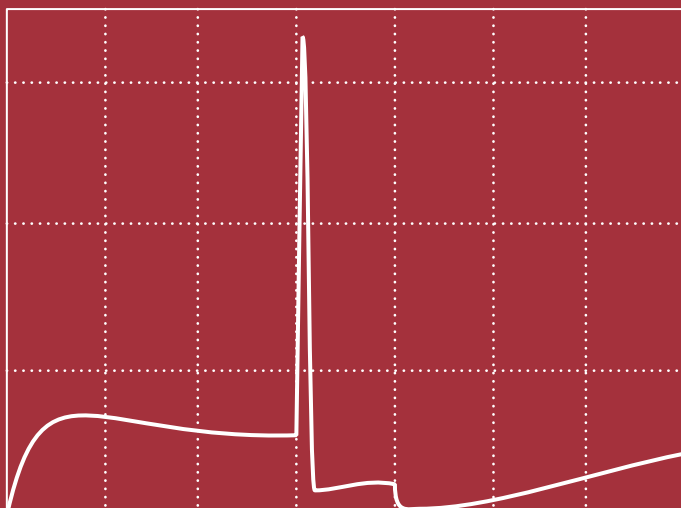
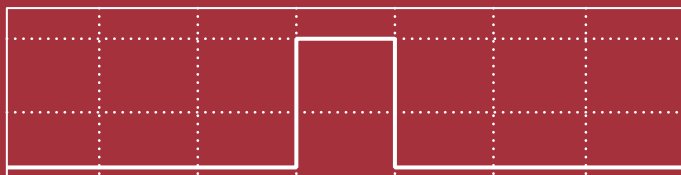


В. О. Москалюк

ФІЗИКА ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ

Динамічні процеси

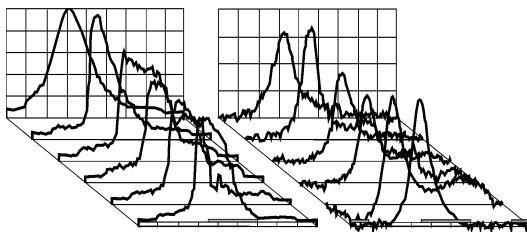


Київ «Політехніка» 2004

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

В. О. Москалюк

ФІЗИКА ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ



ДИНАМІЧНІ ПРОЦЕСИ

*Рекомендовано Міністерством освіти
і науки України як навчальний посібник
для студентів вищих навчальних закладів*

Київ
«Політехніка»
2004

УДК 621.38:53(075.8)

ББК 32.85я73

М 82

Гриф надано Міністерством освіти і науки України

(Лист № 14/18.2-739 від 13.04.2004 р.)

Рецензенти: *В. Є. Чайка*, д-р фіз.-мат. наук, проф. кафедри радіотехнологій ДУІКТ;
В. І. Осінський, д-р техн. наук, проф. (директор центру оптоелектронних технологій НДІ мікроприладів)

Відповідальний

редактор *Ю. М. Поплачко*, д-р фіз.-мат. наук, проф. НТУУ «КПІ»

Москалюк В. О.

М82 Фізика електронних процесів. Динамічні процеси: Навч. посіб. – К.: ІВЦ “Видавництво «Політехніка»”, 2004. – 180 с.

ISBN 966-622-161-6

Розглянуто основні рівняння для аналізу динамічних властивостей електронів у твердих тілах – кінетичне рівняння Больцмана у наближенні часу релаксації та релаксаційні рівняння збереження. На підставі аналізу основних механізмів розсіювання виведено аналітичні вирази для часів релаксації імпульсу, енергії та концентрації, у тому числі для багатодолинних напівпровідників; розглянуто властивості транспортування електронів у сильному електричному полі. Опис основних фізичних явищ, що використовуються в роботі електронних компонентів, супроводжується аналізом їх динамічних властивостей.

Для студентів спеціальності «Фізична та біомедична електроніка», може бути корисним для студентів інших спеціальностей та аспірантів вищих навчальних закладів.

УДК 621.38:53(075.8)

ББК 32.85я73

ISBN 966-622-161-6

© В. О. Москалюк, 2004

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА.....	5
1. ДИНАМІКА ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ. ЗАСОБИ МОДЕЛЮВАННЯ.....	7
1.1. КІНЕТИЧНЕ РІВНЯННЯ	7
1.1.1. Нерівноважна функція розподілу	7
1.1.2. Вигляд кінетичного рівняння.....	10
1.1.3. Інтеграл зіткнень	13
1.2. НАБЛИЖЕННЯ ЧАСУ РЕЛАКСАЦІЇ.....	16
1.2.1. Час релаксації.....	16
1.2.2. Статична провідність.....	18
1.2.3. Нестационарна динаміка дрейфу.....	22
1.2.4. Високочастотна провідність.....	24
1.3. РІВНЯННЯ ЗБЕРЕЖЕННЯ.....	25
1.3.1. Усереднення кінетичного рівняння	25
1.3.2. Релаксаційні рівняння	28
1.3.3. Міждолинна релаксація.....	31
1.4. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО.....	37
2. РОЗСІЮВАННЯ НОСІЇВ	44
2.1. ДОМІШКОВЕ РОЗСІЮВАННЯ.....	46
2.2. ФОНОННЕ РОЗСІЮВАННЯ	50
2.2.1. Спектр фононів.....	50
2.2.2. Загальні закономірності.....	55
2.2.3. Акустичне розсіювання.....	57
2.2.4. Оптичне розсіювання	60
2.2.5. Міждолинне розсіювання	62
2.3. СЕРЕДНІ ЧАСИ РЕЛАКСАЦІЇ.....	65
2.3.1. Часи релаксації імпульсу	65
2.3.2. Часи релаксації енергії, пружність розсіювання.....	70
2.4. РУХЛИВІСТЬ ЕЛЕКТРОНІВ.....	76
3. НОСІЇ В СИЛЬНОМУ ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ	85
3.1. ДРЕЙФ НОСІЇВ	85
3.1.1. Розігрівання електронного газу	86
3.1.2. Насичення дрейфової швидкості	96
3.1.3. Динамічна провідність	105

.....	
3.1.4. «Сплеск» дрейфової швидкості	114
3.1.5. Ефект Ганна	119
3.2. ПОЛЬОВА ГЕНЕРАЦІЯ	122
3.2.1. Ударна іонізація	122
3.2.2. Електростатична іонізація	127
3.2.3. Іонізація в домішкових напівпровідниках	129
3.2.4. Автоелектронна емісія	131
4. РЕКОМБІНАЦІЯ НОСІЇВ ЗАРЯДУ.....	134
4.1. ЗАГАЛЬНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ РЕКОМБІНАЦІЇ.....	134
4.2. ЕЛЕКТРОННО-ДІРКОВА РЕКОМБІНАЦІЯ У НАПІВПРОВІД- НИКАХ.....	137
4.3. РЕКОМБІНАЦІЯ ЕЛЕКТРОНІВ ТА ІОНІВ У ГАЗОРОЗРЯДНІЙ ПЛАЗМІ.....	143
5. ОПТИЧНА ГЕНЕРАЦІЯ.....	145
5.1. ОСОБЛИВОСТІ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА.....	145
5.2. ВЛАСТИВОСТІ ФОТОЕФЕКТІВ	151
5.2.1. Поведінка збуджених електронів.....	151
5.2.2. Інерційність фотоелементів	153
5.2.3. Лінійність світлової характеристики	157
5.2.4. Чутливість фотоелементів	159
5.2.5. Гранична частота фотоелементів	160
5.3. ФОТОЕЛЕМЕНТИ	163
5.3.1. Фотоелементи	163
5.3.2. Фоторезистивні матеріали.	167
ДОДАТОК.....	169
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ТА РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	179

ПЕРЕДМОВА

Тенденції підвищення швидкості роботи електронних пристроїв вимагають освоєння активних електронних компонентів з меншими за мікрометрові характерними розмірами й використання нових матеріалів для їх створення. Таким розмірам при звичайних напругах відповідають напруженості електричних полів, які прийнято вважати сильними. У науковій літературі останнього часу багато публікацій присвячено дослідженню фізичних процесів, що відбуваються в бінарних напівпровідникових сполуках і їхніх сплавах у сильних електричних полях, серед них є ряд оглядових монографій. Рівень висвітлення цих питань у навчальній літературі не встигає за досягненнями науки і явно не відповідає вимогам прикладної електроніки. У пропонованому посібнику зроблено спробу узагальнити останні наукові досягнення й адаптувати їх до навчального процесу, а також проаналізувати найхарактерніші електронні фізичні процеси з огляду на їхні динамічні властивості.

Спочатку розглянуто основні засоби опису динамічних електронних процесів. Це, насамперед, кінетичне рівняння Больцмана і його часто використовувана форма в наближенні часу релаксації. Показано, як усередненням кінетичного рівняння одержати рівняння збереження імпульсу, енергії й концентрації, які часто вважають феноменологічними, а також рівняння неперервності для рухливих носіїв заряду. Наведено алгоритм і продемонстровано можливості багаточасткового методу Монте-Карло, який останнім часом широко використовують для моделювання динамічних процесів, особливо в структурах з характерними розмірами менше мікрметра.

Окремий розділ присвячено особливостям механізмів розсіювання носіїв у напівпровідниках, що, зазвичай, є предметом розгляду в одному з найскладніших розділів фізики твердого тіла – теорії розсіювання. Основний результат цього розділу – одержання з відомих швидкостей розсіювання аналітичних співвідношень для усереднених часів релаксації імпульсу та енергії, властивих різним механізмам, зокрема міждолинному розсіюванню. Останнє важливо для вивчення кінетичних і динамічних властивостей носіїв у багатодолинних напівпровідниках. Якість цих співвідношень добре підтверджується експериментальними даними,

.....
узятими з різних літературних джерел, в основному монографічного характеру. Використання часів релаксації, що залежать від електронної температури, фактично розширює межі використання τ -наближення в область нелінійних явищ і, відповідно, сильних полів. Це найбільш істотно при міждолинному розсіюванні, можливість використання часу релаксації для якого іноді вважають спірною.

Найбільшою мірою ефективність отриманих часів релаксації проявляється при описі кінетичних властивостей носіїв у сильних електричних полях. Ефекти сильного поля так чи інакше проявляються в будь-якій мікроелектронній структурі. Вони викликані, насамперед, розігріванням електронів, ступінь якого залежить від ступеня непружності зіткнень і визначає вид пошвидкісних характеристик матеріалів. Отримані аналітичні співвідношення для цих залежностей дозволяють проаналізувати їхні особливості в досить широкому діапазоні напруженостей поля, як для класичних напівпровідників (кремнію і германію), так і для найяскравішого представника багатодолинних напівпровідників – арсеніду галію.

У наближенні малого сигналу розглянуто питання впливу різних релаксаційних процесів на високочастотну провідність, у тому числі на негативну динамічну провідність у багатодолинних напівпровідниках. Розглянуто також другу групу ефектів сильного поля – генераційних, пов'язаних з утворенням носіїв. Це процеси лавинного розмноження й ударної іонізації, що викликають пробійні ефекти, а також холодної емісії.

Четвертий розділ присвячено опису фізичних процесів рекомбінації і їхніх швидкісних властивостей при різних рівнях збудження нерівноважних носіїв. Завершує посібник опис ефектів оптичній генерації, а саме порівняльний аналіз внутрішнього й зовнішнього фотоефектів за швидкодією, лінійністю світлової характеристики, чутливістю й спектральним діапазоном використання.

У посібнику автор вважає за можливе посперитися лише на кілька монографічних видань, де можна знайти великі списки наукових першоджерел.

1. ДИНАМІКА ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ. ЗАСОБИ МОДЕЛЮВАННЯ

Модель дрейфового руху носіїв під дією зовнішнього електричного поля, яка ґрунтується на усередненні в часі параметрів руху однієї частки і в цілому правильно описує основні закономірності дрейфу в статичному полі, у принципі не може бути придатною для аналізу динамічних процесів. Крім того, провідність розраховують зазвичай з використанням рівноважних значень концентрації носіїв, що можна наближено робити для процесів, які лише незначно порушують термодинамічну рівновагу.

Найточніші кількісні моделі електронних процесів за наявності зовнішніх впливів, у тому числі й динамічних, можна створити на основі так званого *кінетичного рівняння*. У загальному випадку воно являє собою інтегро-диференціальне рівняння, за допомогою якого можна знайти функцію розподілу часток, а отже, і всі *середні* величини, що характеризують поведінку колективу часток.

1.1. КІНЕТИЧНЕ РІВНЯННЯ

1.1.1. Нерівноважна функція розподілу

Для аналізу нерівноважних процесів, що відбуваються в напівпровідниках, наприклад, у сильних електричних полях, у разі освітлення або інжекції носіїв через контакти, недостатньо енергетичної функції розподілу $N(E)$, яку використовують для розрахунку рівноважних концентрацій. Стан електронного колективу більш повно відображає функція $N(\vec{r}, \vec{k}, t)$, яку так само, як $N(E)$ можна подати у вигляді добутку функції густини \vec{k} -станів $g(k) = dn_c/dV_k$ і функції

.....
 $f(E(\vec{k})) = dn/dn_c$, що характеризує ймовірність заповнення станів, причому зв'язок $E(\vec{k})$ визначається законом дисперсії для електронів у певній речовині. Функцію густини станів можна обрати у вигляді $g(k) = 2V/(2\pi)^3$ [5], якщо залишаються в силі основні висновки зонної теорії. Функцію $f(E(\vec{k}))$ також найчастіше беруть у вигляді, подібному до рівноважної функції Фермі – Дірака, однак величини, що входять до неї, набувають трохи іншого змісту.

У результаті динамічного впливу відбувається зміна \vec{k} -станів електронів, а їхня енергія стає функцією часу – $E(\vec{k}(t))$. Просторово неоднорідну нерівноважність можна описати за допомогою введення *локальної температури* $T_e(\vec{r})$, що в загальному випадку різна для електронів та дірок і не обов'язково збігається з температурою речовини або навколишнього середовища. У ряді випадків, зазвичай у разі відхилення концентрації нерівноважних носіїв від рівноважних значень, локальну нерівноважність описують за допомогою введення *квазірівней Фермі* ($E_{\Phi n}(\vec{r})$ – для електронів й $E_{\Phi p}(\vec{r})$ – для дірок), які виступають як формальні параметри функції Фермі – Дірака.

У підсумку нерівноважність електронного колективу можна описати за допомогою функції розподілу

$$N(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{d^2 N}{dV dV_k} = \frac{g(k)}{\exp\{[E(\vec{k}(t)) - E_{\Phi n}(\vec{r})]/k_B T_e(\vec{r})\} + 1}. \quad (1.1)$$

Цю функцію нормують таким чином, що якщо проінтегрувати її по всьому геометричному об'єму V і по об'єму k -простору V_k , то одержимо загальну кількість часток певного виду в певному колективі:

$$\int_V dV \int_{V_k} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k = N. \quad (1.2)$$

Надалі обмежимося розглядом одиничного об'єму $V = 1$, узявши таку функцію густини станів: $g(k) = 1/4\pi^3$.

Знання функції розподілу дозволяє знайти основні макроскопічні характеристики колективу. Наприклад, проін-

тегрувавши її по всьому k -простору, одержимо розподіл концентрації часток у геометричному просторі:

$$n(\vec{r}, t) = \int_{V_k} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k, \quad (1.3)$$

і, відповідно, розподіл густини об'ємного заряду $\rho(\vec{r}, t) = -en(\vec{r}, t)$.

Усередненням швидкості часток у k -просторі за функцією розподілу можна знайти середню дрейфову швидкість їх спрямованого руху:

$$\vec{v}_{др}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \int_{V_k} \vec{v} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k, \quad (1.4)$$

а отже, і розподіл густини струму:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -en(\vec{r}, t) \vec{v}_{др}(\vec{r}, t) = -e \int_{V_k} \vec{v} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k. \quad (1.5)$$

Так само знаходять локальне середнє значення $\varphi_{сер}(\vec{r}, t)$ будь-якої фізичної величини, оскільки

$$\varphi_{сер}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n} \int_{V_k} \varphi(\vec{k}) N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k = (n\varphi)_{сер}/n. \quad (1.6)$$

Тут слід звернути увагу на вибір меж інтегрування. В останніх інтегралах, записаних для загального випадку, інтегрування проводять для всіх можливих значень *хвильового* вектора. Для електронів у періодичному полі кристалічної решітки областю неповторюваних значень *квазіхвильового* вектора є зона Бріллюена V_B , причому інтегрувати треба по станах, що відповідають одній енергетичній зоні. Більше того, іноді інтегрують по якій-небудь характерній ділянці дисперсійної кривої, визначаючи концентрацію або середні значення для часток того чи іншого виду. Наприклад, можна знайти концентрацію й параметри електронів у

.....
 Г-, L- або X-долині зони провідності, «легких» або «важких» дірок у валентній зоні.

1.1.2. Вигляд кінетичного рівняння

Оскільки в замкненій системі кількість часток зберігається незмінною, тобто $N = \text{const}$, то

$$dN(\vec{r}, \vec{k}, t)/dt = 0. \quad (1.7)$$

Більш строго це рівняння доводять на основі теореми Ліувілля, розглянутої в статистичній механіці. Співвідношення (1.7) є основою для формулювання кінетичного рівняння, що дозволяє знайти зміну функції розподілу, якщо відомий вплив на частки. Слід зазначити, що кінетичне рівняння записують зазвичай окремо для колективів часток різного виду (електронів певної зони, дірок, фононів та ін.). Розглянемо це рівняння для електронів. Оскільки $N(\vec{r}, \vec{k}, t)$ – функція трьох змінних, дві з яких векторні, то $d = (\partial/\partial t)dt + (\partial N/\partial \vec{r})d\vec{r} + (\partial N/\partial \vec{k})d\vec{k}$, або

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dt}, \quad (1.8)$$

де для стислості запису позначено:

$$\frac{\partial N}{\partial \vec{r}} = \vec{e}_x \frac{\partial N}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial N}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial N}{\partial z} = \text{grad}_r N, \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial N}{\partial \vec{k}} = \vec{e}_x \frac{\partial N}{\partial k_x} + \vec{e}_y \frac{\partial N}{\partial k_y} + \vec{e}_z \frac{\partial N}{\partial k_z} = \text{grad}_k N. \quad (1.10)$$

З огляду на те, що $d\vec{r}/dt = \vec{v}$, а $d\vec{k}/dt = \vec{F}/\hbar$, запишемо (1.7) таким чином:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial N}{\partial \bar{r}} + \frac{\bar{F}}{\hbar} \frac{\partial N}{\partial \bar{k}} = 0. \quad (1.11)$$

Сили, що діють на електрони, можна умовно поділити на дві групи. По-перше, це сили з боку зовнішніх полів $\bar{F} = -e(\bar{E}(\bar{r}, t) + [\bar{v} \times \bar{B}(\bar{r}, t)])$, які змінюються в просторі порівняно плавно. По-друге, це сили, які виникають між двома частками під час достатнього їх зближення або у разі локальних порушень періодичності кристалічної решітки. Незважаючи на те, що такі взаємодії мають також електричну природу, через їхню локальність їх розглядають як *зіткнення* або *співударення*. Залишаючи в третьому доданку (1.11) лише силу зовнішніх полів, можна записати

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial N}{\partial \bar{r}} + \frac{\bar{F}}{\hbar} \frac{\partial N}{\partial \bar{k}} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c, \quad (1.12)$$

де права частина, називана *інтегралом зіткнень*, символічно враховує вплив останніх на функцію розподілу. Оскільки густина станів $g(k)$ постійна в k -просторі, то, розділивши всі доданки на $g(k) = 1/4\pi^3$, одержимо найпоширенішу форму запису кінетичного рівняння для функції $f(\bar{r}, \bar{k}, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial f}{\partial \bar{r}} + \frac{\bar{F}}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \bar{k}} = 4\pi^3 \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c. \quad (1.13)$$

Якщо другий і третій доданок перенести в праву частину, то одержимо наочнішу форму запису кінетичного рівняння з огляду на його фізичний зміст: зміна функції розподілу в певній точці можлива за рахунок просторової неоднорідності розподілу (наявності градієнтів концентрації, температури), впливу зовнішніх полів і зіткнень. Тому часто відповідні доданки називають дифузійним, польовим і таким, що характеризує вплив співударень.

Характерним прикладом для використання кінетичного рівняння є слабоіонізована газова плазма або електронно-діркова плазма в невідроджених напівпровідниках. У цих випадках кінетичне рівняння називають *рівнянням Больц-*

.....
 мана. Якщо зіткненнями можна знехтувати, наприклад, для дуже розрідженої газової плазми або для електронних потоків у вакуумі, то $[\partial/\partial t]_c = 0$ і (1.13) називають *рівнянням Власова*.

Кінетичне рівняння – дуже потужний засіб *статистичного опису* поведінки великих колективів часток, тому що одержувана в результаті його розв'язання функція розподілу дозволяє детально аналізувати фізичні процеси переносу носіїв в електронних приладах. За своєю природою кінетичне рівняння – класичне, але надаючи тим чи іншим величинам відповідний квантовий зміст, можна одержати так званий *напівкласичний* опис фізичних процесів з урахуванням квантових ефектів. Кінетичне рівняння дозволяє стежити за зміною функції розподілу в різних умовах, а конкретний вигляд функції визначається статистичними властивостями колективу часток.

