

Особенности неравновесной функции распределения при рассеянии электронов на полярных оптических фононах в полупроводниках $A^{III}B^V$

© С.И. Борисенко

Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова,
634050 Томск, Россия

(Получена 12 июля 2000 г. Принята к печати 26 июля 2000 г.)

Проведен численный анализ неравновесной функции распределения для рассеянии электронов на полярных оптических фононах в полупроводнике GaAs. Уравнение Больцмана для неравновесной функции решалось численно итерационным методом с учетом распределения электронов по состояниям. Показано, что неравновесная добавка к функции распределения при низких температурах имеет сложный вид. Значения подвижности, рассчитанной с этой функцией, сравниваются с величиной, полученной в широко используемом приближении.

Как известно, одним из основных механизмов рассеяния в алмазоподобных полупроводниках $A^{III}B^V$ является рассеяние на продольных полярных оптических (ЛО) фононах. Учет этого рассеяния в области неупругости представляет определенные трудности, связанные с необходимостью численного решения уравнения Больцмана вне рамок приближения времени релаксации. Во многих работах [1–4], связанных с анализом экспериментальных данных по температурной зависимости подвижности в рассматриваемых полупроводниках, определяемой рассеянием на ЛО-фононах, в основном используется формула, полученная авторами [5,6] с помощью вариационного метода,

$$\begin{aligned} \mu_{LO} &= \frac{8\sqrt{T}\hbar^2\varepsilon^*[\exp(\Theta/T) - 1]}{3\sqrt{2\pi k_0(m^*)^3}e^\Theta} \chi(\Theta/T) \\ &= \mu_0(T) \chi(\Theta/T), \end{aligned} \quad (1)$$

где m^* — эффективная масса носителей заряда, $\varepsilon^* = \varepsilon_s\varepsilon_\infty/(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)$, ε_s , ε_∞ — низкочастотная и высокочастотная диэлектрические проницаемости, T — температура, $\Theta = \hbar\omega/k_0$ — эффективная температура длинноволнового ЛО-фонона. Эта формула наряду с параметрами электронного и фононного спектров содержит задаваемую численно функцию χ , аргументом которой является отношение энергии фонона $\hbar\omega$ к величине k_0T . В области высоких ($\hbar\omega \ll k_0T$) и низких ($\hbar\omega \gg k_0T$) температур значение этой функции приводит к формулам, полученным в приближении времени релаксации [7]. Недостатком этих формул является то, что она не учитывает экранировку потенциала ЛО-фононов, а также распределение электронов по состояниям в окрестности дна зоны проводимости. Все сказанное может оказаться существенным в случае образцов с частично или полностью вырожденным электронным газом.

В данной работе получено функциональное уравнение, с помощью которого уравнение Больцмана для рассеяния электронов на ЛО-фононах решается численно

методом итераций. При выводе этого уравнения использовано приближение слабого поля и эффективной массы, учтена экранировка рассеяния на ЛО-фононах и распределение электронов по состояниям. На примере GaAs проведен численный расчет и анализ неравновесной добавки к функции распределения и температурной зависимости подвижности. Проведено сравнение полученных результатов с результатами расчетов другими методами.

1. Методика численного решения уравнения Больцмана

Как известно, в приближении слабого электрического поля с напряженностью \mathbf{E} уравнение Больцмана для неравновесной добавки к функции распределения $g(\mathbf{k})$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} g(\mathbf{k}) &= \tau_0(\mathbf{k}) \left\{ \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') [w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} + f_0(\mathcal{E})(w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}})] \right. \\ &\quad \left. + e \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \mathbf{E} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\tau_0(\mathbf{k}) = 1 / \sum_{\mathbf{k}'} \{w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} + f_0(\mathcal{E}')(w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}})\}, \quad (3)$$

