теории КДФ [5]. Сразу можно выписать решения для нелинейных волн. Для статического солитона имеем

$$n = 1 + \frac{3}{2}\frac{n_c - 1}{\mathrm{ch}^2\gamma(\tau - c)}, \tag{10}$$

где положение солитона c определяется граничными условиями и переменная $\tau(x)$ задается выражением, следующим из (8) с использованием экстраполяции (9),

$$\frac{2}{3}\gamma\tau - \mathrm{th}\,\gamma\tau = \frac{\mathrm{k}^2}{6\gamma}x. \tag{11}$$

Ширина солитона γ^{-1} определяется выражением

$$\gamma = \frac{1}{n_c - 1}\sqrt{\frac{3}{2}\left[V(1) - V(n_c)\right]}.$$

В случае $H < V(1)$ существует периодическое решение

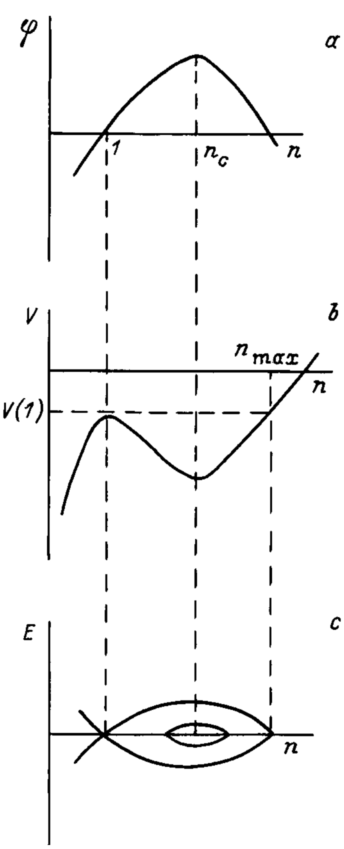
$$n = n_3 + (n_1 - n_3)dn^2 \times \left(\tau\sqrt{\frac{n_1 - n_2}{n_c - 1}\left[V(1) - V(n_c)\right]}, s\right), \tag{12}$$

где $n_1 > n_2 > n_3$ — корни уравнения $H = V(n)$ и dn — эллиптическая функция Якоби с модулем $s^2 = (n_1 - n_2)/(n_1 - n_3)$. Период нелинейной периодической волны равен $4K(s)\sqrt{(n_c - 1)/[V(1) - V(n_c)](n_1 - n_3)}$, где $K(s)$ — полный эллиптический интеграл первого рода.

Перейдем к рассмотрению неравновесного случая, когда проходит ток плотностью J. Для поиска стационарных решений в системе (2) введем волновой аргумент $\xi = x + ut$. Тогда из уравнения непрерывности следует, что $J = J_0 + eun_0(n-1)$, где J_0 — внешний ток. Совершая переход к переменной τ по формуле (11) с заменой x на ξ, получаем из оставшихся уравнений системы (2)

$$\frac{d^2n}{d\tau^2} + \frac{1}{n^2D}\left(\frac{J_0}{n_0} - eu\right)\frac{dn}{d\tau} = -\frac{dV}{dn}. \tag{13}$$

Полученное уравнение аналогично уравнению для нелинейного осциллятора с трением. Коэффициент трения обусловлен взаимодействием электронов с фононами и дефектами. Для обращения работы силы трения в нуль нужно выбрать скорость нелинейной волны $u = J_0/eu_0$. Тогда затухание отсутствует и мы возвращаемся к результатам анализа для равновесного случая. Солитоны и нелинейные периодические волны, полученные в



Зависимость от нормирований плотности электронов потенциала φ (a), "потенциальной энергии" V (b) и фазовый портрет системы (c).

этом анализе, остаются неизменными, но движутся со скоростью u. Возникает новый механизм транспорта носителей заряда в полупроводниках посредством нелинейных волн. Поскольку фазовый объем при распространении нелинейных волн сохраняется (гамильтоновость системы) при экспериментальной реализации требуется задать соответствующий фазовый объем на границе.

Данная работы выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 97-02-16241) и ИНТАС (грант 93-3430-Ext).

Список литературы

[1] Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар. *Проблема многих тел в квантовой механике* (М., Мир, 1969) [N.H. March, W.H. Young, S. Sampanthar. *The mani-body problem in quantum mechanics* (Cambridge University Press, 1967)].
[2] С.Р. де Гроот, Л.Г. Сатторп. *Электродинамика* (М., Наука, 1982) [S.R. de Groot and L.G. Suttorp. *Foundations of Electrodynamics* (Amsterdam, North-Holland Publishign Company, 1972)].
[3] А.А. Веденов, А.И. Ларкин. ЖЭТФ, **36**, 1133 (1959).
[4] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика* (М., Наука, 1964).
[5] Г.М. Заславский, Р.З. Сагдеев. *Введение в нелинейную физику* (М., Наука, 1988).

Редактор Л.В. Шаронова

Nonlinear waves of interacting charge carriers in semiconductors

V.E. Stepanov

Siberian Physicotechnical Institute,
634050 Tomsk, Russia

Abstract Manifestation of the nonideality effects of charge carriers in semiconductors is discovered theoretically; the effects have been considered through the equation of state within the framework of hydrodynamics approximation. The density nonlinear terms in the equation of state are conditioned by the Coulomb interaction and lead to existence of solitary and periodic waves for the charge carriers density disturbances.