Розглянемо, наприклад, рівноважний стан колективу, у якому функція розподілу f_0 має бути стаціонарною ($\partial f_0/\partial t = 0$) і зіткнення не мають змінювати її вигляду ($[\partial/\partial t]_c = 0$). За цих умов кінетичне рівняння набуде вигляду

$$\bar{v} \frac{\partial f_0}{\partial \bar{r}} + \frac{\bar{F}}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial \bar{k}} = 0. \quad (1.14)$$

Оскільки f_0 залежить від \bar{k} не явно, а через закон дисперсії $E(\bar{k})$, і з огляду на те, що групова швидкість електрона $\bar{v} = (\partial E/\partial \bar{k})/\hbar$, то $\partial f_0/\partial \bar{k} = (\partial f_0/\partial E) \cdot (\partial E/\partial \bar{k}) = \hbar \bar{v} (\partial f_0/\partial E)$, і рівняння набуде вигляду

$$\bar{v} (\partial f_0/\partial \bar{r}) + \bar{F} \bar{v} (\partial f_0/\partial E) = 0. \quad (1.15)$$

Слід зазначити, що $\bar{F} \bar{v} = -e(\bar{\mathcal{E}} + [\bar{v} \times \bar{B}])\bar{v} = -e\bar{\mathcal{E}}\bar{v}$, тому магнітне поле безпосередньо не впливає на вигляд рівноважної функції розподілу. Крім того, рівноважний стан можливий лише за наявності статичного електричного поля, але функція розподілу має бути просторово неоднорідною, причому ця неоднорідність пов'язана тільки із просторовим розподілом потенціалу $V(\bar{r})$ або потенціальної енергії $U(\bar{r}) = -eV(\bar{r})$, тому що $\partial f_0/\partial \bar{r} = (\partial f_0/\partial U)(\partial U/\partial \bar{r}) = (\partial f_0/\partial U)\text{grad}U = -(\partial f_0/\partial U)\bar{F}$. У цьому випадку (1.15) перетворюється на

.....
 рівність $\partial f_0 / \partial E - \partial f_0 / \partial U = 0$, якщо аргументом функції розподілу буде сума $(E(\vec{k}) + U(\vec{r}))$ на відміну від (1.1), де аргументом слугує тільки енергія $E(\vec{k})$. Ця ситуація описана в [5], де розглядається «скривлення» енергетичних зон у зовнішньому електричному полі й просторовий перерозподіл носіїв відповідно до потенціального рельєфу. Рівність нулю суми дифузійного і польового доданків у (1.14) означає, що дифузійний перенос носіїв, який виникає через наявність градієнта функції розподілу, урівноважується дрейфовим рухом в електричному полі. Ця рівновага буде локальною, що виконується для кожної точки простору.

1.1.3. Інтеграл зіткнень

Щоб розв'язати кінетичне рівняння в конкретній ситуації, необхідно задати розподіл сил, що діють на частки, і описати процеси зіткнень, які змінюють електронні стани. У загальному випадку під дією локальних електричних полів, створюваних дефектами кристалічної решітки, відбувається *розсіювання носіїв заряду*, тобто в процесі зіткнення змінюється координата електрона \vec{r} і його хвильовий вектор \vec{k} . Однак якщо вважати, що зіткнення відбуваються миттєво, то їхнім результатом є зміна лише \vec{k} -станів, а разом з ними й енергетичних станів, що визначаються законом дисперсії $E(\vec{k})$. Просторовий розподіл часток для миттєвих зіткнень не змінюється.

Для встановлення загальної форми запису інтеграла зіткнень визначимо зміну загальної кількості часток за рахунок зіткнень у якій-небудь точці k -простору. Для цього позначимо ймовірність переходу електрона за 1 с із заповненого стану \vec{k} у вільний стан \vec{k}' (рис. 1.1) через $w_{k\vec{k}'}$. Якщо початковий стан \vec{k} заповнений з імовірністю $f(\vec{k})$, а кінцевий стан \vec{k}' вільний з імовірністю $(1 - f(\vec{k}'))$, то результуюча ймовірність такого переходу дорівнюватиме $w_{k\vec{k}'} f(\vec{k})(1 - f(\vec{k}'))$. Відповідно ймовірність зворотних переходів — $w_{\vec{k}'k} f(\vec{k}')(1 - f(\vec{k}))$. Якщо в околі точки \vec{k}' вибрати елементарний об'єм $dV_{\vec{k}'}$, кількість станів в якому дорівнює $dN_c =$

.....
 $= g(k) dV_{k'}$, то пропорційно їм збільшиться кількість переходів між станом \vec{k} і станами в об'ємі $dV_{k'}$. У підсумку повну зміну кількості часток у розглянутому \vec{k} -стані за одиницю часу в результаті обміну з усіма іншими станами можна знайти інтегруванням по всіх \vec{k}' -станах:

$$(\partial N / \partial t)_c = \int_{V_{k'}} g(\vec{k}') \left[w_{k'k} f(\vec{k}') (1 - f(\vec{k})) - w_{kk'} f(\vec{k}) (1 - f(\vec{k}')) \right] dV_{k'}. \quad (1.16)$$

Звідси з урахуванням сталості функції $g(k)$ праву частину кінетичного рівняння (1.13) можна подати як інтеграл, який символічно зазвичай позначають $(\partial f / \partial t)_c$:

$$\begin{aligned} (\partial f / \partial t)_c &= (\partial N / \partial t)_c / g(k) = \\ &= \int_{V_{k'}} \left[w_{k'k} f(\vec{k}') (1 - f(\vec{k})) - w_{kk'} f(\vec{k}) (1 - f(\vec{k}')) \right] dV_{k'}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Таким чином кінетичне рівняння стає інтегро-диференціальним рівнянням відносно функції розподілу $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$.

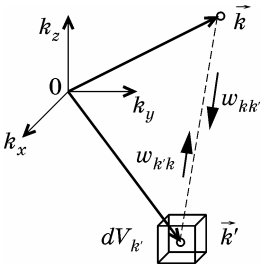


Рис. 1.1. Зображення переходів між k - і k' -станами. Вибором елементарного об'єму в околі k' -стану й подальшим інтегруванням по всьому k' -простору підраховують зміну кількості часток в обраному k -стані за рахунок обміну з усіма станами

Стосовно структури інтегралу зіткнень насамперед треба відзначити, що існує багато різних механізмів розсіювання і, якщо окремі акти зіткнень відбуваються випадково й незалежно один від одного, то їхні ймовірності підсумовуються:

$$w_{kk'}^\Sigma = \sum_i w_{kk'}^i. \quad (1.18)$$

Тому в правій частині кінетичного рівняння має стояти сума інтегралів, що відповідають різним видам зіткнень.

У рівноважному стані «прихід» і «відхід» часток для кожного \bar{k} -стану врівноважуються, і підінтегральний вираз в (1.17) дорівнює нулю, тому

$$w_{k'k} f(\bar{k}) (1 - f(\bar{k}')) = w_{kk'} f(\bar{k}') (1 - f(\bar{k})). \quad (1.19)$$

Підставивши в (1.19) функцію $f(\bar{k}) = f(E(\bar{k}))$ у вигляді функції Фермі – Дірака, одержимо

$$w_{k'k} / w_{kk'} = \exp[(E'(k') - E(k)) / k_B T]. \quad (1.20)$$

Це важливе в теорії квантових переходів співвідношення, називане іноді *принципом детальної рівноваги*, означає зокрема, що $w_{k'k} > w_{kk'}$, якщо $E'(k') > E(k)$, тобто ймовірнішими є переходи зі зменшенням енергії. Більша ймовірність переходів з \bar{k}' у \bar{k} компенсується меншою заселеністю \bar{k}' -станів з більшою енергією, і в результаті кількість переходів між будь-якою парою станів \bar{k} й \bar{k}' «туди» й «назад» однакова.

Інтеграл зіткнень у формі (1.17) отримано для виродженого колективу часток. Принцип Паулі тут враховано, про що свідчать співмножники $(1 - f(k))$ і $(1 - f(k'))$, які фактично забороняють переходи в уже заповнені стани. Для невироджених колективів $f(k) \ll 1$, й інтеграл зіткнень можна подати простіше:

$$(\partial f / \partial t)_c = \int_{V_{k'}} [w_{k'k} f(\bar{k}') - w_{kk'} f(\bar{k})] dV_{k'}. \quad (1.21)$$

Відповідно в рівноважному стані

$$w_{k'k} f(\bar{k}') = w_{kk'} f(\bar{k}). \quad (1.22)$$

Але якщо в останню рівність підставити функцію розподілу Максвелла – Больцмана у вигляді $f(E(k)) = \exp[(E_\Phi - E(k)) / k_B T]$, виходить те саме співвідношення (1.20), що й для виродженого колективу. Зокрема для пружних зіткнень, що

.....
 відбуваються без зміни енергії ($E' = E$), імовірності прямих і зворотних переходів рівні

$$w_{kk'} = w_{k'k}. \quad (1.23)$$

Іноді саме цю рівність використовують як формулювання принципу детальної рівноваги. Однак вона є окремим випадком (1.20), придатним лише для переходів між станами з однаковою енергією.

1.2. НАБЛИЖЕННЯ ЧАСУ РЕЛАКСАЦІЇ

1.2.1. Час релаксації

Істотно спростити вигляд інтеграла зіткнень, а значить і кінетичного рівняння, можна з використанням *наближення часу релаксації*. Його суть полягає в припущенні, що зміна функції розподілу за час dt пропорційна значенню цієї функції й, природно, інтервалу dt :

$$dN = N(\bar{r}, \bar{k}, t) dt / \tau. \quad (1.24)$$

Коефіцієнт пропорційності τ , що стоїть у знаменнику, має розмірність часу й називається *часом релаксації*. За своїм фізичним змістом і значенням час релаксації близький до середнього часу вільного пробігу в одночастковій моделі дрейфу [5]. Тому величина $1/\tau$ визначає ймовірність того, що за одиницю часу частка матиме зіткнення, а ймовірність зіткнень за час dt дорівнює dt/τ . З другого боку, ймовірність зіткнення дорівнює відношенню кількості часток, що мали зіткнення за час dt , до їх загальної кількості dN/N . Рівність цих значень і становить суть припущення (1.24). Воно також означає, що розподіл електронів через якийсь час порядку τ не залежить від вигляду нерівноважної функції розподілу безпосередньо перед зіткненнями (після зіткнення частки «забувають» про свої первісні

.....
 стани). Тому саме зіткнення, хаотизуючи рух, підтримують термодинамічну рівновагу, а вся інформація про нерівноважний стан у результаті зіткнень втрачається.

Відповідно до припущення (1.24) з \bar{k} -стану за одиницю часу в будь-які інші переходить $N(\bar{r}, \bar{k}, t)/\tau$ часток. Але це та сама кількість, що визначається другим доданком в інтегралі зіткнень (1.16), тому

$$(\partial N / \partial t)_c^- = N(\bar{r}, \bar{k}, t) / \tau = g(\bar{k}) \int w_{k k'} f(\bar{k}') (1 - f(\bar{k})) dV_{k'}. \quad (1.25)$$

Перший доданок в (1.16) характеризує кількість часток, які в результаті зіткнень переходять у стан \bar{k} з будь-яких \bar{k}' -станів за одиницю часу. Відповідно до наближення (1.24) це саме значення дорівнює N_0/τ , тому

$$(\partial N / \partial t)_c^+ = N_0 / \tau = g(\bar{k}) \int w_{k k'} f(\bar{k}') (1 - f(\bar{k})) dV_{k'}. \quad (1.26)$$

Варто звернути увагу на те, що в цьому виразі стоїть локально рівноважна функція розподілу N_0 , оскільки в \bar{k} -стан частки переходять безпосередньо в результаті зіткнень, які хаотизують рух і сприяють релаксації розподілу до рівноважного стану. З (1.25) і (1.26) випливає вираз для інтеграла зіткнень у наближенні часу релаксації:

$$(\partial N / \partial t)_c = (N_0 - N) / \tau = g(\bar{k}) (f_0 - f) / \tau. \quad (1.27)$$

Кінетичне рівняння (1.13) у цьому наближенні набуде вигляду

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial f}{\partial \bar{r}} + \frac{\bar{F}}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \bar{k}} = - \frac{f - f_0}{\tau}, \quad (1.28)$$

де $f_0 = N_0/g(k)$ – рівноважна функція розподілу Фермі – Дірака.

Обґрунтованість наближення часу релаксації не завжди очевидна. Найчастіше ним користуються тоді, коли відхилення від положення рівноваги відносно невеликі і час релаксації можна вважати сталою величиною. Однак і в тих випадках, коли час релаксації є функцією E , цей метод має переваги, якщо значення $\tau(E(k))$ можна заздалегідь експери-

ментально визначити або обчислити. Останнє можна зробити на основі співвідношення (1.25), якщо відомо ймовірності переходів $w_{kk'}$. Оскільки в (1.25) інтегрування виконують за штрихованими змінними, то $f(k)$ можна винести за знак інтеграла й одержати

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \int w_{kk'} (1 - f(\vec{k}')) dV_{k'}. \quad (1.29)$$

Для невинродженого колективу часток $f(k) \ll 1$ і підінтегральний вираз спрощується:

$$1/\tau(\vec{k}) \equiv \lambda(\vec{k}) = \int w_{kk'} dV_{k'}. \quad (1.30)$$

Далі нам траплятимуться різні часи релаксації, і замість зворотного часу релаксації зручно використовувати *швидкість розсіювання* $\lambda(\vec{k})$, що також має сенс середньої частоти зіткнень.

1.2.2. Статична провідність

Як приклад використання наближення часу релаксації розглянемо поведження функції розподілу електронів в електричному полі. Якщо його немає, то розподіл хвильових векторів \vec{k} , відповідно, швидкостей електронів буде рівномірним у всіх напрямках (рис. 1.2, *a*), їхня сумарна швидкість дорівнюватиме нулю, а функція розподілу буде рівноважною і симетричною відносно початку координат. Обчислення густини струму з (1.5) через усереднення швидкості за функцією розподілу також дає нульовий результат.

За наявності електричного поля, спрямованого назустріч осі x , електрони прискорюються, а всі крапки у верхній частині рис. 1.2, *b*, *в*, що зображують миттєві значення швидкості електронів, будуть із часом рівномірно зміщуватися в напрямку дії сили поля. У момент зіткнення швидкість електронів стає випадковою, а крапки на рисунку

.....
 «перестрибують» у випадкові місця (приклад відповідного переходу позначено стрілкою). Такі процеси приводять до двох протилежних тенденцій: під дією електричного поля функція розподілу зміщується вправо, а зіткнення, хаотизуючи рух електронів, прагнуть повернути функцію розподілу в рівноважний стан. Очевидно, що в стаціонарному стані ці дві тенденції врівноважують одна одну за деякої зміщеної функції $N = N_0 + \Delta N$ і $f = f_0 + \Delta f$.

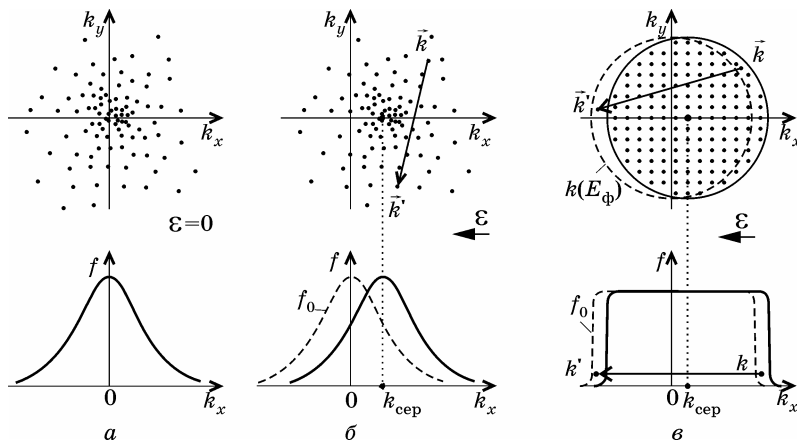


Рис. 1.2. Зміна функції розподілу електронів в електричному полі. Якщо електричного поля немає (а), рівномірний розподіл хвильових векторів (угорі) спричиняє симетричний характер функції розподілу. В електричному полі (б, в) зсув хвильових векторів у напрямку дії сили й розсіювання електронів у випадкові стани врівноважуються за деякої зміщеної функції розподілу. Слід звернути увагу на те, що в невиродженому колективі (б) розсіювання викликає перехід електрона (показано стрілкою) практично в будь-який стан, а у виродженому (в) – лише в незаповнені стани поблизу енергії Фермі

Усередненням швидкості за (1.4) знаходять значення швидкості дрейфу, причому внесок у значення інтеграла дає тільки добавка $\Delta N = g(k)\Delta f$. Відповідно й значення густини струму визначається також нерівноважною добавкою

$$\vec{j}(\vec{r}) = -e \int \vec{v} \Delta N(\vec{r}, \vec{k}) dV_k = -e \int \vec{v} g(\vec{k}) \Delta f(\vec{r}, \vec{k}) dV_k. \quad (1.31)$$

Для знаходження нерівноважної частини функції розподілу скористаємося рівнянням (1.28), яке за умови стаціонарності ($\partial f/\partial t = 0$), просторової однорідності поля ($\mathcal{E} = \text{const}$) й колективу ($\partial f/\partial \vec{r} = 0$), набуває вигляду

$$\frac{\vec{F}}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = -\frac{\Delta f}{\tau}. \quad (1.32)$$

Оскільки функція f залежить від хвильового вектора через закон дисперсії $E(\vec{k})$, то $\partial f/\partial \vec{k} = (\partial f/\partial E)(\partial E/\partial \vec{k}) = \hbar \vec{v}(\partial f/\partial E)$. Тут використано співвідношення, що визначає швидкість електрона із закону дисперсії [5]. Якщо функція розподілу не дуже відрізняється від рівноважної ($\Delta f \ll f_0$), що спостерігається в слабких електричних полях, то в лівій частині рівняння (1.32) можна зневажити членами другого порядку малості й вважати, що $\partial f/\partial E \approx \partial f_0/\partial E$. Тоді при $\vec{F} = -e\vec{\mathcal{E}}$

$$e \vec{v} \vec{\mathcal{E}} \partial f_0/\partial E = \Delta f/\tau. \quad (1.33)$$

Звідси знаходимо значення нерівноважної частини функції розподілу в стаціонарному стані

$$\Delta f_{\text{ст}} = e\tau \vec{v} \vec{\mathcal{E}} \partial f_0/\partial E. \quad (1.34)$$

Слід зазначити, що вираз (1.33) не зміниться навіть якщо сила в (1.32) включає й силу Лоренца $\vec{F}_{\text{Л}} = -e[\vec{v} \times \vec{B}]$, оскільки $\vec{v}[\vec{v} \times \vec{B}] = 0$. Це означає, що наявність магнітного поля лише опосередковано впливає на функцію розподілу.

Отже, густина струму (1.31) у слабкому електричному полі, як і очікувалося, пропорційна напруженості поля:

$$\vec{j} = -e^2 \vec{\mathcal{E}} \int \tau v^2 g(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} dV_k. \quad (1.35)$$

Надалі від інтегрування по k -простору зручно перейти до інтегрування по енергії, використовуючи співвідношення $g(\vec{k})dV_k = g(E)dE$, де $g(E)$ при квадратичному законі дисперсії пропорційна $(E - E_c)^{1/2}$ [5]. До того ж, оскільки

.....
 (1.34) містить скалярний добуток $\vec{v}\vec{\mathcal{E}}$, то в (1.35) замість v^2 треба підставити квадрат швидкості руху в напрямку вектора електричного поля. Тому $m^*v^{2/2} = E/3$ і

$$\vec{j} = -e^2\vec{\mathcal{E}} \int_0^\infty \frac{2\tau}{3m^*} E g(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} dE. \quad (1.36)$$

Інтегрування тут слід проводити по зоні, яка нас цікавить, починаючи відлік від її дна. Наприклад, якщо зона провідності містить кілька долин з еліпсоїдальними ізоенергетичними поверхнями, по-різному орієнтованими відносно напрямку вектора електричного поля, то інтеграл складатиметься із суми інтегралів по кожній долині. Це дозволить вважати ефективну масу постійною для кожної долини (у межах квадратичності закону дисперсії) і винести її за знак інтеграла. Якщо і час релаксації вважати незалежним від енергії, що зазвичай цілком можливо в слабких електричних полях, то підінтегральний вираз, що залишився, можна подати як $F(E)df_0$ і використати формулу інтегрування по частинах

$$\int_0^\infty F(E)df_0 = F(E)f_0|_0^\infty - \int_0^\infty f_0 dF = -\int_0^\infty f_0(E)g(E)dE.$$

Перший доданок дорівнює нулю, оскільки на дні зони $g(E) = 0$, а при збільшенні енергії $f_0(\infty) \rightarrow 0$. Другий доданок набуває зазначеного вигляду внаслідок того, що $dF/dE = g(E)$, і дорівнює рівноважній концентрації електронів.