$f_0(\mathcal{E}) = 1/[\exp(\mathcal{E} - \xi) + 1]$ — равновесная функция распределения Ферми–Дирака; $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{k})$, $\mathcal{E}' = \mathcal{E}(\mathbf{k}')$ — энергия электрона, зависящая от волнового вектора; $w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ — вероятность перехода в единицу времени из состояния с волновым вектором \mathbf{k} в состояние с \mathbf{k}' ; $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}}\mathcal{E}/\hbar$ — скорость электрона. Для рассеяния электронов на ЛО-фононах в полупроводниках $A^{III}B^V$ с учетом их испускания (+) и поглощения (–), как известно,

$$w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^+ + w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^-, \quad (4)$$

где

$$w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\pm} = w(\mathbf{q}) \left(N_{\omega} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\mathcal{E}' - \mathcal{E} \pm \hbar\omega) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \pm \mathbf{q}}, \quad (5)$$

$$w(\mathbf{q}) = C \frac{\mathbf{q}^2}{(\mathbf{q}^2 + \alpha^2)^2}, \quad C = \frac{\pi e^2 \omega}{\varepsilon_0 \varepsilon^*},$$

$$N_{\omega} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_0T) - 1} \quad (6)$$

— функция распределения Бозе–Энштейна, α — коэффициент экранирования Дебая, \mathbf{q} — волновой вектор фонона.

Выбирая неравновесную добавку в виде, соответствующем приближению времени релаксации $g(\mathbf{k}) = e(\partial f_0/\partial \mathcal{E})\tau(\mathcal{E})\mathbf{E}\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$, для неизвестной функции $\tau(\mathcal{E})$ с учетом (2) получаем функциональное уравнение

$$\tau(\mathcal{E}) = \tau_0(\mathcal{E}) \left\{ S^+(\mathcal{E})\tau(\mathcal{E} + \hbar\omega) + S^-(\mathcal{E})\tau(\mathcal{E} - \hbar\omega) + 1 \right\}, \quad (7)$$

где

$$1/\tau_0(\mathcal{E}) = S_0^+(\mathcal{E}) + S_0^-(\mathcal{E}). \quad (8)$$

В приближении эффективной массы для энергетического спектра электронов выражения для функций, входящих в уравнение (7), с учетом (4)–(6) принимают аналитический вид

$$S^{\pm}(\mathcal{E}) = A \left[N_{\omega} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \mp f_0(\mathcal{E}) \right] \frac{f_0'(\mathcal{E}')}{f_0'(\mathcal{E})} \times \frac{(\mathcal{E}' + \mathcal{E} + 2\eta^2)}{\mathcal{E}\sqrt{\mathcal{E}}} S(\mathcal{E}, \mathcal{E}') \Big|_{\mathcal{E}' = \mathcal{E} \pm \hbar\omega},$$

$$S_0^{\pm}(\mathcal{E}) = A \left[N_{\omega} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \mp f_0(\mathcal{E}) \right] \frac{2}{\mathcal{E}\sqrt{\mathcal{E}}} S_0(\mathcal{E}, \mathcal{E}') \Big|_{\mathcal{E}' = \mathcal{E} \mp \hbar\omega},$$

$$S(\mathcal{E}, \mathcal{E}') = \ln \left[\frac{(\sqrt{\mathcal{E}'} + \sqrt{\mathcal{E}})^2 + \eta^2}{(\sqrt{\mathcal{E}'} - \sqrt{\mathcal{E}})^2 + \eta^2} \right] - 4 \frac{\sqrt{\mathcal{E}\mathcal{E}'} [(\mathcal{E}' - \mathcal{E})^2 + 3\eta^2(\mathcal{E}' + \mathcal{E}) + 2\eta^4]}{(\mathcal{E}' + \mathcal{E} + 2\eta^2) [(\mathcal{E}' - \mathcal{E})^2 + 2\eta^2(\mathcal{E}' + \mathcal{E}) + \eta^4]}, \quad (9)$$

$$S_0(\mathcal{E}, \mathcal{E}') = \ln \left[\frac{(\sqrt{\mathcal{E}'} + \sqrt{\mathcal{E}})^2 + \eta^2}{(\sqrt{\mathcal{E}'} - \sqrt{\mathcal{E}})^2 + \eta^2} \right] - 4 \frac{\sqrt{\mathcal{E}\mathcal{E}'}\eta^2}{(\mathcal{E}' - \mathcal{E})^2 + 2\eta^2(\mathcal{E}' + \mathcal{E}) + \eta^4},$$