Отже, для однодолинної моделі зонної структури спостерігається пряма пропорційність між густиною струму і напруженістю електричного поля, відома як закон Ома

$$\vec{j} = (e^2 n \tau / m^*) \vec{\mathcal{E}} = \sigma \vec{\mathcal{E}}. \quad (1.37)$$

За наявності декількох долин загальний струм складається з внесків електронів кожної долини зі своїми параметрами τ і m^* . Іноді загальний вигляд виразу (1.37) можна

.....
зберегти, використавши замість m^* деяку усереднену по різних долинах ефективну масу, яку називають *омічною*.

1.2.3. Нестационарна динаміка дрейфу

Омічну залежність між струмом і полем (1.37) отримано для стаціонарного стану. Зі зміною напруженості електричного поля спостерігаються перехідні процеси, які також можна досліджувати за допомогою кінетичного рівняння (1.28). Приймаючи, як і раніше, умову просторової однорідності електричного поля і функції розподілу та замінивши третій доданок у лівій частині (1.28) на $\Delta f_{\text{ст}}/\tau$ згідно з (1.34), одержимо:

$$\partial(\Delta f)/\partial t + \Delta f/\tau = \Delta f_{\text{ст}}/\tau. \quad (1.38)$$

Якщо ввімкнути електричне поле в момент часу t_0^+ (рис. 1.3), спостерігатимемо поступовий перехід з рівноважного стану ($\Delta f(t_0^+) = 0$) у стаціонарний ($\Delta f(\infty) = \Delta f_{\text{ст}}$) відповідно до розв'язку (1.38):

$$\Delta f(t) = \Delta f_{\text{ст}}\{1 - \exp[-(t - t_0^+)/\tau]\}. \quad (1.39)$$

Перехідні процеси після вимикання поля ($\mathcal{E} = 0$) можна описати кінетичним рівнянням (1.28), яке для нерівноважної добавки Δf набуде вигляду

$$\partial(\Delta f)/\partial t + \Delta f/\tau = 0. \quad (1.40)$$

Якщо поле вимкнули в стаціонарному стані (рис. 1.3) у момент t_0^- , тобто $\Delta f(t_0^-) = \Delta f_{\text{ст}}$, то розв'язком рівняння (1.40) буде функція

$$\Delta f(t) = \Delta f_{\text{ст}}\exp[-(t - t_0^-)/\tau], \quad (1.41)$$

яка показує, що після вимикання поля відбувається *релаксація*, тобто повернення функції розподілу в рівноважний стан.

.....

Так само як нерівноважна добавка до функції розподілу, змінюються з часом дрейфова швидкість і густина струму. Значення струму, обумовлене законом Ома (1.37), досягається *не миттєво* після ввімкнення електричного поля, так само як і зникає після його вимкнення. Інерційність цього процесу визначається часом, необхідним для здійснення зіткнень *всіма частками*, у результаті чого має відбутися така хаотизація станів, що відповідає рівноважній функції розподілу. Середнє значення цього часу дорівнює часу релаксації τ . Формально, як це видно з рис. 1.3, за час τ закінчувалися б перехідні процеси, якби їхня швидкість залишалася такою самою, як і на початку. Насправді ж час установлення стаціонарного або рівноважного стану беруть рівним $(3...5)\tau$. Характерні значення часу релаксації порядку $10^{-12}...10^{-14}$ с приблизно дорівнюють часу вільного пробігу в одночастковій моделі дрейфу.

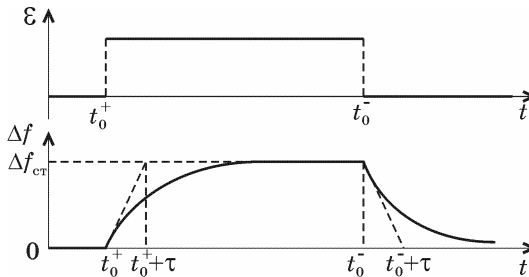


Рис. 1.3. Перехідні процеси зміни нерівноважної частини функції розподілу електронів і густини їхнього струму внаслідок увімкнення й вимкнення електричного поля. Похилі штрихові лінії – дотичні до кривих у моменти t_0^+ й t_0^-

Слід зазначити одну особливість релаксації функції розподілу, характерну для вироджених колективів (див. рис. 1.2, *в*). На відміну від невироджених, де ймовірність заповнення станів дуже мала й можливі переходи електронів (див. рис. 1.2, *б*) практично в будь-які стани, у вироджених колективах усі стани всередині ізоенергетичної поверхні Фермі заповнені, й переходи туди заборонені принципом Паулі. Тому під час релаксації розподілу в результаті зіткнень переважатимуть переходи зі станів \bar{k} ,

.....
 близьких до $\bar{k}(E_\Phi)$, в яких електрони прискорюються електричним полем, у стани \bar{k}' , також близькі до $\bar{k}(E_\Phi)$, але в них електрони гальмуються (див. рис. 1.2, в). Тому в релаксації беруть участь практично лише електрони в станах поблизу поверхні Фермі, тобто у виразі (1.37) потрібно використовувати час релаксації $\tau(E_\Phi)$ саме для цієї групи електронів.

1.2.4. Високочастотна провідність

Якщо електричне поле, що діє на електрони, змінне і змінюється за законом $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_m \exp(i\omega t)$, то у функції розподілу за тим самим законом від часу залежатиме тільки нерівноважна добавка $f(t) = f_0 + \Delta f \exp(i\omega t)$. Природно, що це твердження буде придатним для слабого електричного поля, коли $\Delta f \ll f_0$. Для тих самих припущень про просторову однорідність поля й колективу часток, що й у статичному полі (п. 1.2.2), кінетичне рівняння набуде вигляду

$$i\omega \Delta f - \frac{e\vec{\mathcal{E}}_m}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial \bar{k}} = -\frac{\Delta f}{\tau} \quad (1.42)$$

і його можна подати в такій самій формі, що й (1.32), якщо замінити величину τ на $\tau_\omega = \tau/(1 + i\omega\tau)$. Тому всі висновки, отримані для постійного поля, можна використовувати для випадку змінного поля, якщо скористатися цією заміною.

Між струмом і напруженістю поля зберігається пропорційна залежність, однак коефіцієнт пропорційності, тобто питома електропровідність σ_ω , стає комплексною величиною, яка залежить від частоти за тим самим законом, що й час релаксації τ_ω :

$$\sigma_\omega = \frac{\sigma}{1 + i\omega\tau} = \frac{\sigma(1 - i\omega\tau)}{1 + \omega^2\tau^2} = \sigma' - i\sigma'' \quad (1.43)$$

.....

Комплексний характер величини σ_ω означає, що між змінами струму й поля існує фазове запізнення на величину $\arctg\omega\tau$. Цей фазовий зсув обумовлений, однак, не інерційністю, пов'язаною з масою часток, а статистичним характером їхніх зіткнень. Виявляється цей ефект на частотах, період коливань яких сумірний із часом релаксації ($\omega\tau \geq 1$). За менших частот за час напівперіоду поля встигає встановитися значення нерівноважної добавки до функції розподілу, як і в статичному полі (1.34). На високих частотах, крім зазначеного фазового зсуву, за час прискорювального напівперіоду поля добавка Δf не встигає досягти стаціонарного значення і значення густини струму зменшується відповідно до зменшення питомої електропровідності $|\sigma_\omega| = \sigma / \sqrt{1 + \omega^2\tau^2}$.

Ще одна цікава особливість пов'язана із уявною частиною σ_ω . Звернімося до першого рівняння Максвелла ($\text{rot}\vec{H} = \partial\vec{D}/\partial t + \vec{j}$), яке в комплексній формі можна подати як $\text{rot}\vec{H} = (i\omega\varepsilon\varepsilon_0 + \sigma' - i\sigma'')\vec{E}$. Звідси стає очевидним, що уявна частина електропровідності σ'' відіграє ту саму роль, що й діелектрична проникність, а це може помітно позначитися на оптичних властивостях речовини. Однак, якщо перший доданок являє собою струм зміщення з ємнісним характером, то третій доданок, зумовлений інерційністю процесів релаксації і пропорційний σ'' , має індуктивний характер.

1.3. РІВНЯННЯ ЗБЕРЕЖЕННЯ

1.3.1. Усереднення кінетичного рівняння

Наближення часу релаксації, істотно спрощуючи кінетичне рівняння, полегшує знаходження функції розподілу, якщо відомі механізми розсіювання і значення їхньої швидкості. Але одержувана при цьому інформація часто буває надлишковою, коли, наприклад, потрібно знати лише деякі усереднені величини або їхні просторові розподіли.

Найважливішими характеристиками колективу найчастіше є концентрація, потік і енергія часток. Простіше й економніше визначати ці величини або їхні просторово-часові функції не через функцію розподілу, а з диференціальних рівнянь для цих величин. Такі рівняння можна отримати безпосередньо з кінетичного рівняння, якщо провести усереднення до початку його розв'язку. Для цього всі доданки рівняння (1.12) домножують на відповідну усереднювану величину й інтегрують по потрібній області k -простору. У результаті отримують диференціальні рівняння в частинних похідних для середніх величин, що залежать тільки від координат і часу. У літературі такі рівняння трапляються в різних формах, що відрізняються використанням тих чи інших, часто досить тонких, припущень, пов'язаних, в основному, з вибором моделі (гідродинамічної, квазігідродинамічної тощо) колективу часток. Почасти з цієї причини такі рівняння називають *феноменологічними*, а за своєю суттю вони є рівняннями збереження.

Найпростішу форму таких рівнянь можна отримати, якщо перед усередненням перші два доданки (1.12), що включають частинні похідні по координатах і часу, «згорнути» в «повну» похідну по цих змінних обернено тому, як це було зроблено на початку п. 1.1.2. Зазначимо, що після інтегрування по k -простору жодна з величин не залежатиме від \vec{k} . Якщо усереднювана величина $\varphi(\vec{k})$ не залежить явно від \vec{r} і t , то її можна внести під знак частинних похідних по цих змінних, а інтеграл по обраному об'єму k -простору від цих доданків, домножених на $\varphi(\vec{k})$, з урахуванням (1.6) набуде вигляду:

$$\int_{v_k} \left(\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} \right) \varphi(\vec{k}) d\vec{k} = \frac{d}{dt} \int_{v_k} N(\vec{r}, \vec{k}, t) \varphi(\vec{k}) d\vec{k} = \frac{d}{dt} [n(\vec{r}, t) \varphi_{\text{ср}}(\vec{r}, t)]. \quad (1.44)$$

Третій доданок у кінетичному рівнянні являє собою похідну dN/dt за фіксованих значень \vec{r} і t . Проінтегру-

.....
 вавши його по V_k і врахувавши, що $d\bar{k}/dt = \bar{F}/\hbar$ не залежить від k , отримаємо

$$\int_{V_k} (dN/dt) d\bar{k} = \int_{V_k} (d\bar{k}/dt) dN = (\bar{F}/\hbar) N|_{V_k}. \quad (1.45)$$

Якщо функція розподілу на межах області інтегрування прямує до нуля, що часто виконується у разі експоненціального характеру функцій, які до неї входять, то $N|_{V_k} = 0$.

Домножаючи перед інтегруванням третій доданок на \bar{k} і використовуючи формулу інтегрування по частинах та (1.3), отримуємо

$$\int_{V_k} \bar{k} \frac{dN}{dt} d\bar{k} = \frac{\bar{F}}{\hbar} \int_{V_k} \bar{k} dN = \frac{\bar{F}}{\hbar} \left[\bar{k} N|_{V_k} - \int_{V_k} N d\bar{k} \right] = -\frac{\bar{F}}{\hbar} n(\bar{r}, t). \quad (1.46)$$

Подібним чином перетворюють і третій доданок, домноживши його на $E(\bar{k})$ з урахуванням того, що $dE/d\bar{k} = \hbar v$:

$$\begin{aligned} \int_{V_k} E(\bar{k}) \frac{dN}{dt} d\bar{k} &= \frac{\bar{F}}{\hbar} \int_{V_k} E(\bar{k}) dN = \\ &= \frac{\bar{F}}{\hbar} \left[E(\bar{k}) N|_{V_k} - \int_{V_k} N \frac{dE}{d\bar{k}} d\bar{k} \right] = -\bar{F} n(\bar{r}, t) \bar{v}_{\text{сеп}}(\bar{r}, t). \end{aligned} \quad (1.47)$$

Провівши подібні процедури інтегрування з правою частиною кінетичного рівняння, одержимо швидкості зміни за рахунок зіткнень концентрації $(dn/dt)_c$, сумарного значення хвильового вектора $(d\bar{k}_\Sigma/dt)_c$ і повної енергії $(dE_\Sigma/dt)_c$. У підсумку, підставивши в (1.44) 1, \bar{k} або E замість φ , отримаємо відповідні рівняння збереження для концентрації

$$dn/dt = (dn/dt)_c, \quad (1.48)$$

середнього значення хвильового вектора

Якщо область інтегрування V_k включає стани тільки однієї зони, наприклад зони провідності, а міжзонні генераційно-рекомбінаційні переходи врівноважують один одного, то $(dn/dt)_c = 0$ і повна кількість часток у зоні зберігається

$$dn(\vec{r}, t)/dt = 0. \quad (1.55)$$

Використавши гідродинамічну модель електронного колективу ($\text{div } \vec{v} = 0$), отримаємо рівняння

$$\partial n(\vec{r}, t)/\partial t + \text{div}(n \vec{v}) = 0, \quad (1.56)$$

яке (домножене на заряд електрона) відоме як *рівняння неперервності струму* або *закон збереження заряду*:

$$\partial \rho / \partial t + \text{div } \vec{j} = 0. \quad (1.57)$$

Якщо рівноважний стан порушено і швидкості генерації $G_n = (dn/dt)_c^+$ і рекомбінації $R_n = (dn/dt)_c^-$ різні, то рівняння неперервності для рухливих електронів зазвичай записують як

$$\partial n(\vec{r}, t)/\partial t + \text{div}(\vec{j}_n / e) = G_n - R_n. \quad (1.58)$$

Аналогічну форму має рівняння для дірок

$$\partial p(\vec{r}, t)/\partial t + \text{div}(\vec{j}_p / e) = G_p - R_p. \quad (1.59)$$

Останні два рівняння називають *рівняннями неперервності для рухливих носіїв*. Їх зазвичай використовують разом з рівнянням Пуассона

$$\nabla^2 V = -\rho(\vec{r}) / \epsilon \epsilon_0 = e(\Delta n - \Delta p) / \epsilon \epsilon_0 \quad (1.60)$$

та описом механізмів генерації та рекомбінації для аналізу поведінки нерівноважних носіїв у напівпровідниковій плазмі. Якщо швидкості генерації і рекомбінації подати у вигляді (1.52), то з'являються часи релаксації τ_n і τ_p , які називають *часами життя* нерівноважних носіїв.

Рівняння (1.51) за умови збереження загальної кількості часток у зоні записують як рівняння збереження для середнього дрейфового значення імпульсу $\bar{p}(\bar{r}, t)$ (індекс середнього значення опускають)

$$d\bar{p}/dt - \bar{F} = -\bar{p}/\tau_p, \quad (1.61a)$$

або для дрейфової швидкості

$$d\bar{v}/dt - \bar{F}/m^* = -\bar{v}/\tau_p. \quad (1.61b)$$

Наведені рівняння мають простий фізичний смисл: швидкість спрямованого руху збільшується під дією сили електричного поля, як і для вільних часток, і зменшується за рахунок розсіювання носіїв, або «сили тертя» $-\bar{p}/\tau_p$. У статичному електричному полі ці сили врівноважуються і

$$\bar{v} = -(e\tau_p/m^*)\bar{E} = -\mu\bar{E}, \quad (1.62)$$

тобто рухливість визначається середнім часом релаксації імпульсу.

Відповідно до (1.53) цей час знаходять через усереднення оберненого часу релаксації $1/\tau = \lambda_\Sigma = \sum_i \lambda_i$, домноженого на хвильовий вектор, за функцією розподілу

$$\frac{\bar{p}}{\tau_p} = \frac{\hbar}{n} \int \bar{k} \lambda_\Sigma N(\bar{k}) d\bar{k}. \quad (1.63)$$

Наявність тут сумарної швидкості розсіювання, яка включає всі механізми співударянь, притаманні певному матеріалу, означає, що будь-яке розсіювання приводить у тій чи іншій мірі до втрати напрямленого імпульсу і хаотизації руху.

Подібні міркування доречні у зв'язку з рівнянням збереження енергії. Якщо загальна кількість часток у зоні незмінна, то рівняння (1.50) для середньої енергії в наближенні часу релаксації набуде вигляду (індекс середнього опускаємо):

$$dE/dt - \bar{F}\bar{v} = - (E - E_0)/\tau_E. \quad (1.64)$$

Для знаходження часу релаксації енергії τ_E використовують усереднення за функцією розподілу (1.54) швидкості розсіювання, домноженої на енергію,

$$\frac{E}{\tau_E} = \frac{1}{n} \int_{V_k} E(\bar{k}) \lambda_\Sigma N(\bar{k}) d\bar{k}, \quad (1.65)$$

причому λ_Σ включає всі механізми розсіювання, крім пружних.

Слід вказати на деяку невідповідність між способами усереднення за виразами (1.53), (1.54), з одного боку, та (1.63), (1.65) – з іншого. Однак ця відмінність незначна за самою суттю наближення часу релаксації, коли відхилення від рівноважного стану мале. Крім зазначених, використовують й інші способи знаходження середніх значень часів релаксації (див. додаток).

1.3.3. Міждолинна релаксація

У багатодолинних напівпровідниках електрони займають нижні стани долин і утворюють відносно уособлені колективи зі своїми характерними параметрами. Тому кінетичне рівняння можна усереднювати за об'ємами k -простору, що включають окремі долини. При цьому, навіть якщо загальна кількість електронів у зоні залишається постійною, міждолинне розсіювання може привести до перерозподілу електронів між окремими долинами i , відповідно, до зміни середніх значень імпульсу та енергії у цих долинах.

Розглянемо для спрощення дводолинну модель зони провідності (рис. 1.4). Знаходження рівнянь збереження

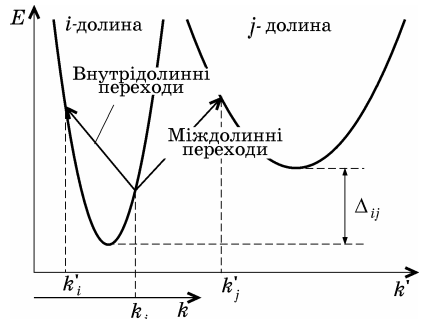


Рис. 1.4. Позначення внутрі- і міждолинних переходів електронів зі стану k в k' у дводолинній моделі зонної структури

.....
 для електронів i -долини передбачає інтегрування доданків кінетичного рівняння по вихідних k -станах тільки цієї долини. Кінцевими k' -станами, що входять до інтеграла зіткнень (1.16), можуть бути як внутрішні стани i -долини, так і стани іншої (інших) j -долини. Урахування тільки внутрішніх переходів з k - у k' -стани (внутрідолинних видів розсіювання) приведе до таких самих за формою рівнянь збереження, що й для однодолинної моделі. Для знаходження додаткових членів, обумовлених міждолинним розсіюванням, в інтегралі зіткнень з усіх k' -станів треба залишити стани тільки j -долини.

У такому випадку інтеграл зіткнень (1.16) під час усереднення по k -простору за формулою (1.44) при $\varphi = 1$ набуває вигляду

$$[dn/dt]_{c_{ij}} = - \int_{V_k} \int_{V_{k'}} [w_{ij}N(k) - w_{ji}N(k')] dV_{k'} dV_k. \quad (1.66)$$

Множники $(1 - f(k))$ і $(1 - f(k'))$ у (1.16) фактично забороняють переходи в заповнені стани, і для формального спрощення їх можна включити в dV_k і $dV_{k'}$, якщо під кінцевими станами мати на увазі тільки вільні. Перший доданок, що характеризує вихід електронів з i -долини, з урахуванням (1.30) зручно подати таким чином:

$$- \int_{V_k} [\int_{V_{k'}} w_{ij} dV_{k'}] N(k) dV_k = - \int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} N(k) dV_k = -n_i / \tau_{nij}, \quad (1.67)$$

де τ_{nij} – час міждолинної релаксації концентрації, усереднений по функції розподілу тільки i -долини:

$$1/\tau_{nij} = \int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} N(k) dV_k / \int_{V_k} N(k) dV_k. \quad (1.68)$$

Другий доданок, що характеризує «прихід» електронів до i -долини, подамо так само, змінивши порядок інтегрування

$$\int_{V_{k'}} [\int_{V_k} w_{ji} dV_k] N(k') dV_{k'} = - \int_{V_{k'}} \tau_{ji}^{-1} N(k') dV_{k'} = n_j / \tau_{nji}, \quad (1.69)$$

де τ_{nji} – також концентраційний час міждолинної релаксації електронів з j -долини в i -ту, але усереднений за функцією розподілу j -долини:

$$1/\tau_{nji} = \int_{V_k} \tau_{ji}^{-1} N(k') dV_{k'} / \int_{V_k} N(k') dV_{k'}. \quad (1.70)$$

У підсумку отримаємо рівняння збереження для концентрації електронів в i -долині:

$$dn_i/dt = -n_i/\tau_{nij} + n_j/\tau_{nji} \quad (1.71a)$$

й аналогічне рівняння для j -долини

$$dn_j/dt = -n_j/\tau_{nji} + n_i/\tau_{nij}. \quad (1.71b)$$

Ці рівняння становлять систему, праві частини в них різняться тільки знаком, бо згідно з (1.55)

$$d(n_i + n_j)/dt = 0. \quad (1.72)$$

Потрібно також зазначити, що в стаціонарному стані ($dn_i/dt = dn_j/dt = 0$) міждолинні переходи взаємно врівноважуються, і з урахуванням відомих виразів для концентрації електронів у зоні провідності невироджених напівпровідників [5] можна отримати

$$\tau_{nij}/\tau_{nji} = n_i/n_j = (m_{di}^*/m_{dj}^*)^{3/2} \exp(-\Delta_{ij}/k_B T). \quad (1.73)$$

Подібні перетворення можна зробити з рівнянням збереження імпульсу (хвильового вектора). Домноживши всі доданки кінетичного рівняння на \vec{k} та інтегруючи по тій частині k -простору, яка включає стани тільки i -долини, отримаємо рівняння збереження імпульсу у формі (1.49) або (1.51) з правою частиною (1.53), у якій τ_p враховує тільки внутрідолинні види розсіювання. Та частина інтеграла міждолинних зіткнень, що залишилася, має структуру, подібну до (1.66), але підінтегральний вираз потрібно домножити на \vec{k} . Перший доданок, що характеризує

.....
 зменшення імпульсу в i -долині за рахунок виходу з неї електронів, можна подати подібно до (1.67):

$$-\int_{V_k} [\int_{V_k'} w_{ij} dV_k'] \bar{k} N(k) dV_k = -\int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} \bar{k} N(k) dV_k = -n_i \bar{k}_{icep} / \tau_{pij}, \quad (1.74)$$

де τ_{pij} – час міждолинної релаксації імпульсу, який визначають через усереднення

$$1/\tau_{pij} = \int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} \bar{k} N(k) dV_k / \int_{V_k} \bar{k} N(k) dV_k. \quad (1.75)$$

Другий доданок, що характеризує перенесення імпульсу електронів з j -долини в i -ту, дорівнює нулю, бо після зіткнення ці електрони набувають випадкових значень хвильового вектора, симетрично розміщених відносно $k = 0$. У підсумку для рівняння балансу імпульсу в i -долині можна зберегти форму (1.51) з правою частиною (1.53):

$$d(n_i \bar{p}_i) / dt - n_i \bar{F} = -n_i \bar{p}_i / \tau_{pi}, \quad (1.76a)$$

але в τ_{pi} необхідно включити як внутрідолинні переходи, так і міждолинні

$$1/\tau_{pi} = 1/\tau_{pii} + 1/\tau_{pij}. \quad (1.77a)$$

Для j -долини рівняння збереження імпульсу аналогічне (1.76) за відповідної заміни індексів:

$$d(n_j \bar{p}_j) / dt - n_j \bar{F} = -n_j \bar{p}_j / \tau_{pj} \quad (1.76b)$$

з часом релаксації імпульсу, що враховує як внутрі- так і міждолинні переходи з j -долини в i -ту

$$1/\tau_{pj} = 1/\tau_{pjj} + 1/\tau_{pji}. \quad (1.77b)$$

Рівняння (1.76a) і (1.76b) становлять систему, яку слід розв'язувати разом із системою (1.71a) і (1.71b), що характеризує заселеність долин.

.....

Так само можна провести перетворення інтеграла зіткнень, домноженого на E , і отримати рівняння збереження енергії для i -долини. За формою воно збігатиметься з (1.50), а права частина його матиме форму (1.54) з часом релаксації енергії τ_{Eii} , який враховує тільки внутрідолинні механізми розсіювання. Міждолинне розсіювання приводить до появи у правій частині додаткових членів, один з яких $(-n_i E_i / \tau_{Eij})$ характеризує швидкість зменшення сумарної енергії електронів у i -долині під час їх переходу в j -долину і містить міждолинний час релаксації енергії τ_{Eij} , який визначають за співвідношенням

$$1/\tau_{Eij} = \int_{V_k} \tau_{ij}^{-1} E(k) N(k) dV_k / \int_{V_k} E(k) N(k) dV_k. \quad (1.78)$$

Тут обернений час релаксації τ_{ij}^{-1} знаходять інтегруванням імовірності переходів $w_{kk'}$ по k' -станах j -долини

$$\tau_{ij}^{-1} = \int_{V_{k'}} w_{kk'} dk', \quad (1.79)$$

а усереднення в (1.78) проводять по k -станах i -долини.

У результаті зворотних переходів електрони з j -долини в i -ту приносять енергію, яку зручно подати двома доданками у правій частині рівняння балансу енергії. Один з них, а саме $(n_j E_0 / \tau_{Eji})$, пропорційний концентрації n_j і рівноважній енергії E_0 , оскільки електрони переходять в i -ту долину безпосередньо в результаті релаксуючих зіткнень. Час релаксації τ_{Eji} визначають подібно до (1.78), але усереднення проводять для швидкості розсіювання $1/\tau_{ji}$ по станах j -долини.

Другий доданок $(n_j \Delta_{ji} / \tau_{nji})$ пов'язаний з міждолинною відстанню $\Delta_{ji} = E_j - E_i$, тобто з різним початком відліку кінетичної енергії в різних долинах. Слід зазначити, що швидкість зменшення цієї енергії визначається концентраційним часом релаксації τ_{nji} (1.70).

У результаті систему рівнянь, що описують релаксацію енергії у дводолинній моделі, можна подати так:

$$\frac{d(n_i E_i)}{dt} - n_i \bar{v}_i \bar{F} = -\frac{n_i(E_i - E_0)}{\tau_{Ei}} - \frac{n_i E_0}{\tau_{Eij}} + \frac{n_j E_0}{\tau_{Eji}} + \frac{n_j \Delta_{ji}}{\tau_{nji}}; \quad (1.80a)$$

$$\frac{d(n_j E_j)}{dt} - n_j \bar{v}_j \bar{F} = -\frac{n_j(E_j - E_0)}{\tau_{Ej}} - \frac{n_j E_0}{\tau_{Eji}} + \frac{n_i E_0}{\tau_{Eij}} - \frac{n_i \Delta_{ji}}{\tau_{nij}}. \quad (1.80b)$$

Тут часи релаксації τ_{Ei} і τ_{Ej} включають як внутрі-, так і міждолинні механізми розсіювання:

$$1/\tau_{Ei} = 1/\tau_{Eii} + 1/\tau_{Eij}; \quad 1/\tau_{Ej} = 1/\tau_{Ejj} + 1/\tau_{Eji}. \quad (1.81)$$

Якщо скласти рівняння (1.80a) та (1.80b) і розділити одержану суму на сумарну концентрацію $n = n_i + n_j$, а також увести середні по долинах значення енергії $E = (n_i E_i + n_j E_j)/n$, швидкості дрейфу $\bar{v} = (n_i \bar{v}_i + n_j \bar{v}_j)/n$ і часу релаксації енергії $1/\tau_E = [(n_i(E_i - E_0)/\tau_{Ei} + n_j(E_j - E_0)/\tau_{Ej})]/n$, то отримаємо рівняння збереження середньої для двох долин енергії одного електрона:

$$\frac{dE}{dt} - \bar{v} \bar{F} = -\frac{E - E_0}{\tau_E} + \frac{\Delta_{ji}}{n} \left(\frac{n_j}{\tau_{nji}} - \frac{n_i}{\tau_{nij}} \right). \quad (1.82)$$

Це рівняння відрізняється від (1.64) додатковим членом, пов'язаним з релаксацією надлишкової енергії, що виникає під час переходів електронів між нееквівалентними долинами з різним рівнем початку відліку кінетичної енергії. Під час переходу електрона з більш високої j -долини в i -ту його кінетична енергія збільшується на Δ_{ji} (див. рис. 1.4), що потребує додаткового часу для її релаксації. Зворотні ij -переходи зменшують енергію, прискорюючи релаксаційні процеси.

Слід звернути увагу на те, що другий у правій частині (1.82) доданок виявляється тільки в разі перерозподілу концентрацій по долинах. У стаціонарному стані ($dn_i/dt = dn_j/dt = 0$) відповідно до (1.71), де доданки дорівнюють один одному, ці ефекти взаємно зрівноважуються. Але в динамічних ситуаціях це явище може бути досить поміт-

.....
 ним, оскільки міждолинна відстань Δ_{ji} (наприклад, в арсеніді галію вона становить $\approx 0,3$ еВ) зазвичай перевищує рівноважне значення енергії.

Іноді загальний середній час релаксації енергії визначають як

$$1/\tau_E = [n_i/\tau_{Ei} + n_j/\tau_{Ej}]/n, \quad (1.83)$$

де ваговими коефіцієнтами є тільки концентрації. Це цілком узгоджується з наближенням часу релаксації (п. 1.2.1), де час τ можна знайти за рівноважною функцією розподілу (1.26).

1.4. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

Назву *метод Монте-Карло* має численна група обчислювальних методів, у яких використовують випадкові числа [3, 6]. В електроніці цей метод, названий іноді *методом часток*, використовують для моделювання колективних ефектів переносу зарядів у різних плазмових (твердотільних або газових) структурах через поведження окремих часток: їхній балістичний рух під час вільного пробігу й розсіювання у результаті зіткнень. Існують одночастковий і багаточастковий методи Монте-Карло.

Одночастковим методом моделюють рух однієї частки протягом досить довгого (для надійнішого статистичного усереднення) проміжку часу. У багаточастковому методі розглядають поведження великої кількості часток, а потрібні розподіли параметрів (енергії, швидкості, концентрації тощо) знаходять усередненням по ансамблю випадкових реалізацій цих параметрів. Достатньою для надійного усереднення вважається кількість часток порядку $10^4 \dots 10^5$. Очевидно, що в одночастковому методі зовнішні умови, тобто діючі сили, мають зберігатися постійними протягом усього обчислювального експерименту. Тому цей різновид можна використовувати для аналізу кінетичних ефектів лише в статичних полях.

Для аналізу динамічних процесів необхідно використовувати *багаточастковий* метод Монте-Карло. У ньому, як зазначалося, електронну плазму в напівпровіднику пода-

.....
 ють деяким ансамблем модельних часток, кількість яких істотно менша, ніж реальних. Рух часток моделюють за допомогою напівкласичних рівнянь руху [5]:

$$\hbar d\vec{k} / dt = \vec{F}, \quad (1.84a)$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \left(\vec{e}_x \frac{\partial E}{\partial k_x} + \vec{e}_y \frac{\partial E}{\partial k_y} + \vec{e}_z \frac{\partial E}{\partial k_z} \right) \quad (1.84b)$$

у реальному й \vec{k} -просторах. Вплив просторового заряду враховують, розв'язуючи узгоджено з рівняннями руху рівняння Пуассона. Роль періодичного електричного поля кристалічної решітки виявляється через закон дисперсії $E(\vec{k})$ з відповідними ефективними масами. У своєму русі частки взаємодіють із фононами, дефектами решітки та іншими носіями, що приводить до зміни їхніх хвильових векторів та енергії. Ці ефекти враховують як дискретні й миттєві зіткнення, у результаті яких вільний пробіг закінчується розсіюванням.

Основою побудови алгоритму моделювання є часова діаграма (рис. 1.5), що являє собою часові відрізки τ_i вільного руху одного електрона в зовнішньому полі, обмежені моментами зіткнень. Цю діаграму накладають на шкалу (переважно рівномірну) часових інтервалів T , через які перераховують сили, що діють на частки, і фіксують стан часток.

Часи вільного пробігу часток τ_i визначають як випадкові величини відповідно до відомого закону розподілу по швидкості розсіювання $\lambda(\vec{k})$. Оскільки для різних видів зіткнень швидкості розсіювання λ_i різні (див. розд. 2), то спочатку потрібно визначити вид розсіювання також як випадкову величину з імовірністю, пропорційною швидкості відповідного виду розсіювання. У результаті акту розсіювання змінюються значення й напрямок хвильового вектора відповідно до їх закону розподілу, а потім частка продовжує балістичний рух до кінця часового інтервалу T .

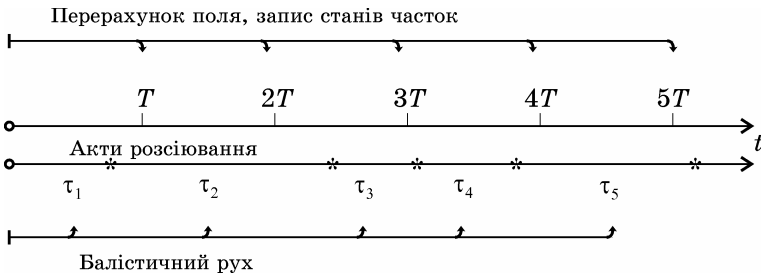


Рис. 1.5. Характерні часові моменти в багаточастковому методі Монте-Карло: шкала моментів перерахування поля й запису станів часток і шкала моментів актів розсіювань, між якими моделюють вільний рух часток

Типовий алгоритм кінетичного моделювання можна подати в такий спосіб. Спочатку задають конфігурацію приладу, профілі легування, закон дисперсії та параметри зонної структури для даного матеріалу, вибирають функцію розподілу $N(\vec{r}, \vec{k}, 0)$, тобто задають початковий розподіл електронів, як просторовий, так і по \vec{k} -станах. Крім того, необхідно розподілити електрони по долинах пропорційно густині станів у них. Оскільки для розрахунку сил, що діють на частки, потрібно чисельно розв'язати рівняння Пуассона, визначаючи потенціали у вузлах деякої просторової сітки, то знаючи розподіл часток у просторі і розподіляючи їх заряд тим чи іншим способом у деякій локальній області, знаходять розподіл густини заряду. Вибираючи метод чисельного інтегрування, для швидшого розв'язання рівняння Пуассона варто враховувати сильну розрідженість матриці відповідної системи алгебричних рівнянь.

Знайшовши розподіл електричного поля, розв'язують рівняння руху по черзі для кожної частки протягом її вільного пробігу τ_i або якщо вона не зіштовхується на цьому часовому кроці, то протягом інтервалу T , а частину, що залишилася ($\tau_i - T$), запам'ятовують. Якщо ж час вільного пробігу $\tau_i < T$, то розігрують процедуру розсіювання і знаходять нову траєкторію за час $T - \tau_i$. У момент часу T запам'ятовують всі параметри руху часток, тобто фіксують розподіл $N(\vec{r}, \vec{k}, T)$. Часовий крок T має бути досить великим, щоб перераховувати поле доводилося якомога рідше,

.....
але разом з тим і достатньо малим, щоб не виникало значних чисельних помилок. Найчастіше T вибирають таким, щоб навіть в області сильного поля частки пролітали не більше одного кроку просторової сітки.

Крім параметрів руху часток на кожному часовому кроці фіксують кількість часток, поглинених або інжекттованих кожним електродом, а також обчислюють нормальну до електрода складову напруженості електричного поля, що дозволяє визначити струми в колі електродів.

З апроксимації нового розподілу густини заряду, розв'язання рівняння Пуассона й розігрування методом Монте-Карло часів вільного пробігу починають наступний цикл аналізу руху часток. Цикли обчислень повторюють до того моменту часу, до якого цікавить розвиток процесу. Послідовність розподілів $N(\bar{r}, \bar{k}, nT)$, що утворюється, імітує еволюцію реальної функції розподілу на цьому інтервалі часу.

Одним з найважливіших фрагментів алгоритму моделювання є блок статистичної обробки результатів, які можна усереднювати як на кожному часовому кроці, так і за довші інтервали часу. Слід також вказати на проблему сприйняття досить великих масивів інформації, що утворюються в результаті моделювання. Тому велику увагу варто приділити блоку візуалізації даних.

Щоб проілюструвати особливості методу Монте-Карло та його можливості, наведемо деякі результати моделювання фізичних процесів в арсенід-галієвому польовому транзисторі із затвором у вигляді бар'єра Шоттки. Типове подання безпосередніх результатів моделювання траєкторій і поля зображено на рис. 1.6 на тлі структури транзистора у вигляді просторового розподілу потенціалу й розташування часток у фіксований момент часу. Якщо це зробити окремо для різних долин, можна наочно побачити, що збудження електронів у верхні долини відбувається лише в області сильного поля в стоковій частині підзатворної області.

Подібні розподіли можна зробити також для швидкості й енергії часток (рис. 1.7) у вигляді «індивідуальних» або усереднених розподілів. Усереднювати можна як по всій товщині транзистора, так і в окремих його шарах.

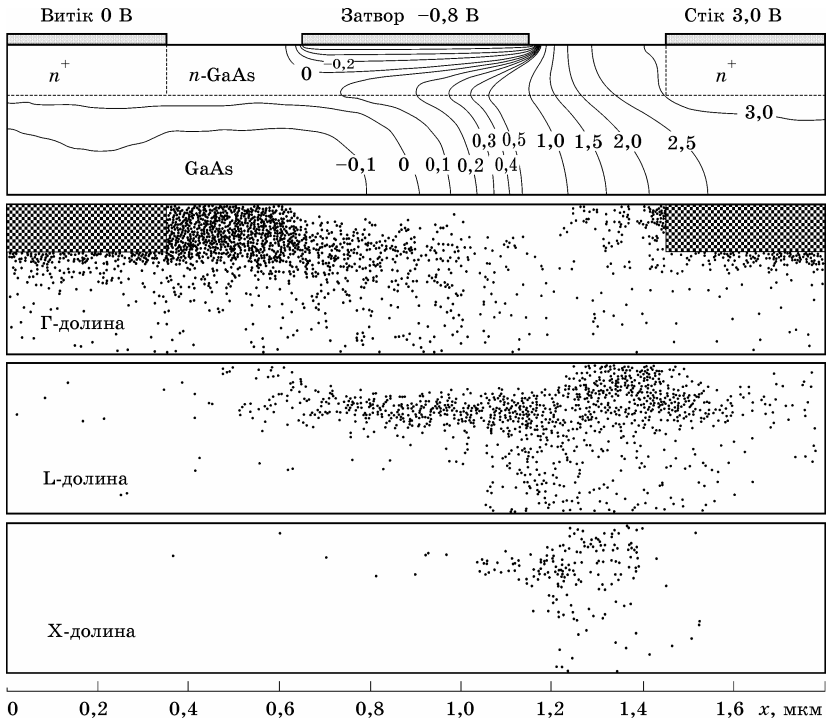


Рис. 1.6. Типове подання розподілу поля за допомогою еквіпотенціальних ліній і розподілу часток у просторі модельованої структури. Просторовий розподіл часток наведено окремо для кожної долини. Штриховою лінією позначено нижню межу епітаксiального шару з високим легуванням

Порівнюючи рисунки для швидкості й енергії, можна звернути увагу на розбіжність просторового розташування максимумів двох кривих. Це пояснюється тим, що підвищення енергії супроводжується переходом електронів у верхні долини, де їхня ефективна маса збільшується, а швидкість відповідно зменшується.

Найважливішою особливістю багаточасткового методу Монте-Карло є можливість моделювання динамічних фізичних процесів. На рис. 1.8 наведено приклади розподілів уздовж каналу транзистора усереднених значень напруженості електричного поля, енергії та швидкості в різні моменти часу в деякому перехідному режимі. Ці розподіли

.....
 поряд із просторовими розподілами часток (рис. 1.6) у ті самі часові моменти можуть дати багато інформації про досить тонкі динамічні особливості фізичних процесів у модельованій структурі.

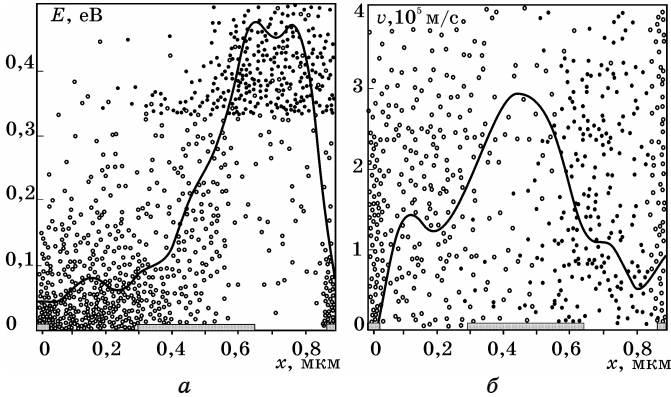


Рис. 1.7. Розподіли енергії (а) і швидкості (б) електронів уздовж каналу польового транзистора у формі «індивідуального» розташування часток й усереднених функцій. Світлі кружки відповідають електронам нижньої долини, темні – верхніх

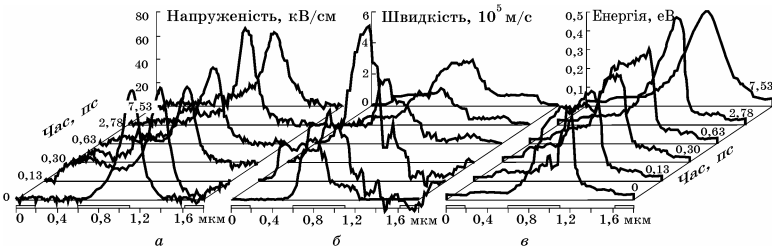


Рис. 1.8. Розподіли напруженості поля, середньої швидкості й енергії часток уздовж каналу транзистора в різні моменти часу перехідного процесу

Обчисливши значення струмів електродів за поданих на них потенціалах в усталеному режимі, одержимо статичні вольт-амперні характеристики приладів.