где $f_0'(\mathcal{E}) = \partial f_0(\mathcal{E})/\partial \mathcal{E}$, $\eta^2 = \hbar^2 \alpha^2 / 2m^*$, $A = (\sqrt{2m^*}/32\pi^2 \hbar)C$, m^* — эффективная масса электронов на дне зоны проводимости.

Уравнение (7) для функции $\tau(\mathcal{E})$, которую будем называть, как обычно, временем релаксации, решается численно методом итераций. В качестве нулевого приближения можно воспользоваться функцией $\tau_0(\mathcal{E})$.

В этом случае для $(n+1)$ -го приближения получаем итерационное уравнение

$$\tau_{n+1}(\mathcal{E}) = \tau_0(\mathcal{E}) \left\{ S^+(\mathcal{E})\tau_n(\mathcal{E} + \hbar\omega) + S^-(\mathcal{E})\tau_n(\mathcal{E} - \hbar\omega) + 1 \right\}. \quad (10)$$

При $\mathcal{E} \gg \hbar\omega$ из уравнения (7) получается формула для высокотемпературного времени релаксации с учетом экранировки дальнедействующего потенциала ЛО-фононов

$$\tau(\mathcal{E}) = \frac{\sqrt{\mathcal{E}}}{2A(2N_{\omega} + 1)\Phi(\mathcal{E})}, \quad (11)$$

где

$$\Phi(\mathcal{E}) = \frac{\eta^2}{\mathcal{E}} \ln \left(\frac{\eta^2}{4\mathcal{E} + \eta^2} \right) + 4 \frac{2\mathcal{E} + \eta^2}{4\mathcal{E} + \eta^2}. \quad (12)$$

При $\eta \rightarrow 0$ функция $\Phi(\mathcal{E}) \rightarrow 2$ и формула (11) принимает обычный вид для высокотемпературного времени релаксации на ЛО-фононах без учета экранировки.

Как известно, в случае низких температур время релаксации для рассеяния на ЛО-фононах строго ввести нельзя. Приближенный подход к решению этой задачи приводит к формуле, полученной Калленом [8], которая ввиду ее относительной сложности для анализа подвижности носителей заряда практически не применяется. С учетом экранировки эту формулу в приближении эффективной массы можно записать в виде

$$\frac{1}{\tau(\mathcal{E})} = 2A\mathcal{E}^{-3/2} \left\{ N_{\omega}\Phi^-(\mathcal{E}) + (N_{\omega} + 1)\Phi^+(\mathcal{E})\vartheta(\mathcal{E} - \hbar\omega) \right\}, \quad (13)$$

где $\vartheta(x)$ — функция Хевисайда,

$$\Phi^{\pm}(\mathcal{E}) = 2\sqrt{\mathcal{E}(\mathcal{E} \mp \hbar\omega)} - \frac{(2\eta^2 \mp \hbar\omega)}{2} \ln \left[\frac{\eta^2 + (\sqrt{\mathcal{E} \mp \hbar\omega} + \sqrt{\mathcal{E}})^2}{\eta^2 + (\sqrt{\mathcal{E} \mp \hbar\omega} - \sqrt{\mathcal{E}})^2} \right] + \frac{2\eta^2(\eta^2 \mp \hbar\omega)\sqrt{\mathcal{E}(\mathcal{E} \mp \hbar\omega)}}{[\eta^2 + (\sqrt{\mathcal{E} \mp \hbar\omega} + \sqrt{\mathcal{E}})^2][\eta^2 + (\sqrt{\mathcal{E} \mp \hbar\omega} - \sqrt{\mathcal{E}})^2]}. \quad (14)$$

В приближении упругого рассеяния при $\mathcal{E} \gg \hbar\omega$, как и следовало ожидать, формула (13) переходит в формулу (11).

2. Численный анализ времени релаксации и подвижности

На рис. 1 представлены результаты численного решения уравнения (7) для функции $\tau_{\text{ЛО}}(\mathcal{E}) = \tau(\mathcal{E})$ при различных температурах (см. кривые 1–3) с параметрами, соответствующими невырожденному n -GaAs: $m^*/m_0 = 0.067$, $\varepsilon_s = 13.7$, $\varepsilon_{\infty} = 11.6$, $\hbar\omega = 37$ мВ, $\xi = -k_0T$. Из рисунка следует, что в области азотных

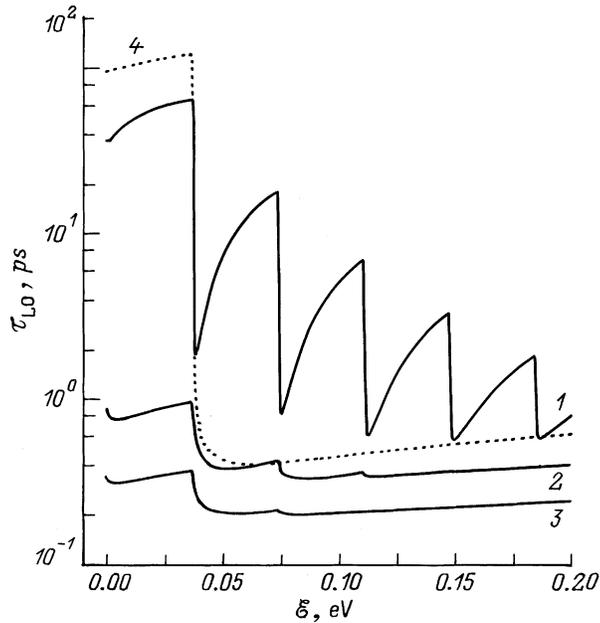


Рис. 1. Вид функции $\tau_{LO}(\mathcal{E})$ для невырожденного электронного газа ($\xi = -k_0T$) при температурах T, K : 1 — 77, 2 — 300, 3 — 600. 4 — расчет по формуле Каллена для $T = 77 K$.

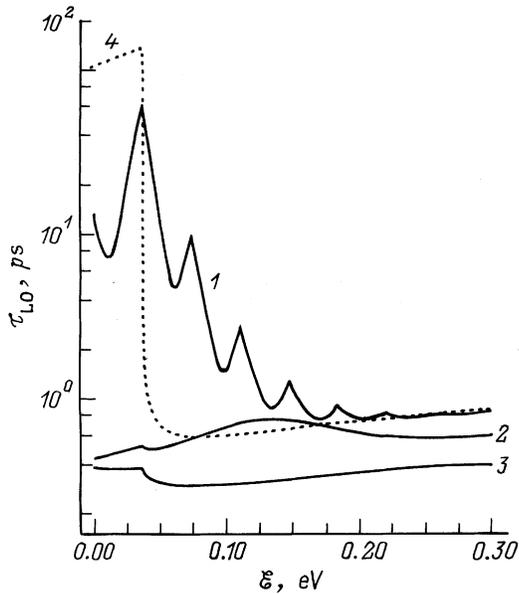


Рис. 2. Вид функции $\tau_{LO}(\mathcal{E})$ для вырожденного электронного газа ($\xi = 5k_0T$) при температурах T, K : 1 — 77, 2 — 300, 3 — 600. 4 — расчет по формуле Каллена для $T = 77 K$.

температур функция $\tau_{LO}(\mathcal{E})$ имеет осциллирующий вид. Период осцилляций равен энергии ЛО-фона. С ростом энергии электрона и температуры амплитуда осцилляций уменьшается. Функция $\tau(\mathcal{E})$, рассчитанная по формуле Каллена (13) (кривая 4), имеет вид, близкий к огибающей $\tau_{LO}(\mathcal{E})$ снизу. С ростом уровня Ферми изменяется вид осцилляций, но период их остается прежним.