.....

Якщо ж на електроди подавати східчасті імпульси, то за перехідними характеристиками (рис. 1.9) стандартними методами обчислюють частотні характеристики модельованої структури.

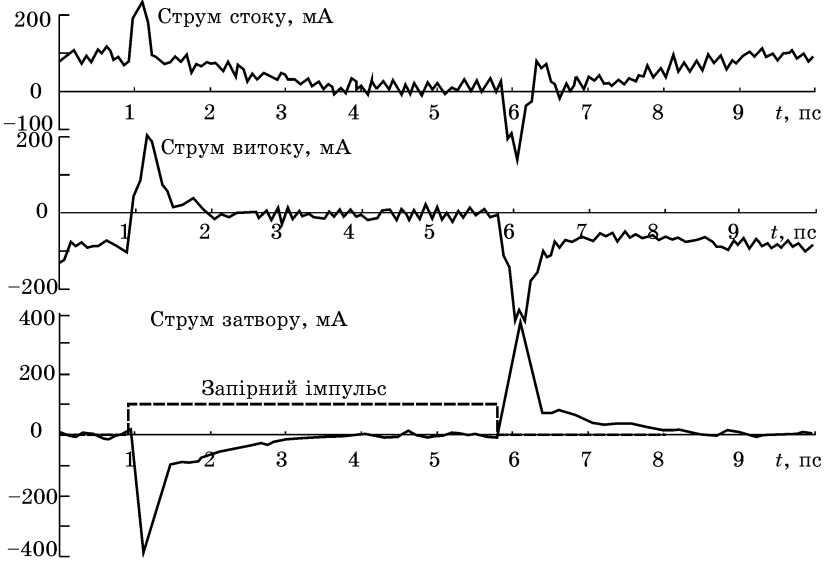


Рис. 1.9. Перехідні характеристики струмів стоку, витоку й затвору після подання на затвор східчастої напруги: запірної й відкриваючої

На наведених рисунках видно одну з характерних рис методу Монте-Карло: поряд з регулярними процесами переносу тут природно моделюються й шуми приладів. Ця очевидна перевага методу потребує, однак, додаткових обчислювальних витрат, пов'язаних з визначенням середніх значень на тлі флуктуацій.

Стосовно твердотільних структур метод Монте-Карло особливо зручний, коли характерні розміри структур становлять мікрометри і менше. Для довших структур потрібно моделювати поведінку більшої кількості часток протягом довших інтервалів часу, що потребує додаткових ресурсів. Для коротших необхідно враховувати ряд додаткових ефектів, серед яких кінцевий час зіткнень, квантові ефекти, інші види розсіювання тощо.

2. РОЗСІЮВАННЯ НОСІЇВ

Кінетичне рівняння лежить в основі теорії ефектів переносу носіїв у твердому тілі. Різноманітність і особливості цих ефектів залежать не тільки від конфігурації й величини зовнішніх полів, але й від фізичних особливостей конкретних механізмів співударянь, що приводять до розсіювання спрямованих потоків носіїв. Ці процеси вивчаються у розділі фізики твердого тіла, що називається *теорією розсіювання*. Тут розглянемо лише характерні особливості деяких найважливіших механізмів розсіювання та принципи їх урахування в інтегралі зіткнень.

Перш за все слід пам'ятати, що поведінку електронів в *ідеальній* кристалічній решітці описують хвильовими функціями у вигляді хвиль Блоха, які поширюються в кристалі як біжучі хвилі з постійною вздовж кристала амплітудою. Поява відбитих хвиль (тобто розсіювання електронів) можлива лише у разі порушення ідеальної періодичності поля кристала за наявності яких-небудь дефектів решітки. Порушення періодичності можуть бути викликані двома причинами. Перша з них пов'язана із стаціонарними, локалізованими у просторі структурними дефектами – домішками, межами, різними дислокаціями. Друга викликана тепловими коливаннями іонів у вузлах кристалічної решітки відносно положення рівноваги. Незважаючи на те, що ці коливання являють собою хвильові збудження періодичної структури решітки, що залежать від часу і просторово не локалізовані, розсіювання електронів на них розглядають як зіткнення з деякими квазічастками – *фононами*, кількість яких може змінюватися внаслідок зіткнення. До таких дефектів належать також збудження в енергетичному спектрі електронів (екситони, плаزمони), за

.....
 певних умов помітним стає електрон-електронне та електрон-діркове розсіювання. Але найтипівіші дефекти – це домішкове розсіювання і різні види фононного розсіювання.

Перед тим, як перейти до аналізу особливостей різних видів розсіювання, розглянемо деякі поняття, за допомогою яких оцінюють ефективність співударянь. Часто такою величиною є *переріз розсіювання*, зміст якого легко сприймається на мові класичної моделі зіткнень з очевидного (при незалежних одне від одного зіткненнях) твердження про те, що середня довжина вільного пробігу обернено пропорційна концентрації розсіювальних центрів n_s :

$$l = 1 / n_s S. \quad (2.1)$$

Коефіцієнт пропорційності S має розмірність площі й називається *ефективним перерізом співударяння* або *розсіювання*. Оскільки $l = v\tau$, то переріз розсіювання пропорційний оберненому часу вільного пробігу

$$S = 1 / n_s \bar{v} \bar{\tau}. \quad (2.2)$$

Іноді розглядають *макроскопічний* ефективний переріз $n_s S = 1 / \bar{l}$, що дорівнює сумі елементарних перерізів усіх розсіювальних центрів в одиниці об'єму і показує середню кількість взаємодій певного виду на одиниці відстані. Співвідношення, подібне до (2.2), має місце і в колективній моделі статистичного опису співударянь, тільки замість часу вільного пробігу $\bar{\tau}$ використовують час релаксації τ .

Часто замість часу релаксації зручно використовувати обернену величину, яка називається *швидкістю розсіювання* і має смисл середньої кількості актів розсіювання певного виду за одиницю часу. Зручність цієї величини в тому, що її знаходять безпосереднім інтегруванням імовірності переходів відповідно, наприклад, до (1.30):

$$\lambda(k) = 1 / \tau(k) = \int w_{kk'} dV_{k'}, \quad (2.3)$$

.....
 а також підсумовують за наявності різних механізмів розсіювання. Порівняно з перерізом розсіювання швидкість розсіювання і час релаксації, мабуть, більш точно відображують специфіку певного виду розсіювання.

2.1. ДОМІШКОВЕ РОЗСІЮВАННЯ

У типових випадках домішки, уведені в напівпровідник, є іонізованими, і викликане ними розсіювання означає відхилення траєкторії електрона електростатичним полем іона. Подібну задачу розглядав Резерфорд, коли досліджував розсіювання α -часток. Електрон або дірка в кулонівському полі домішкового іона мають гіперболічні траєкторії (рис. 2.1). Оскільки маса іона домішки на 3...4 порядки перевищує масу електрона, то передання енергії в результаті їх взаємодії майже не відбувається, і таке співударяння буде практично *пружним*. Відповідно не змінюється значення швидкості, а тільки її напрямок, і $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$. Кут розсіювання θ між векторами \vec{k}' і \vec{k} тим більший, чим менші значення швидкості електрона або дірки і так звана *прицільна відстань* b (рис. 2.1).

Для носіїв у твердому тілі модель Резерфорда дає невірний результат за великих прицільних відстаней: для малих кутів розсіювання інтеграл (2.3) розбігається, що пов'язано з повільністю спадання кулонівського потенціалу. Цей недолік можна усунути, враховуючи поля, створювані іншими іонами домішки і носіями заряду. Їхні поля тією чи іншою мірою екранують поле іона домішки і «обрізають» кулонівський потенціал, послаблюючи його дію перш за все на великих відстанях.

У моделі *Конуелл – Вайскопфа* область дії поля іона домішки обмежують половиною середньої відстані між іонами (рис. 2.2, а), тому максимальна прицільна відстань

$$b_{\max} = a/2 = 1/2 \sqrt[3]{N_d} . \quad (2.4)$$

Цей вираз впливає з умови, що одному атому домішки в середньому відповідає кубічний об'єм з ребром a . Іноді в

літературі можна зустріти дещо інший вираз, який отримано, якщо вважати, що цей елементарний об'єм є сферою з радіусом a . У підсумку врахування обмеження розсіювального поля полями сусідніх атомів домішки дає для швидкості розсіювання

$$\lambda_d = \frac{v}{b_{\max}} \left(\frac{U_i}{2E} \right)^2 \ln \left(1 + \frac{2E}{U_i} \right), \quad (2.5)$$

де $E = m^*v^2/2$ – кінетична енергія носія заряду; $U_i = e^2/4\pi\epsilon\epsilon_0 b_{\max}$ – потенціальна енергія електрона в полі іона на відстані b_{\max} .

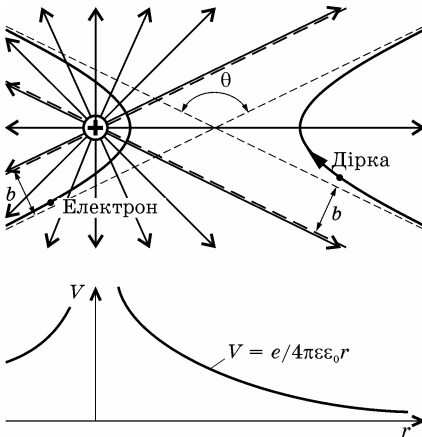


Рис. 2.1. Траєкторії руху електрона і дірки у кулонівському полі іона донорної домішки

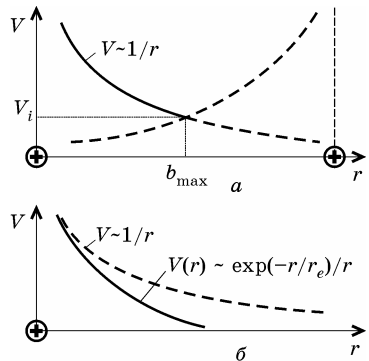


Рис. 2.2. Обмеження потенціальної функції іона домішки у разі екранування розсіювального поля: a – сусідні іонами домішки (модель Коцуелл – Вайскопфа), b – рухливими носіями заряду (модель Брукса – Херрінга)

У моделі Брукса – Херрінга далекодія розсіювального поля іона домішки обмежується його екрануванням полями носіїв заряду. При цьому розподіл потенціалу в околі іона (донорного) описують виразом

$$V(r) = (e/4\pi\epsilon_0 r) \exp(-r/r_e), \quad (2.6)$$

де $r_e = (\epsilon\epsilon_0 k_B T / e^2 n)^{1/2}$ – радіус екранування; n – концентрація екранувальних зарядів (електронів), а у формулі (2.5) змінюється останній співмножник:

$$\lambda_d = \frac{v}{b_{\max}} \left(\frac{U_i}{2E} \right)^2 \left[\ln(1 + \eta) - \frac{\eta}{1 + \eta} \right]. \quad (2.7)$$

Тут $\eta = (2kr_e)^2$, а для квадратичного закону дисперсії, коли $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, $\eta = 8m^* E r_e^2 / \hbar^2$.

Слід зазначити, що вираз (2.6) придатний для максвеллівського розподілу. Але іноді його використовують, якщо середня енергія хаотичного руху електронів помітно перевищує величину $k_B T$, підставляючи у вираз для радіуса екранування *електронну температуру* T_e .

Наведені вирази для швидкості домішкового розсіювання використовують у типових випадках кімнатних температур, коли всі домішкові атоми іонізовані і екранування здійснюють основні носії, концентрація яких дорівнює концентрації домішки. За цих умов, наприклад для германію з концентрацією домішки 10^{23} м^{-3} , при кімнатній температурі середня відстань $b_{\max} \approx 110 \text{ \AA}$, а радіус екранування $r_e \approx 150 \text{ \AA}$, й обидві моделі дають значення швидкості розсіювання порядку 10^{12} с^{-1} . Крім того, обидві моделі підтверджують відомий результат про температурну залежність рухливості. Якщо вважати, що енергія носіїв відповідає тепловій ($E \sim k_B T$, $v \sim \sim T^{1/2}$), і знехтувати повільною логарифмічною залежністю у (2.5), то отримаємо, що швидкість домішкового розсіювання пропорційна концентрації домішки N_d і обернено пропорційна $T^{3/2}$. Модель Конуелл – Вайскофа при дуже низьких температурах дає значно завищений результат (формально $\lambda \rightarrow \infty$ при $T \rightarrow 0$), якщо не враховувати ефекти виморожування домішки.

В області низьких температур певна частина домішки залишається нейтральною і механізм розсіювання носіїв на таких домішкових атомах стає суттєво іншим. Щоб якісно описати процеси розсіювання, скористаємося моделлю вод-

.....
 неподібного атома [5], у якому роль валентного відіграє п'ятий «зайвий» електрон (для донорної домішки), який не бере участі в міжатомних ковалентних зв'язках.

Налітаючий вільний електрон, рух якого в наближенні ефективної маси можна описати за допомогою хвильового пакета, що складається із сукупності плоских хвиль де Бройля, у полі домішкового центру гальмується і своїм електричним полем діє перш за все на валентний електрон, збуджуючи його із основного стану в більш високий. Як нестационарний, цей збуджений стан є суперпозицією стаціонарних станів $2s$, $2p$, $3s$ і т. д., а відповідна хвильова функція має просторово асиметричний характер (рис. 2.3).

Після прольоту електрон знову прискорюється і напрямком його руху визначатиметься інтерференцією хвильового пакета в потенціальному полі атома. Енергія та імпульс електрона, що віддаляється, залежать від поведінки валентного електрона. Якщо останній повернувся у вихідний стан $1s$, то взаємодія носія з атомом домішки має характер *пружного співударяння*, і його енергія лишається такою самою, як і до взаємодії. Якщо валентний електрон переходить у стаціонарний стан $2s$ або вищий, то відбувається *збудження атома*, і енергія електрона, що віддаляється, зменшиться на значення енергії збудження. Якщо атому передано більше енергії, то може відбутися *ударна іонізація домішки*, коли збудження, викликане полем налітаючого електрона, буде достатнім для видалення валентного електрона із сфери дії силового поля домішки, тобто для переведення його в зону провідності.

Квантовомеханічний аналіз цих процесів можна провести лише чисельними методами. Але для пружного розсіювання електронів з енергією, що не перевищує 25 % енергії

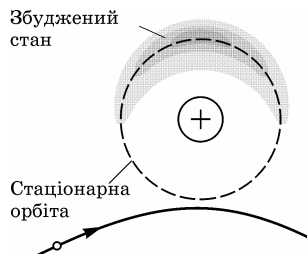


Рис. 2.3. Збудження хвильової функції валентного електрона воднеподібного атома. Заштрихована ділянка характеризує область локалізації $|\psi|^2$ у момент найбільшого збудження

.....
 іонізації домішкового атома, отримано просте аналітичне співвідношення

$$\lambda = 20\hbar N_d r_m / m^*, \quad (2.8)$$

де N_d – концентрація нейтральних домішкових атомів; r_m – радіус першої борівської орбіти воднеподібного атома. Характерною тут є незалежність швидкості розсіювання від енергії електронів або температури. Вплив температури позначається лише на концентрації нейтральної домішки. Якщо кількісно оцінити швидкість розсіювання для германію при $N_d = 10^{23} \text{ м}^{-3}$, отримаємо значення $\sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$, що на порядок нижче, ніж для іонізованої домішки. Тому брати до уваги цей механізм слід, якщо більша частина домішкових атомів залишається нейтральною.

За високих температур, коли кількість основних і неосновних носіїв є сумірною, слід мати на увазі, що швидкості їх розсіювання можуть суттєво різнитися не лише через різні ефективні маси. Відштовхування розсіювальними центрами однойменно заряджених (неосновних) носіїв є більш далекодієвим, ніж притягування носіїв з протилежним знаком (неосновних), що легко можна уявити з рис. 2.1. Тому питання про використання розглянутих моделей для розсіювання неосновних носіїв потребує точнішого аналізу. Проте в цій температурній області більшого значення набувають механізми розсіювання, пов'язані з тепловими коливаннями решітки.

2.2. ФОНОННЕ РОЗСІЮВАННЯ

2.2.1. Спектр фононів

У багатьох питаннях, пов'язаних з тепловими властивостями твердих тіл, виправдовує себе модель Дебая, відповідно до якої теплове збудження викликає не коливання окремих атомів, випадкові та незалежні одне від одного, а *хвильові* процеси зміщення атомів біля положення рівноваги, які поширюються в кристалічній решітці як у єдиному цілому. Хвильові коливання решітки, як і всі інші,

.....
квантуються, а кванти цих хвиль – *фонони* – розглядають як квазічастки, що рухаються в кристалі зі швидкістю, яка відповідає груповій швидкості хвильових процесів і в першому наближенні дорівнює швидкості звуку.

Спектр частот фононів визначається періодичністю структури та параметрами решітки й описується *законом дисперсії*. Як і для електронних хвиль у кристалі, цей закон можна подати як функцію $\omega(k_\phi)$ або $E(k_\phi)$, де k_ϕ – хвильовий (точніше, квазіхвильовий) вектор фононів. Ця функція є парною та періодичною з періодом $2\pi/a$ (для одновимірного кристала), тому достатньо визначити його на половині інтервалу, який відповідає зоні Бріллюена.

Найпростіша модель поширення коливань в одновимірному ланцюжку зв'язаних пружними силами однакових атомів з періодом a , дає закон дисперсії у вигляді:

$$\omega(k_\phi) = \omega_m \sin(k_\phi a/2), \quad (2.9)$$

де $\omega_m = 2v_{зв}/a$ – гранична частота фононів (рис. 2.4, *а*), яка залежить від швидкості поширення звуку в твердому тілі й відповідає найкоротшій довжині хвилі $\lambda_{\min} = 2a$, за якої сусідні атоми коливаються у протифазі. Такі коливання утворюють стоячу хвилю, групова швидкість якої $v_{гp} = d\omega/dk_\phi$ дорівнює нулю. Іноді цю граничну частоту характеризують так званою *температурою Дебая* θ_D , яку визначають із рівності $\hbar\omega_m = k_B\theta_D$. Для типових напівпровідників період решітки має значення порядку 10^{-10} м, швидкість звуку $\sim 10^3$ м/с, тому граничні частоти ω_m мають порядок $10^{12} \dots 10^{13}$ Гц і лежать в ультразвуковій області, а температури Дебая становлять кілька сотень кельвінів. Для найнижчих частот закон дисперсії є лінійним ($\omega \approx \omega_m k_\phi a/2$), тому фазова і групова швидкості однакові й дорівнюють швидкості звуку. Такі коливання і, відповідно, фонони називають *акустичними*.

Для кристалів, елементарна комірka яких складається з двох атомів, закон дисперсії (рис. 2.4, *б, в*) має свої особливості – у ньому з'являється так звана *оптична* гілка.

Зрозуміти її походження можна за допомогою відносно простої моделі (рис. 2.4, *б*). Для лінійного ланцюжка з

.....
 однакових атомів, розміщених на відстані $a' = a/2$, справджується закон дисперсії (2.9), який, якщо замінити a' на a , дає значення ω_m у точках $k_\phi = \pm \pi/a' = \pm 2\pi/a$. Але цей інтервал удвічі перевищує розмір зони Бріллюена ($-\pi/a \leq k_\phi \leq \pi/a$) для кристала з періодом a . Тому після зведення закону дисперсії до першої зони Бріллюена, як це роблять для електронних хвиль [5], він набуває вигляду (рис. 2.4, в), де оптична гілка є продовженням акустичної, зміщеної на відстань $2\pi/a$.

Акустичні коливання поширюються в ланцюжку атомів

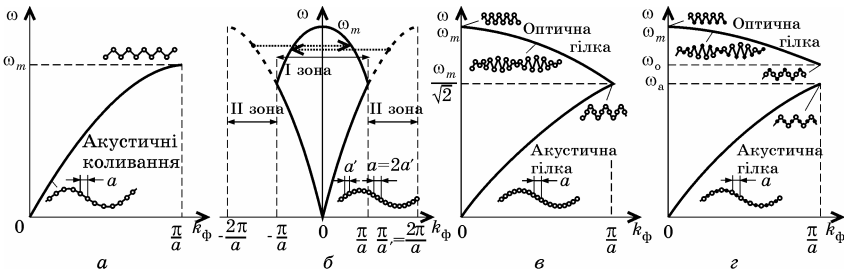


Рис. 2.4. Закони дисперсії хвиль зміщення в одновимірній моделі кристала – ланцюжку атомів: з одноатомним базисом (а), з базисом із двох однакових атомів (б, в) та двох різних атомів (г). Показано (б) утворення оптичної гілки для двохатомного базису зведенням верхньої частини «акустичної» гілки до першої зони Бріллюена (масштаб по горизонтальній осі зменшено). На фрагментах для зручності зображення поздовжні зміщення атомів подано як поперечні

як у єдиному цілому, а найбільш короткохвильові мають частоту $\omega_m/\sqrt{2}$ (як у точці $k_\phi = \pi/2a$ на рис. 2.4, а), коли на одному періоді решітки вкладається половина довжини хвилі і $\lambda = \lambda_{\min} = 2a$. Ця точка вироджена і відповідає також нижній частоті оптичної гілки, де зі збільшенням частоти збільшується і довжина хвилі, а сусідні атоми однієї комірки коливаються у протифазі.

У принципі таку саму картину спостерігають і в ланцюжку з періодом, що складається з двох різномісних атомів або однойменних, але з різною жорсткістю зв'язків зліва і справа від атома. Через це в точці $k_\phi = \pi/a$ виродження знімається (рис. 2.4, г), бо акустичні й оптичні

.....
 коливання мають різні частоти, а у спектрі фононів утворюється розрив. Ці найбільш короткохвильові фонони, як акустичні, так і оптичні, іноді називають *міждолинними*.

У розглянутій одновимірній моделі можливі лише поздовжні види (*моди*) коливань, хоча на наведених рисунках їх подано як поперечні. Це зроблено виключно для зручності зображення. У тривимірному кристалі крім поздовжніх існують ще й дві моди поперечних коливань, причому в кубічному кристалі обом поперечним модам відповідає один закон дисперсії. На рис. 2.5 зображено дисперсійні криві для фононів у найпоширеніших напівпровідникових матеріалах: силіції, германії та арсеніді галію.

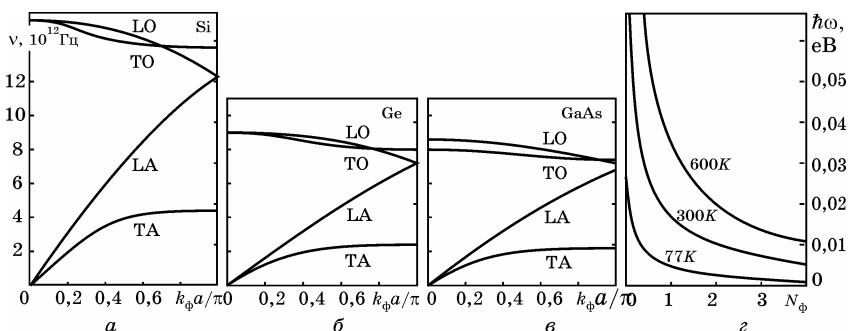


Рис. 2.5. Дисперсійні криві фононів для силіцію (а), германію (б) і арсеніду галію (в) у кристалографічному напрямку [100] (L – поздовжні, T – поперечні, A – акустичні і O – оптичні моди) та залежність середньої кількості фононів певної частоти від їх енергії (г) при різних температурах. На правих шкалах відкладено енергії фононів, на лівих – їх частоти

Загальний вигляд цих кривих для поздовжніх мод (LA – акустична, LO – оптична) цілком відповідає наведеній вище моделі, тільки закон дисперсії описують функцією, складнішою за (2.9). У силіції та германії, елементарні комірки яких складаються з однакових атомів, гілки поздовжніх LA- та LO-мод вироджені на межі зони Бріллюена, а енергії міждолинних фононів дорівнюють $\sim 0,05$ еВ та $\sim 0,03$ еВ відповідно. Така помітна різниця пов'язана перш за все з різною масою атомів Si і Ge. В

.....
 арсеніді галію виродження немає, але невелика різниця між масами атомів галію та арсену приводить і до невеликої розбіжності частот оптичної та акустичної мод: $\omega_o/\omega_a = \sqrt{M_{As}/M_{Ga}}$. В інших бінарних з'єднаннях A_3B_5 через більшу різницю атомних мас підрешіток це відношення може бути суттєво більшим.

До речі, саме з особливістю коливань двох підрешіток відносно одна одної і пов'язана назва – оптична мода. Якщо різні атоми зв'язані між собою частково або повністю іонним зв'язком, то їхні коливання один відносно одного супроводжуються утворенням змінних електричних полів, які можуть бути збуджені також зовнішнім електромагнітним випромінюванням. Наприклад, для GaAs з енергією оптичних фононів близько 0,03 еВ резонансна довжина хвилі становить ~40 мкм, що відповідає далекій інфрачервоній області.

На рис. 2.5. зображено також поперечні акустичні (ТА) та оптичні (ТО) гілки. У неполярних кристалах германію і силіцію поперечна та поздовжня оптичні моди вироджені при $k_\phi = 0$. У бінарних з'єднаннях, де оптичні коливання викликають утворення дипольного електричного моменту, ці моди мають різні частоти, а при $k_\phi = 0$ виконується співвідношення

$$\omega_{LO}/\omega_{TO} = \sqrt{\epsilon_{ст}/\epsilon_\infty}, \quad (2.10)$$

де $\epsilon_{ст}$ і ϵ_∞ – відповідно статична і високочастотна діелектрична проникність.

Характерною особливістю фононів, крім спектра, є їх розподіл по енергії. Середню кількість фононів $N_\phi(\omega)$ із заданою енергією (частотою) визначають як для безспінових часток статистикою Бозе – Ейнштейна і обчислюють за формулою Планка:

$$N_\phi(\omega) = 1/[\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]. \quad (2.11)$$

Залежність кількості фононів від їх енергії (рис. 2.5, з) показує, що при $\hbar\omega > k_B T$ кількість фононів $N_\phi \ll 1$. Ця

.....
 умова зазвичай добре виконується для оптичних фононів при кімнатних температурах.

2.2.2. Загальні закономірності

Під час взаємодії носія заряду з тепловими коливаннями кристалічної решітки його енергія може збільшуватися або зменшуватися на величину кванта коливань решітки, тобто енергії фонона. У цьому випадку говорять про *поглинання* або *збудження* фонона носієм заряду. У принципі можливе зникнення або утворення більшої кількості фононів, але такі багатфононні процеси малоймовірні порівняно з однофононними. Тому закон збереження енергії для фононного розсіювання має вигляд:

$$E' - E = \pm \hbar\omega. \quad (2.12)$$

Крім того, має виконуватися закон збереження імпульсу (квазіімпульсу), який зручніше виражати через хвильові вектори:

$$\vec{k}' - \vec{k} = \pm \vec{k}_\phi. \quad (2.13)$$

У наведених формулах штрихами позначено енергію та хвильовий вектор електрона після розсіювання, а знаки « \pm » стосуються відповідно поглинання фонона і його збудження.

Квантовомеханічний аналіз процесів переходу між електронними станами дає вирази для ймовірностей розсіювання з поглинанням фонона електроном

$$w_{kk'}^+ = w(\vec{k}_\phi) N_\phi \delta(E' - E - \hbar\omega) \quad (2.14)$$

і з його збудженням (випромінюванням, емісією)

$$w_{kk'}^- = w(\vec{k}_\phi) (N_\phi + 1) \delta(E' - E + \hbar\omega), \quad (2.15)$$

де $w(\vec{k}_\phi)$ – деяка функція, що залежить від конкретного виду фононного розсіювання, а δ -функція враховує закон збереження енергії. Ці два вирази можна об'єднати в один:

$$w_{kk'}^{\pm} = w(k_{\Phi}) (N_{\Phi} + 1/2 \mp 1/2) \delta(E' - E \mp \hbar\omega), \quad (2.16)$$

де, як і раніше, верхній знак стосується поглинання фонона, а нижній – його збудження.

Пропорційність ймовірності кількості фононів ($N_{\Phi} + 1/2 \pm 1/2$) свідчить про те, що швидкість розсіювання зі збудженням фононів у $(N_{\Phi} + 1)/N_{\Phi}$ разів більша, ніж із їх поглинанням. Однак це правило виконується повною мірою, по-перше, за достатньо великих енергій електрона, бо якщо $E < \hbar\omega$, то розсіювання може відбутися тільки з поглинанням фонона. По-друге, ця відмінність суттєва за звичайних температур для оптичних фононів, коли $\hbar\omega > k_B T$ і $N_{\Phi} \ll 1$. Для акустичних, особливо довгохвильових ($k_{\Phi} \approx 0$) фононів $N_{\Phi} \gg 1$ і швидкості розсіювання з поглинанням і збудженням практично однакові.

У кожному акті співударяння енергія електрона зменшується або збільшується на енергію фонона $\hbar\omega$. Однак у середньому за рахунок переважання процесів збудження енергія електронів зменшуватиметься, а кристалічна решітка нагріватиметься. Середня енергія, що її електрон втрачає за одне зіткнення, може бути визначена як енергія одного фонона, помножена на відношення різниці ймовірностей з випромінюванням і поглинанням до повної ймовірності, тобто їх суми:

$$\Delta E_1 = \hbar\omega \frac{w_{kk'}^- - w_{kk'}^+}{w_{kk'}^- + w_{kk'}^+}. \quad (2.17)$$

Відношення цієї величини до енергії електрона в середньому визначає частину переданої решітці енергії, тобто ступінь пружності фононних співударянь, і називається *коефіцієнтом пружності* ζ . Увівши поняття електронної температури за співвідношенням $E = 3k_B T_e/2$, з урахуванням виразів (2.16) для ймовірностей розсіювання і (2.11) отримаємо:

$$\zeta = \frac{\Delta E_1}{E} = \frac{\hbar\omega}{E} \frac{1}{2N_{\Phi} + 1} = \frac{2\hbar\omega}{3k_B T_e} \operatorname{th} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}. \quad (2.18)$$

.....
 За високих температур або малих енергій фононів, коли $\hbar\omega \ll k_B T$ (якщо замінити $\text{th}x \approx x$), коефіцієнт пружності

$$\zeta \approx (\hbar\omega)^2 / 3(k_B)^2 T T_e \ll 1, \quad (2.19)$$

і такі співударання можна вважати практично пружними.

Для оптичних фононів енергія може бути сумірною з величиною $k_B T$, тому їх взаємодія з електронами суттєво непружна. Однак зі збільшенням енергії електронів або електронної температури пружність співударень зростає так, що коефіцієнт пружності зменшується обернено пропорційно T_e . Із цією важливою властивістю фононного розсіювання пов'язані особливості низки фізичних процесів у твердих тілах (розд. 3).

2.2.3. Акустичне розсіювання

У процесі акустичного розсіювання основну роль відіграє взаємодія електрона з поздовжніми коливаннями решітки, які викликають зміни міжатомних відстаней. Хвильові процеси зміни параметра решітки a приводять до відповідної зміни ширини забороненої зони. Оскільки довжина хвилі акустичних коливань, особливо для малих значень k_ϕ , помітно більша за міжатомну відстань, то тут можна використати макроскопічну модель викривлення енергетичних зон. У цьому випадку говорять про локальну зміну енергії електрона в зоні провідності, яка пропорційна поздовжній деформації кристала, тобто відносній зміні міжатомної відстані

$$\Delta E = D_a (\Delta a/a). \quad (2.20)$$

Коефіцієнт пропорційності D_a (розмірність еВ) називають *константою акустичного деформаційного потенціалу*, а саме розсіювання називають іноді розсіюванням на акустичному деформаційному потенціалі. Це розсіювання пов'язане з виникненням локальних електричних полів, що з'являються за рахунок зміни взаємодії між атомами у

.....
 результаті поздовжніх деформацій решітки і викликають зміни траєкторії руху електрона. Подібна модель придатна і для дірок у валентній зоні, але потенціал деформації зазвичай має інше значення.

Поперечні акустичні фонони пов'язані з деформаціями зсуву атомних шарів і практично не змінюють міжатомних відстаней, але можуть викликати п'єзоелектричний ефект. Однак п'єзоелектричне розсіювання у типових випадках набагато слабше за розсіювання на поздовжніх акустичних фононах.

Під час акустичного розсіювання енергія фононів помітно менша за енергію електронів, яку в найпростішому випадку вважають рівною теплової $-3k_B T/2$. Тому поглинання або випромінювання фонона майже не змінює енергію електрона: його стан у k -просторі залишається практично на тій самій ізоенергетичній поверхні (рис. 2.6) і розсіювання можна вважати пружним ($\zeta \ll 1$).

Навіть без сумісного розв'язку рівнянь балансу енергії (1.12) та імпульсу (1.13) з рис. 2.6 видно, що в результаті пружного співударяння ($E \approx E'$) можливі дві крайні ситуації: 1) напрямок хвильового вектора електрона практично не змінюється ($\vec{k}'_1 \approx \vec{k}$) і, відповідно, $\vec{k}_{\phi 1} \approx 0$; 2) відхилення траєкторії електрона відбувається майже на 180° , коли $\vec{k}'_2 \approx -\vec{k}$ і $|\vec{k}_{\phi 2}| \approx 2|\vec{k}|$. Тому в розсіюванні беруть участь лише довгохвильові акустичні фонони, хвильові вектори яких лежать у межах $0 < k_\phi < 2k$.

Саме ці дві ситуації зображено на рис. 2.7 на одновимірній дисперсійній кривій електронів (а), поруч з якою зображено закон дисперсії фононів (б). З рисунку видно, що електрони взаємодіють лише з найменш енергійними акустичними фононами. Наприклад, для арсеніду галію ($m^* = 0,063m$) електрон із середньою тепловою енергією $E = 3k_B T/2 = 0,039$ еВ при $T = 300$ К має хвильовий вектор $k = \sqrt{2m^* E/\hbar^2} = 2 \cdot 10^8$ м⁻¹. Фонони з хвильовим вектором $k_\phi = 2k$ мають енергію $E_\phi = \hbar\omega = \hbar k_\phi v_{зв} \approx 10^{-3}$ еВ (при $v_{зв} = 4 \cdot 10^3$ м/с), тому співударяння зі зміною енергії на 10^{-3} еВ порівняно з тепловою зазвичай можна вважати практично пружним.

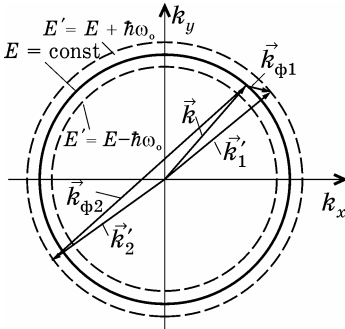


Рис. 2.6. Можливі зміни стану електрона під час акустичного розсіювання: енергія електрона до розсіювання відповідає ізоенергетичній поверхні E , після розсіювання — E' ; хвильовий вектор \vec{k} набуває значення $\vec{k}'_{1,2}$ після взаємодії з фононами, які мають значення хвильових векторів $k_{\phi 1} \approx 0$ та $|k_{\phi 2}| \approx 2|k|$

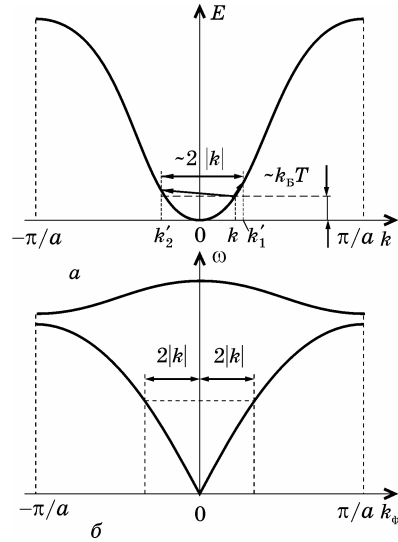


Рис. 2.7. Дисперсійні криві електронів (а) і фононів (б). Показано ті самі переходи електронів, що й на двовимірному рис. 2.6, з максимальною зміною хвильового вектора на $2|k|$

Для дрейфових процесів переносу носіїв часто вважають, що функція розподілу фононів (2.11) залишається рівноважною, а при $\hbar\omega \ll k_B T$ кількість фононів $N_\phi + 1 \approx N_\phi \approx k_B T / \hbar\omega \gg 1$ пропорційна температурі. Цей факт пояснює обернену пропорційність між довжиною вільного пробігу і температурою. Він також свідчить, що ймовірності розсіювання з випромінюванням і поглинанням фонона за цих умов практично однакові. Це дозволяє відносно просто обчислити інтеграл (2.3) з урахуванням (2.16) і отримати вираз для швидкості акустичного розсіювання:

$$\lambda_a = \frac{(2m^*)^{3/2} D_a^2 k_B T}{2\pi \nu_{зв}^2 \hbar^4} \sqrt{E}, \quad (2.21)$$

.....
 де m^* – ефективна маса густини станів; D_a – деформаційний акустичний потенціал; $v_{зв}$ – швидкість звуку, що відповідає нахилу акустичної гілки поздовжніх коливань при $k_\phi \approx 0$; ρ – густина речовини.

Характерно, що час релаксації $\tau = 1/\lambda$ зменшується зі зростанням енергії електрона обернено пропорційно $E^{1/2}$ або його швидкості. У вироджених електронних колективах, наприклад у металах, енергія електронів визначається енергією Фермі і практично не залежить від температури, тому питома електропровідність $\sigma = en\mu$ спадає зі зростанням температури $\sim T^{-1}$ через зменшення рухливості $\mu = e\tau/m^*$. У невироджених напівпровідниках у слабких електричних полях в енергії електрона переважає внесок теплового руху, $E = 3k_B T/2$ і рухливість змінюється як $\sim T^{-3/2}$, оскільки за низьких температур переважає розсіювання на іонізованих домішках.

2.2.4. Оптичне розсіювання

Для оптичних коливань кристалічної решітки характерний пологий хід закону дисперсії (див. рис. 2.5), тому частоту оптичних фононів ω_0 часто беруть не залежною від хвильового вектора і $\hbar\omega_0 = k_B\theta_D$. Їхня енергія за своїм порядком сумірна з тепловою енергією носіїв, тому розсіювання на оптичних фононах вважають *непружним*. Отже, умови розсіювання з випромінюванням фононів і з їх поглинанням суттєво різняться. Як впливає з (2.12), поглинання фонона можливе навіть при найнижчих енергіях (температурах), а для збудження фонона енергія електрона має бути не нижчою за його енергію: $E \geq \hbar\omega_0$. З другого боку, пропорційність імовірності розсіювання кількості фононів $(N_\phi + 1/2 \pm 1/2)$ приводить до різних швидкостей розсіювання: імовірність збудження може бути суттєво більшою за ймовірність поглинання, якщо $N_\phi \ll 1$ (звичайно, якщо енергії електрона достатньо для випромінювання фонона).

Взаємодія з оптичними фононами в атомарних напівпровідниках із суто ковалентними (гомеополярними) зв'язками і в бінарних з'єднаннях з помітною часткою полярних (гетерополярних) зв'язків має різні механізми.

В атомарних напівпровідниках протифазні поздовжні коливання атомів двох підрешіток, характерні для оптичної гілки, не приводять до зміни ширини забороненої зони, як під час акустичних коливань, але змінюють потенціальну енергію взаємодії між сусідніми атомами. За цих умов змінюється й енергія електрона, причому пропорційно зміщенню: $\Delta E = D_0 \Delta x$. Коефіцієнт пропорційності D_0 у цьому випадку має розмірність еВ/см і називається *константою оптичного деформаційного потенціалу*, а саме розсіювання називають розсіюванням на оптичному деформаційному потенціалі або *неполярним оптичним розсіюванням*. Швидкість такого розсіювання розраховують за формулою

$$\lambda_{\text{о}}^{\pm} = \frac{(m^*)^{3/2} D_0^2}{\sqrt{2\pi} \hbar^3 \omega_0} (N_{\text{ф}} + 1/2 \mp 1/2) \text{Re} \sqrt{E \pm \hbar \omega_0}. \quad (2.22)$$

Тут, як і раніше, верхній знак стосується поглинання фонона, а нижній – його збудження. Оператор Re дає нульову швидкість збудження, якщо $E \leq \hbar \omega_0$, а в разі поглинання фонона він втрачає сенс.

У бінарних напівпровідниках, таких як арсенід галію, зустрічні поздовжні коливання підрешіток атомів різної полярності приводять до утворення поляризаційних електричних полів, які спричиняють так зване *полярне оптичне розсіювання*. Його швидкість можна визначити за формулою

$$\lambda_{\text{по}}^{\pm} = \frac{e^2 \sqrt{m^*} \omega_0 (N_{\text{ф}} + 1/2 \mp 1/2)}{4\sqrt{2\pi} \epsilon_0 \hbar \sqrt{E}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{\text{ст}}} \right) \ln \left| \frac{\sqrt{E} + \text{Re} \sqrt{E \pm \hbar \omega_0}}{\sqrt{E} - \text{Re} \sqrt{E \pm \hbar \omega_0}} \right|. \quad (2.23)$$

Основною особливістю полярного оптичного розсіювання є залежність швидкості розсіювання від енергії електрона: $\lambda_{\text{по}} \sim E^{-1/2}$, якщо не брати до уваги відносно повільну

.....
 логарифмічну залежність у (2.23). Із збільшенням енергії електрона зменшується ймовірність розсіювання, що сприяє накопиченню енергії та ще меншому її розсіюванню. Така ситуація спостерігається, якщо полярне оптичне розсіювання переважає, і приводить до нестійкого процесу, який називають *полярним оптичним убіганням* і який викликає інтенсивне розігрівання електронного газу (розд. 3).