Это следует из рис. 2, где представлены результаты расчета $\tau_{LO}(\mathcal{E})$, выполненные для вырожденного n -GaAs ($\xi = 5k_0T$).

Результаты расчета дрейфовой подвижности в области температур от 50 до 600 К представлены на рис. 3. Сплошная линия соответствует расчету μ_{LO} с функцией $\tau_{LO}(\mathcal{E})$, полученной из численного решения уравнения (7), а пунктирная — расчету по формуле (1). Из

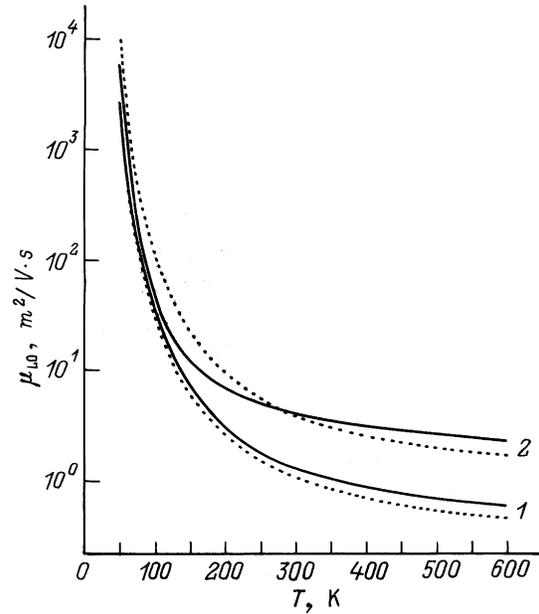


Рис. 3. Температурная зависимость подвижности: 1 — $\xi = -k_0T$, 2 — $\xi = 5k_0T$. Пояснения в тексте.

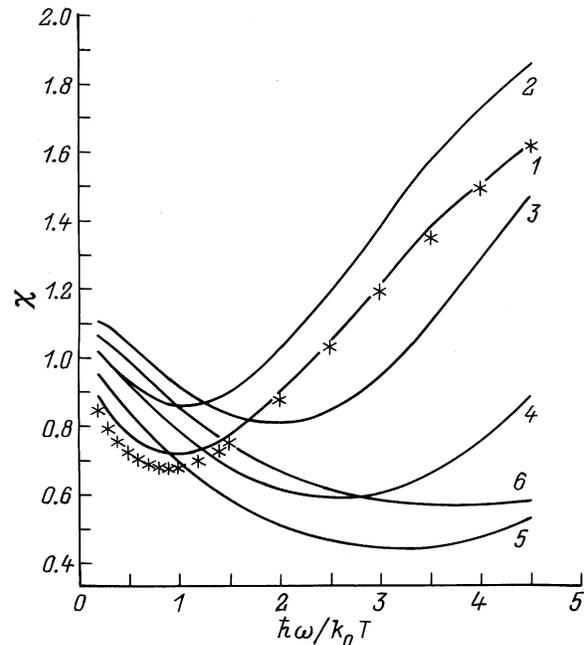


Рис. 4. Значения функции χ для электронного газа с различной степенью вырождения: $\xi = -10k_0T$ (1), $-k_0T$ (2), $2k_0T$ (3), $3k_0T$ (4), $4k_0T$ (5), $6k_0T$ (6). Пояснения в тексте.

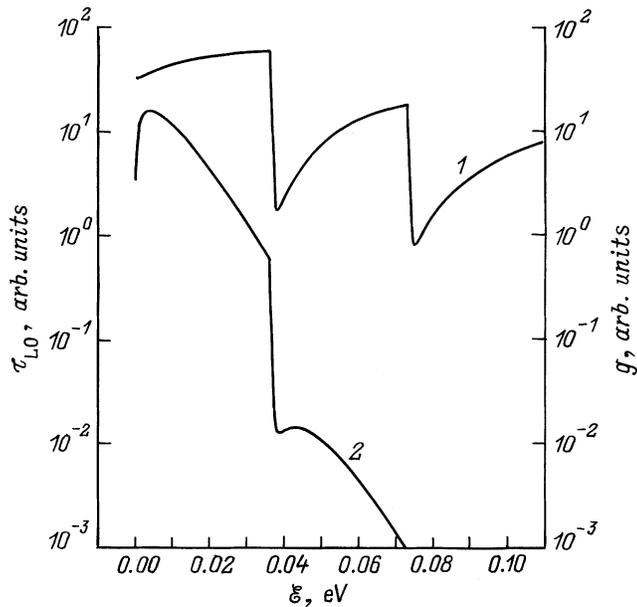


Рис. 5. Зависимость τ_{LO} (1) и g (2) в относительных единицах от энергии для n -GaAs при $T = 77$ К и $\xi = -k_0 T$.

рисунка следует, что наибольшее различие между кривыми, рассчитанными двумя способами, наблюдается, как и следовало ожидать, для вырожденного электронного газа. На рис. 4 представлена функция χ , вычисленная по формуле

$$\chi(\Theta/T) = \mu_{LO}(T)/\mu_0(T), \quad (15)$$

где $\mu_{LO}(T)$ — подвижность, рассчитанная с учетом численного решения уравнения (7); $\mu_0(T)$ — подвижность в приближении времени релаксации для невырожденного электронного газа — см. (1). Значениям этой функции при различной степени вырождения электронного газа соответствуют сплошные кривые 1–6. Точки соответствуют значениям этой функции, полученным при выводе формулы (1) [2]. Согласно рисунку, значения функции χ , вычисленные с учетом заполнения электронами состояний в зоне проводимости и без учета, для образцов с вырожденным электронным газом в области азотных температур различаются существенно. Это может привести к увеличению подвижности, рассчитанной по формуле (1), по сравнению с точным расчетом в несколько раз.

Заключение

Согласно результатам численного решения уравнения Больцмана для GaAs показано, что в полупроводниках $A^{III}B^V$ в области низких температур при учете рассеяния на LO-фононах зависимость неравновесной добавки к функции распределения от энергии имеет сложный вид (рис. 5). Это может проявиться в сильных магнитных полях в собственных или слабо легированных полупроводниках данного типа и структурах на их

основе — например, в сверхрешетках и других низкоразмерных структурах, специфические свойства которых проявляются при низких температурах.

Список литературы

- [1] В.М. Ардышев, М.В. Ардышев, С.С. Хлудков. ФТП, **34**, 28 (2000).
- [2] М.Б. Коханюк. *Фосфид индия в полупроводниковой электронике* (Кишинев, 1988).
- [3] Я.Э. Кирсон, Э.Э. Клотыньш, Р.К. Круминя. Изв. АН Латв. ССР. Сер. физ. и техн. наук, № 3, 47 (1982).
- [4] В. Podor, N. Nador. Acta Phys. Acad. Sci. Hungaricae, **37**, (1974) p. 317.
- [5] A. Fortini, B. Diguët, J. Lugand. J. Appl. Phys., **32**, Suppl., 2155 (1961).
- [6] H. Ehrenreich. Phys. Rev., **120**, 1951 (1960).
- [7] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1978) гл. 8, с. 481.
- [8] Б. Ридли. *Квантовые процессы в полупроводниках* (М., Мир, 1986) гл. 3, с. 131.

Редактор Л.В. Шаронова

Particularities of non-equilibrium distribution function for electron scattering by polar optical phonons in $A^{III}B^V$ semiconductors

S.I. Borisenko

V.D. Kuznetsov Siberian Physicotechnical Institute,
634050 Tomsk, Russia

Abstract Numerical analysis of a nonequilibrium distribution function for electron scattering by polar optical phonons in GaAs semiconductor has been made. The Boltzmann equation for a nonequilibrium function was solved by iteration method with regard to electron distribution on the states. It was shown that a nonequilibrium addition of the distribution function had a complicated form. A mobility value, calculated with the help of the above mentioned function was compared with the mobility value, expressed by a conventional approximation formula.