2.2.5. Міждолинне розсіювання

Результатом міждолинного розсіювання є перехід електрона з однієї долини дисперсійної кривої в іншу. Для атомарних напівпровідників (германій, силіцій) він зазвичай відбувається між еквівалентними долинами, наприклад, для силіцію (рис. 2.8, *a*) з Δ -долини у напрямку $[100]$ також в Δ -долини еквівалентних напрямків $[010]$, $[001]$ тощо. В електричному полі таке розсіювання може привести до перерозподілу заселеності долин електронами, яка в рівноважному стані однакова. Для бінарних з'єднань A_3B_5 характерніший перехід між нееквівалентними долинами. Наприклад, для GaAs типовим є розсіювання (рис. 2.8, *б*) із центральної Γ -долини в бокові L-долини, розміщені в напрямках $[111]$, або навіть у X-долини, що лежать ще вище.

Практично всі міждолинні переходи супроводжуються змінами хвильового вектора, сумірними з розмірами зони Бріллюена, і тому можливі лише за участі фононів з великими значеннями хвильових векторів. Такі фонони називають *міждолинними*, і відповідають вони ділянкам дисперсійних фононних кривих біля меж зони. Їх енергію переважно вибирають середньою між крайніми значеннями енергій акустичних і оптичних фононів: біля $\approx 0,05$ еВ для Si і $\approx 0,03$ еВ для Ge і GaAs (див. рис. 2.5). Ці значення сумірні з тепловою енергією, тому розсіювання з поглинанням чи збудженням міждолинного фонона буде суттєво непружним.

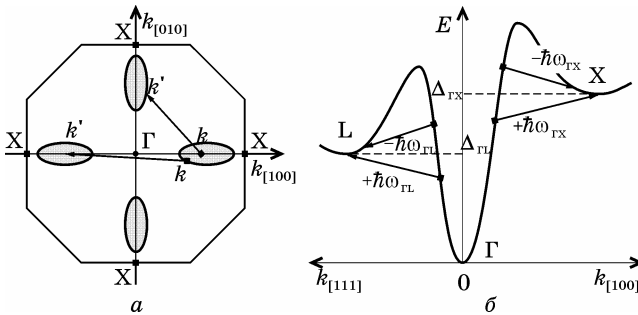


Рис. 2.8. Приклади переходів під час міждолинного розсіювання між еквівалентними долинами в силіції (а) та між нееквівалентними долинами в арсеніді галію (б)

Для переходів між нееквівалентними долинами слід враховувати зміну початку відліку енергії. Якщо електрон розсіюється з i -долини в j -ту, то закон збереження енергії (2.12) набуде вигляду

$$E_j - E_i = \pm \hbar\omega_{ij} - \Delta_{ij}, \quad (2.24)$$

де $\hbar\omega_{ij}$ – енергія міждолинного фонона; $\Delta_{ij} = E_{cj} - E_{ci}$ – міждолинна відстань (з урахуванням знака) від дна j -долини до дна i -долини. Відлік значень енергій E_i та E_j починають від мінімумів відповідних долин. Швидкості міждолинного розсіювання розраховують за формулою, подібною за структурою до (2.22) для неполярного оптичного розсіювання:

$$\lambda_{\text{мд}}^{\pm} = \frac{Z_j (m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{\sqrt{2\pi\hbar^3 \omega_{ij}}} (N_{\Phi} + 1/2 \mp 1/2) \text{Re} \sqrt{E_i \pm \hbar\omega_{ij} - \Delta_{ij}}, \quad (2.25)$$

де Z_j – кількість долин, у які може відбутися розсіювання; m_j^* – ефективна маса густини станів у j -долині; D_{ij} – константа міждолинної взаємодії, що має значення порядку $10^8 \dots 10^9$ еВ/см; N_{Φ} – кількість фононів з енергією $\hbar\omega_{ij}$, яку визначають за (2.11). Оператор Re робить неможливим розсіювання за недостатньої енергії електрона. Якщо

.....
розсіювання відбувається між еквівалентними долинами, то замість Z_j потрібно підставляти число, на одиницю менше їх кількості, а $\Delta_{ij} = 0$. Для долин, що лежать на межі зони Бріллюена, їх кількість треба зменшити вдвічі.

Кількісне уявлення про інтенсивність різних видів розсіювання можна дістати з рис. 2.9, де зображено залежності швидкостей розсіювання від енергії електронів у Γ - та L-долинах арсеніду галію. Слід звернути увагу на пороговий характер кривих для оптичних і міждолинних видів розсіювання, які потребують переходу електрона у вищий енергетичний стан.

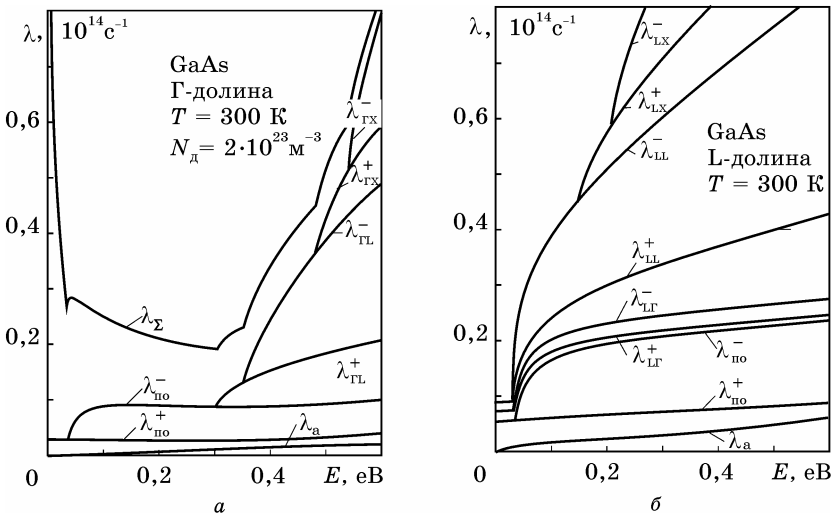


Рис. 2.9. Діаграма залежностей швидкості розсіювання для різних видів від енергії електрона в Γ -долині (а) та L-долині (б). Графік для кожного виду підсумовується з попередніми. Верхня крива λ_{Σ} сумарної швидкості включає також домішкове розсіювання

Серед інших видів розсіювання, які можуть відігравати помітну роль за певних умов, слід назвати *електрон-електронне розсіювання*, яке відбувається за високих концентрацій домішки. Під час міжелектронної взаємодії повний імпульс і енергія колективу залишаються незмінними, лише перерозподіляючись між частками, хаотизуючи їх рух та згладжуючи функцію розподілу.

.....

Останнім часом широко використовують три- та чотирикомпонентні напівпровідникові матеріали, наприклад $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$. Їх можна розглядати як сплави бінарних з'єднань A_3B_5 , у яких навіть за ідеальної будови кристалічної решітки розміщення різних атомів однієї групи має випадковий характер. У таких з'єднаннях може бути суттєвим *розсіювання на сплавному потенціалі*, викликане хаотичними відхиленнями потенціалу кристалічної решітки від ідеальної періодичної функції. Значення сплавного потенціалу залежить від різниці енергій електронного споріднення бінарних компонентів і пропорційне добутку їх концентрацій.

З позицій теорії розсіювання можна розглядати й ті взаємодії, що викликають міжзонні переходи: генерацію носіїв під дією світла, співударянь, сильних електричних полів тощо, та їх рекомбінацію з випромінюванням квантів світла, фононів. Однак час релаксації для цих процесів зазвичай на декілька порядків більший, ніж для внутрізонних, тому генераційно-рекомбінаційні явища відносять до повільних і розглядають окремо.

2.3. СЕРЕДНІ ЧАСИ РЕЛАКСАЦІЇ

2.3.1. Часи релаксації імпульсу

Розглянуті в попередніх розділах вирази для швидкостей різних механізмів розсіювання характеризують частоти тих чи інших видів зіткнень як *одиничних актів* за відомих параметрів носіїв. Часи релаксації концентрації, імпульсу та енергії визначають швидкості перехідних процесів у колективі й за своєю суттю є характеристиками, *усередненими* за всією сукупністю параметрів носіїв, тобто за функцією їх розподілу. Отримання аналітичних співвідношень ускладнюється із використанням під час інтегрування розподілу Фермі – Дірака, тому для усереднення найчас-

.....
 тіше беруть функцію розподілу Максвелла – Больцмана, у якій для врахування нерівноважності колективу замість температури решітки T використано електронну температуру T_e . Переносячи досить громіздкі процедури інтегрування у додаток, тут наведемо лише кінцеві результати для часів релаксації.

Домішкове розсіювання, як уже зазначалося, є пружним і, не змінюючи загальної енергії носіїв, не бере участі в міждолинних переходах та релаксації енергії. Водночас, ефективно хаотизуючи рух носіїв, воно дає помітний (особливо при низьких температурах, коли роль фононів незначна) внесок у релаксацію імпульсу.

Середній час релаксації імпульсу знаходять з інтеграла (1.63), у якому швидкість розсіювання λ_d відповідно до (2.5) і (2.7) беруть пропорційною $E^{-3/2}$, а співмножники у квадратних дужках вважають сталими. На основі співвідношення $N(k)dk = N(E)dE$ у разі квадратичного закону дисперсії відбувається перехід від інтегрування по k -простору до інтегрування по енергії. Вибираючи функцію розподілу $N(E) = g(E)f(E)$ максвеллівською ($f(E) = \exp[(E_\phi - E)/k_B T_e]$) і границі інтегрування від $E = 0$ (дно зони) до ∞ , отримаємо для часу релаксації імпульсу

$$\frac{1}{\tau_{pd}} = \sqrt{\frac{8\pi}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right)^2 \left[\ln(1 + \eta) - \frac{\eta}{1 + \eta} \right] N_{np} (k_B T_e)^{-3/2}. \quad (2.26)$$

Тут прийнято, що імпульс у лівій частині (1.63), а також величину η у (2.5) і (2.7) визначають для середньої енергії теплового руху, тобто $p = \sqrt{3m^* k_B T_e}$, і для моделі Брукса – Херрінга

$$\eta = (2kr_e)^2 = 12\epsilon\epsilon_0 m^* (k_B T_e)^2 / \hbar^2 e^2 N_d. \quad (2.27)$$

У разі використання моделі Конуелл – Вайскопфа, яка не враховує екранування домішкового центру носіями, значення η задають виразом

$$\eta = 6\pi\epsilon\epsilon_0 k_B T_e / e^2 N_d^{1/3}, \quad (2.28)$$

а в (2.26) опускають другий доданок у квадратних дужках.

Вираз (2.26) правильно описує експериментальну залежність рухливості від температури, якщо домішкове розсіювання є переважаючим. Для більш точного збігу з експериментом у (2.26) можна використати поправковий коефіцієнт (див. додаток), який залежить як від способу усереднення, так і від форми об'єму, який у середньому займає один атом домішки.

Для **акустичного розсіювання** характерна лінійна залежність швидкості розсіювання від температури кристалічної решітки T , що пояснюється зменшенням довжини вільного пробігу зі збільшенням кількості фононів, а також від швидкості носіїв пропорційно $E^{1/2}$. При цьому процедура усереднення не викликає особливих труднощів (див. додаток). Якщо вибрати функцію розподілу максвеллівською: $f(E) = \exp(-E/k_B T_e)$, то обернений час релаксації імпульсу збігатиметься зі швидкістю акустичного розсіювання (2.21), якщо замінити $E = 3k_B T_e/2$:

$$\frac{1}{\tau_{\text{рак}}} = \frac{\sqrt{3} m^{*3/2} D_a^2}{\pi \hbar^4 \rho v_{\text{зв}}^2} k_B T \sqrt{k_B T_e}. \quad (2.29)$$

Інші варіанти усереднення, наведені у додатку, дають результати, що відрізняються від останнього виразу значенням коефіцієнта пропорційності, близьким до 1.

Оптичне розсіювання є непружним, після кожної такої взаємодії енергія електрона змінюється на величину $\pm \hbar\omega_0$. Оскільки ця величина оптичного фонона може бути сумірною з енергією носіїв, то швидкості розсіювання з поглинанням фонона і з його збудженням можуть помітно різнитися. Усереднивши швидкості розсіювання (2.22) на оптичному деформаційному потенціалі за функцією розподілу Максвелла – Больцмана з електронною температурою T_e , для часу релаксації імпульсу одержимо вираз (див. формулу (18) додатку)

$$\frac{1}{\tau_{po}^{\pm}} = \left(\frac{m^*}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{D_o^2}{\rho \hbar^2} \frac{e^{\mp(t-t_e)}}{(k_B T_e)^{1/2} \text{sh } t} K_1(t_e), \quad (2.30)$$

де позначено $t = \hbar\omega_o/2k_B T$; $t_e = \hbar\omega_o/2k_B T_e$; K_1 – модифікована функція Бесселя першого порядку.

Загальний час релаксації імпульсу знаходять через суму обернених часів для поглинання і збудження:

$$\frac{1}{\tau_{po}} = \frac{1}{\tau_{po}^+} + \frac{1}{\tau_{po}^-} = 2 \left(\frac{m^*}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{D_o^2}{\rho \hbar^2} \frac{\text{ch}(t-t_e)}{(k_B T_e)^{1/2} \text{sh } t} K_1(t_e). \quad (2.31)$$

У наближенні «теплих» електронів $T_e \approx T$, тому $\text{ch}(t-t_e) \approx 1$.

Для **полярного оптичного розсіювання** усереднення швидкості розсіювання (2.23) за розподілом Максвелла – Больцмана з температурою T_e дає подібні результати (див. додаток), які відрізняються лише значенням коефіцієнта пропорційності і на одиницю меншим порядком функції Бесселя: для обернених часів із поглинанням і збудженням

$$\frac{1}{\tau_{pno}^{\pm}} = \frac{\alpha\omega_o}{\sqrt{2\pi}} \frac{t_e^{1/2}}{\text{sh } t} \exp[\mp(t-t_e)] K_0(t_e), \quad (2.32)$$

для сумарного часу

$$\frac{1}{\tau_{pno}} = \alpha\omega_o \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\text{ch}(t-t_e)}{\text{sh } t} t_e^{1/2} K_0(t_e). \quad (2.33a)$$

При цьому для «теплих» електронів ($T_e \approx T$) $\text{ch}(t-t_e) \approx 1$ і

$$\frac{1}{\tau_{pno}} = \alpha\omega_o \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{t_e^{1/2}}{\text{sh } t} K_0(t_e). \quad (2.33b)$$

У останніх виразах уведено *полярну константу*

$$\alpha = \frac{e^2 \sqrt{m^*}}{4\sqrt{2}\pi\epsilon_0 \hbar (\hbar\omega_0)^{1/2}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{ст}} \right). \quad (2.34)$$

Міждолинне розсіювання також є непружним, оскільки в кожному його акті поглинається або збуджується *міждолинний фонон* з енергією $\hbar\omega_{ij}$, близькою до енергії оптичних фоновів. Для міждолинного розсіювання, на відміну від інших механізмів, кінетичне рівняння усереднюють не по всій зоні Бріллюена, а по характерних станах, які відповідають окремим долинам. Тому навіть у разі збереження загальної концентрації часток у всій зоні, вона може перерозподілятися між окремими долинами. Відповідно інерційність цього процесу визначається концентраційним часом релаксації τ_n , який знаходять, як і час релаксації імпульсу τ_p (див. додаток), усередненням швидкості міждолинного розсіювання (2.25) за функцією розподілу. Використавши для цього максвеллову функцію з електронною температурою T_e , отримаємо для часу релаксації τ_{ij}^\pm з поглинанням (верхній знак) і збудженням (нижній знак) міждолинного фонуна $\hbar\omega_{ij}$ для переходів електронів з i -долини в j -ту:

$$\frac{1}{\tau_{pij}^\pm} = \left(\frac{m_j^*}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{Z_j D_{ij}^2}{\rho \hbar^3 \omega_{ij}} \frac{e^{-\delta_{ij}/2}}{\text{sh } t} |\delta_{ij}| \sqrt{k_B T_e} e^{\mp(t-t_e)} K_1(|\delta_{ij}|/2), \quad (2.35)$$

де $\delta_{ij} = \Delta_{ij}/k_B T_e = (E_{cj} - E_{ci})/k_B T_e$ – нормована відстань від дна j -долини до дна i -ї. Із переходом електрона з нижньої долини у верхню $\delta_{ij} > 0$, величини t і t_e визначають, як і для оптичного розсіювання, але у вирази для їх обчислення треба підставити енергію міждолинного фонуна. Додавши обернені часи релаксації з поглинанням та збудженням фоновів, одержимо значення обернених часів релаксації концентрації та імпульсу:

$$\frac{1}{\tau_{nij}} = \frac{1}{\tau_{pij}} = \left(\frac{m_j^*}{2\pi} \right)^3 \frac{2Z_j D_{ij}^2}{\rho \hbar^3 \omega_{ij}} \frac{|\delta_{ij}| e^{-\frac{\delta_{ij}}{2}}}{\text{sh } t} \text{ch}(t - t_e) \sqrt{k_B T_e} K_1(|\delta_{ij}|/2). \quad (2.36)$$

.....

Використовуючи останні співвідношення, слід звернути увагу, що, по-перше, у ці співвідношення входить ефективна маса густини станів, яка зазвичай враховує кількість долин, а тому величину Z_j треба вилучити. По-друге, вирази (2.35), (2.36) отримано з припущення, що енергія міждолинного фонона значно менша за міждолинну відстань ($\hbar\omega_{ij} \ll \Delta_{ij}$). Це цілком виправдано для більшості практично важливих випадків, коли міждолинна відстань помітно перевищує величину $k_B T$. Наприклад, для GaAs енергія міждолинних фононів близька до 0,03 еВ, а відстань між найближчими долинами $\Delta_{\Gamma L} \approx 0,33$ еВ. Більш загальні вирази наведено в додатку.

Отримані результати придатні для аналізу розсіювання між нееквівалентними долинами. Щоб проаналізувати розсіювання між еквівалентними долинами ($\Delta_{ij} = 0$), можна використати вирази для швидкості розсіювання (2.22) і наступні співвідношення для неполярного оптичного розсіювання з відповідною заміною позначень.

2.3.2. Часи релаксації енергії, пружність розсіювання

Взаємодія електрона з домішковими атомами практично повністю пружна і не викликає релаксації енергії. Тому вважають, що для домішкового розсіювання $1/\tau_{Ed} = 0$.

Щоб визначити часи релаксації енергії для фононних видів розсіювання, можна скористатися співвідношенням (1.54), у якому, щоб уникнути громіздких процедур усереднення за функцією розподілу, зручно використати вираз для середньої швидкості втрат енергії одного електрона за рахунок зіткнень у такій простій формі:

$$(dE/dt)_c = \hbar\omega_{\Phi} / \tau_{p\Phi}^+ - \hbar\omega_{\Phi} / \tau_{p\Phi}^- . \quad (2.37)$$

Зміст цього співвідношення такий: оскільки $1/\tau_p$ – середня кількість зіткнень за 1 с, а після кожного зіткнення енергія електрона змінюється на величину енергії фонона $\hbar\omega_{\Phi}$, то перший доданок відповідає середній енергії, набутій

.....
 електроном за 1 с за рахунок поглинання фононів, а другий – енергії, втраченій з їх збудженням. Прирівнявши (2.37) правій частині (1.54), отримуємо вираз:

$$\frac{1}{\tau_E} = \frac{\hbar\omega_\Phi (1/\tau_{p\Phi}^+ - 1/\tau_{p\Phi}^-)}{E - E_0}, \quad (2.38)$$

який використовують для визначення часів релаксації енергії за знайденими раніше часами релаксації імпульсу із збудженням та поглинанням фононів.

Однак у більшості розрахунків зручніше користуватися не часом τ_E , а відношенням τ_E/τ_p , яке має простий фізичний смисл. Спочатку зазначимо, що розсіювання зі збудженням фононів зазвичай переважає розсіювання з їх поглинанням, тому $1/\tau_{p\Phi}^+ > 1/\tau_{p\Phi}^-$ і в числівнику (2.38) стоїть середня енергія, що під час фононного розсіювання передається електроном кристалічній решітці за 1 с, а в знаменнику – надлишкова середня енергія електрона, яку він може віддати у процесі релаксації. Домноження (2.38) на τ_p приводить до співвідношення

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{\hbar\omega_\Phi}{E - E_0} \frac{1/\tau_{p\Phi}^+ - 1/\tau_{p\Phi}^-}{1/\tau_{p\Phi}^+ + 1/\tau_{p\Phi}^-}, \quad (2.39)$$

що характеризує середню частину енергії, яку втрачає електрон за час τ_p , тобто, фактично, за одне зіткнення. За структурою та змістом воно відповідає виразу (2.18), який характеризує ступінь пружності співударень як одиничних актів і який включає ймовірності переходів $w_{kk'}^+$ та $w_{kk'}^-$, що різняться тільки кількістю фононів, які беруть участь у розсіюванні з їх поглинанням і збудженням. Ця відмінність для $w_{kk'}^\pm$ визначається множником $(N_\Phi + 1/2 \pm 1/2) = e^{\pm t}/2\text{sht}$, де $t = \hbar\omega_\Phi/2k_B T$. У виразі (2.39) замість $w_{kk'}^\pm$ стоять обернені часи релаксації $1/\tau_{p\Phi}^\pm$, які, як видно з (2.30) і (2.32), в умовах розігрівання електронів для оптичних видів розсіювання різняться ще й знаком у множнику $\exp(\pm t_e)$, що включає електронну температуру через

.....
 параметр $t_e = \hbar\omega_\phi / 2k_B T_e$. Тому другий співмножник у (2.39) буде, на відміну від (2.18), дорівнювати $\text{th}(t - t_e)$, а саме співвідношення набуде вигляду:

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{4}{3} \frac{t t_e}{t - t_e} \text{th}(t - t_e). \quad (2.40)$$

Для міждолинного розсіювання, коли енергія електрона змінюється не тільки на значення енергії фонона, але й на значення міждолинної відстані $\pm\Delta_{ij}$, аргументом функції Бесселя у (2.35) є параметр $|\delta_{ij}/2 \pm t_e|$ (див. додаток) і вираз для τ_p/τ_E буде більш складним. Однак для найтипівіших випадків, коли $\hbar\omega_{ij} \ll \Delta_{ij}$, для $1/\tau_{ij}^\pm$ наближено справджується (2.35) і відношення τ_p/τ_E , тобто пружність міждолинного розсіювання, також можна визначати за (2.40).

Цей вираз можна спростити для двох типових випадків: для «теплих» електронів, коли $T_e \approx T$, $t_e \approx t$ та $\text{th}x \approx x$:

$$\tau_p/\tau_E \approx 4tt_e/3, \quad (2.41)$$

і для «гарячих» ($T_e \gg T$, $t_e \ll t$)

$$\tau_p/\tau_E \approx 4t_e \text{th}t/3. \quad (2.42)$$

Важливою властивістю відношення часів релаксації імпульсу та енергії є практично лінійна залежність його від оберненої електронної температури, що визначає специфіку протікання деяких фізичних процесів у сильних електричних полях (розд. 3). Однак це характерно тільки для оптичних і міждолинних фононів, енергію яких через вузькість їх спектра беруть постійною.

За участі в розсіюванні акустичних фононів спостерігається дещо інша ситуація. По-перше, через їх малу енергію і, відповідно, високу пружність такого розсіювання іноді нехтують акустичним механізмом релаксації енергії. Але за браком оптичного розсіювання саме акустичний механізм забезпечує передачу енергії від електронів до кристалічної решітки, встановлюючи термодинамічну

рівновагу. По-друге, пружність акустичного розсіювання практично не залежить від електронної температури, бо з її зростанням зростає й енергія фононів, що беруть участь у розсіюванні. Ця особливість пов'язана з тим, що спектр акустичних коливань достатньо широкий і, як відзначалось у п. 2.2.3, у розсіюванні беруть участь низькочастотні фонони, хвильовий вектор яких лежить у межах $|k_{\text{ф}}| \leq 2|k|$. Для квадратичного закону дисперсії електронів $k = \sqrt{2m^* E/\hbar^2}$ і, відповідно, $|k_{\text{ф}}| \leq 2\sqrt{2m^* E/\hbar^2}$. На малих частотах фононний закон дисперсії (2.9) можна вважати лінійним, тобто $\omega_{\text{ф}} = v_{\text{зв}}|k_{\text{ф}}|$, тому енергія таких фононів $\hbar\omega_{\text{ф}} \leq v_{\text{зв}}(8m^* E)^{1/2}$. Якщо вважати, що в розсіюванні беруть участь електрони з середньою енергією $E = 3k_{\text{Б}}T_e/2$, то для акустичних фононів t_e і $t \ll 1$, і вираз (2.41) для коефіцієнта пружності набуде вигляду

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{4m^* v_{\text{зв}}^2}{k_{\text{Б}} T}. \quad (2.43)$$

Отже, на відміну від оптичних механізмів пружність акустичного розсіювання не залежить від електронної температури. Підставивши типові значення ($m^* \approx 0,1m$, $v_{\text{зв}} \approx 10^3$ м/с, $T = 300$ К) побачимо, що відношення τ_E/τ_p , яке наближено характеризує кількість необхідних для релаксації енергії зіткнень, має порядок $10^2 \dots 10^3$.

Релаксація розподілу імпульсу відбувається практично за одне зіткнення, тобто за час порядку τ_p . За цих умов рівновага між решіткою та електронами встановлюється за рахунок підвищення T_e (розд. 3). Так, в електричному полі з напруженістю порядку 10^3 В/м при кімнатній температурі $T_e \approx 350$ К, а в сильніших полях це перевищення може бути багатократним. Водночас для оптичного розсіювання при $T_e = 350$ К, $T = 300$ К, $\hbar\omega_0 = 0,03$ еВ, одержимо час релаксації $\tau_{E_0} = 2,5\tau_{p_0}$, що пояснюється більшою непружністю такого розсіювання порівняно з акустичним.

Відмінність часів релаксації імпульсу та енергії визначає деякі особливості перехідних процесів під час

.....
 вмикання та вимикання електричного поля. Подібні процеси релаксації було розглянуто в п. 1.2.3 для нерівноважної добавки до функції розподілу. З рис. 1.2 видно, що швидкість встановлення стаціонарних станів визначається часом релаксації τ , що входить до кінетичного рівняння Больцмана (1.28). Схожі результати можна отримати, розв'язуючи рівняння збереження імпульсу (1.61) у припущенні постійності часу релаксації. Із вмиканням електричного поля у момент часу t_0^+ (рис. 2.10, а) відбувається поступовий перехід електронного колективу з рівноважного стану ($v(t_0^+) = 0$) в стаціонарний ($v(\infty) = \mu\mathcal{E}$) за законом

$$v(t) = \mu\mathcal{E} \{1 - \exp[-(t - t_0^+)/\tau_p]\}. \quad (2.44)$$

Після вимкнення поля ($\mathcal{E} = 0$) в момент t_0^- відбувається релаксація із стаціонарного стану, яка відповідно до розв'язку рівняння (1.61) описується функцією

$$v(t) = \mu\mathcal{E} \exp[-(t - t_0^-)/\tau_p]\}. \quad (2.45)$$

Вона показує (рис. 2.10, б), що після вимкнення поля відбувається повернення в рівноважний стан. Інерційність цих перехідних процесів визначається часом релаксації імпульсу τ_p , який за значенням практично збігається з часом τ .

Інша ситуація спостерігається для енергії. Розв'язком рівняння (1.64) при вмиканні поля буде функція

$$E(t) = E_0 + e\tau_E\mu\mathcal{E}^2 \left[1 - \frac{\tau_E}{\tau_E - \tau_p} e^{-(t-t_0^+)/\tau_E} + \frac{\tau_p}{\tau_E - \tau_p} e^{-(t-t_0^+)/\tau_p} \right], \quad (2.46)$$

а при вимкнанні

$$E(t) = E_0 + e\tau_E\mu\mathcal{E}^2 \exp[-(t - t_0^-)/\tau_E]. \quad (2.47)$$

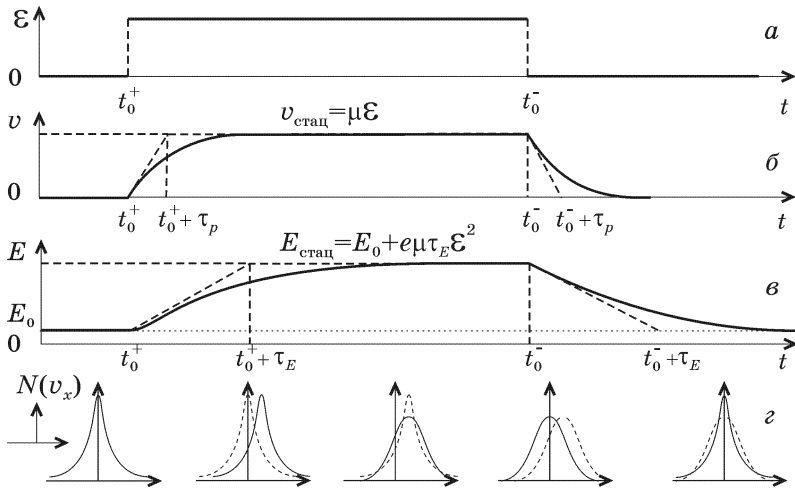


Рис. 2.10. Часові діаграми перехідних процесів під час вмикання та вимикання електричного поля (а). Встановлення стаціонарного стану із вмиканням і релаксація після вимикання для швидкості (б) та енергії (в) відбувається із суттєво різними швидкостями. Унизу (г) наведено символічне зображення функції розподілу для відповідних моментів часу

Характерна особливість цих функцій (рис. 2.10, в) полягає в тому, що тривалість перехідних процесів визначається в основному часом τ_E , більшим, ніж τ_p . Деякий вплив релаксаційного процесу з часовою константою τ_p помітний із вмиканням поля і проявляється у повільнішому зростанні енергії на початку. Це відображує третій доданок у дужках (2.46), внесок якого зменшується із підсиленням нерівності $\tau_E > \tau_p$. Після вимикання поля релаксація енергії до рівноважного значення E_0 відбувається за експоненціальним законом (2.47) з характерною часовою константою τ_E .

Результат таких перехідних процесів – еволюція функції розподілу $N(v_x)$, схематично зображена на рис. 2.10, г. Із вмиканням поля вона за час порядку τ_p з рівноважного стану зміщується так, що середнє значення стаціонарної швидкості встановлюється рівним швидкості дрейфу $v = \mu\mathcal{E}$. Але повністю стаціонарною функція стає лише за час порядку $\tau_E > \tau_p$, коли відбувається її розширення, яке

.....
 означає збільшення середньої енергії електрона. Після вимикання поля швидше відбувається релаксація дрейфової швидкості до нульового значення і функція стає симетричною, залишаючись широкою. І лише через час порядку τ_E вона звужується, що означає зменшення енергії до рівноважного значення E_0 і повернення електронного колективу в рівноважний стан.

2.4. РУХЛИВІСТЬ ЕЛЕКТРОНІВ

Результати теорії розсіювання найчастіше застосовують, мабуть, у питанні про розрахунок рухливості. Розглянуті у [5] уявлення про рухливість дуже наближені, оскільки практично не зачіпають особливостей різних механізмів розсіювання та деталей зонної структури конкретних матеріалів. А саме вони визначають характерні електричні властивості тих чи інших напівпровідників та динаміку електронних процесів.

Нагадаємо, що рухливість $\mu = e\tau_p/m_c^*$ відповідно до (1.62) визначається середнім часом релаксації імпульсу τ_p і омічною ефективною масою m_c^* . Середній час релаксації імпульсу найчастіше знаходять через суму обернених часів релаксації для окремих механізмів розсіювання, хоча точність цього правила, яке ґрунтується на принципі незалежності одне від одного різних видів зіткнень, іноді піддають сумніву. Питома вага певного виду розсіювання визначає вплив зовнішніх чинників на рухливість. У цьому підрозділі йдеться про рухливість у слабких електричних полях, коли температура електронного газу T_e дорівнює температурі кристалічної решітки T .

Силіцій. З фононних механізмів для силіцію характерні акустичне та неполярне оптичне розсіювання. Акустичне розсіювання, строго кажучи, є анізотропним, бо електрони взаємодіють як з поздовжніми, так і з поперечними коливаннями кристалічної решітки. Але переважаючою є взаємодія з поздовжніми коливаннями. Тому для розрахунку часу релаксації під час акустичного розсіювання можна з

.....
 достатньою точністю використовувати вирази (2.29) і (2.31), отримані в ізотропному наближенні, але із швидкістю розповсюдження поздовжніх коливань $v_{зв} = v_l = 9,0 \cdot 10^3$ м/с і відповідним деформаційним потенціалом $D_a = 6$ еВ. Діелектрична проникність і густина речовини відповідно дорівнюють $\epsilon = 11,9$ і $\rho = 2,33$ г/см³. Слід також мати на увазі, що в (2.29) необхідно використовувати значення ефективної маси густини станів, яку визначають через компоненти тензора ефективної маси ($m_l^* = 0,98m$, $m_t^* = 0,19m$) з урахуванням кількості еквівалентних долин ($M = 6$), що відповідають дну зони провідності силіцію: $m_d^* = 6^{2/3}(m_l^* m_t^*)^{1/3} = 1,08m$. У (2.31) для розрахунку часу релаксації енергії треба використовувати омічну ефективну масу $m_c^* = 3m_l^* m_t^* / (2m_l^* + m_t^*) = 0,26m$.

Оптичне розсіювання в силіції є неполярним і відбувається на оптичному деформаційному потенціалі. За наявності різних долин таке розсіювання розглядають фактично як еквівалентне міждолинне. Оскільки нижні долини силіцію розміщені в зоні Бріллюена в точках Δ , яким відповідає значення $k = 0,85(2\pi/a)$, то можливі два типи переходів (рис. 2.11).

Переходи між співвісними долинами (штрихова лінія) з урахуванням періодичності закону дисперсії зручніше розглядати як так звані *g*-переходи (суцільна лінія) у сусідню зону Бріллюена зі зміною хвильового вектора на $\Delta k = 0,29(2\pi/a)$. Якщо звернутися до дисперсійної кривої фононів для цього напрямку (див. рис. 2.5) і врахувати, що взаємодіяти електрон може тільки з поздовжніми оптичними коливаннями, то очевидно, що таку зміну хвильового вектора електрона можуть забезпечити фонони з енергією $\hbar\omega_{01} \approx 0,062$ еВ.

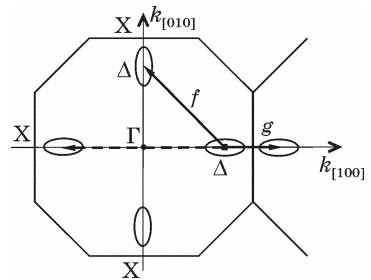


Рис. 2.11. Види переходів під час оптичного розсіювання в силіції: *f* – переходи між перпендикулярними долинами, *g* – переходи між співвісними долинами (штрихова лінія), які зручніше розглядати, як переходи в сусідню зону Бріллюена

.....

Інший можливий тип розсіювання викликає так звані f -переходи (рис. 2.11) між долинами, що лежать на перпендикулярних вісях. Розглянувши відповідні фононні дисперсійні криві (на рис. 2.5 їх не наведено) побачимо, що такі переходи можуть відбуватися за участю двох типів фононів з енергіями $\hbar\omega_{o2} \approx 0,059$ еВ і $\hbar\omega_{o3} \approx 0,047$ еВ. Цим трьом видам розсіювання відповідають оптичні деформаційні потенціали: $D_{o1} = 7,5 \cdot 10^8$ еВ/см, $D_{o2} = 2,0 \cdot 10^8$ еВ/см та $D_{o3} = 4,3 \cdot 10^8$ еВ/см. Для спрощення розрахунків без великої втрати точності всі три види розсіювання можна розглядати як один з деякими усередненими еквівалентними параметрами, наприклад, $\hbar\omega_o = 0,05$ еВ та $D_o = 5,5 \cdot 10^8$ еВ/см. В ефективну масу густини станів при цьому не включають кількість долин $m_{d1}^* = (m_t^* m_l^*)^{1/3}$, але час релаксації домножують на кількість долин, у які відбувається розсіювання, тобто на 5.

Слід також мати на увазі, що оптичні розсіювання відбуваються переважно зі збудженням фонона, тому для розрахунку часу релаксації можна використовувати вираз (2.32) для $1/\tau_{po}^-$, а для швидкості втрат енергії – другий доданок (2.34) для збудження фонона. Щодо оптичного розсіювання, то поняття часу релаксації енергії, строго кажучи, визначити неможливо, бо в цьому випадку швидкість утрат енергії електрона не пропорційна відхиленню його енергії від рівноважного значення. Але для оцінок можна використовувати співвідношення (2.36).

Для аналізу домішкового розсіювання придатний вираз (2.26). Основною проблемою при цьому є вибір того чи іншого наближення. Нагадаємо, що в моделі Брукса – Херрінга фактором, що обмежує далекодію поля іона домішки, вважається екранування кулонівського поля рухливими носіями заряду. У моделі Коуелл – Вайскопфа таким фактором є наявність сусідніх домішкових атомів. Певним критерієм для вибору тієї чи іншої моделі може слугувати співвідношення між середньою міждомішковою відстанню (2.4) та радіусом екранування (2.6). Так, якщо концентрація домішки $N_d = 10^{21} \text{ м}^{-3}$ і температура $T = 300$ К, то радіус екранування $r_e = 0,13$ мкм, а максимальна прицільна відстань $b_m = 0,05$ мкм. Співвідношення $b_m < r_e$

.....
 говорить про те, що сильнішим фактором є обмеження розсіювання сусідніми іонами домішки, а більш придатною – модель Конуелл – Вайскопфа. Наближення Брукса – Херрінга обґрунтоване у випадку суттєвого зростання ролі екранування рухливими носіями, що спостерігається із підвищенням концентрації домішки і (або) при низьких температурах, коли

$$k_B T < e^2 N_d^{1/3} / 4\epsilon\epsilon_0. \quad (2.48)$$

При низьких температурах слід також враховувати «виморожування» домішки. Кількість розсіювальних домішкових іонів, а також рівна їй кількість екранувальних рухливих електронів визначається відношенням (3.64), а інші ($N_d - n_n$) атоми залишаються нейтральними, і розсіювання на них можна наближено розрахувати за формулою (2.8).

Результати розрахунків часів релаксації, які пояснюють внесок різних механізмів розсіювання в підсумкове значення рухливості, наведено на рис. 2.12, а. Переважаючим, крім області низьких температур, є розсіювання імпульсу на фонах.

Вплив оптичних фонів виявляється лише із підвищенням температури до ≈ 100 К. При низьких температурах зростає роль домішкового розсіювання, причому при найнижчих температурах – на нейтральних домішкових атомах.

Підсумком такого аналізу є залежності рухливості від температури (рис. 2.12, б) за різних концентрацій домішки. У логарифмічних координатах температурна залежність рухливості для найнижчих температур спрямлюється (якщо немає домішки) і її нахил відповідає степеневій залежності $T^{-3/2}$, характерній для акустичного розсіювання. Із підвищенням температури ця лінійність зникає, що означає переважання оптичного розсіювання. На найкрутішій ділянці (при температурі близько 200 К) нахил відповідає залежності $\mu \sim T^{-2,4}$, яка добре узгоджується з експериментальною залежністю, поданою на тому самому рисунку і взятою з книги [2].

Наявність домішки знижує рухливість тим більше, чим вища її концентрація. Це сильніше виявляється зі зменшенням температури, коли фононні механізми розсіювання слабшають. Помітне відхилення від експериментальних значень (рис. 2.13) спостерігається лише для великих концентрацій домішки, коли починається виродження електронного газу, яке не враховано в наведених розрахунках.

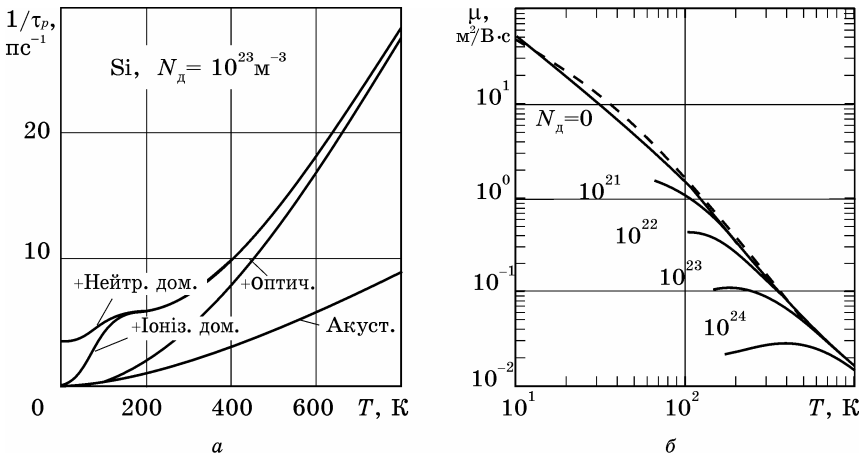


Рис. 2.12. Температурні залежності обернених часів релаксації імпульсу за фіксованої концентрації домішки (а) та рухливості за різних концентрацій домішки (б) для силіцію. Штрихова лінія – експериментальна. Графіки обернених часів релаксації для кожного виду, як і на рис. 2.9, підсумовуються з попередніми

Германій. Для германію характерні ті самі механізми розсіювання, що й для силіцію. Акустичне розсіювання тут також переважає в області низьких температур (якщо немає домішки). Для розрахунку часу акустичної релаксації було використано значення акустичного деформаційного потенціалу $D_a = 8 \text{ eV}$, швидкості звуку $v_{зв} = 5,4 \cdot 10^3 \text{ м/с}$, густини $\rho = 5,3 \text{ г/см}^3$, діелектричної проникності $\epsilon = 16,0$ та ефективної маси густини станів $m_d^* = 0,56m$.

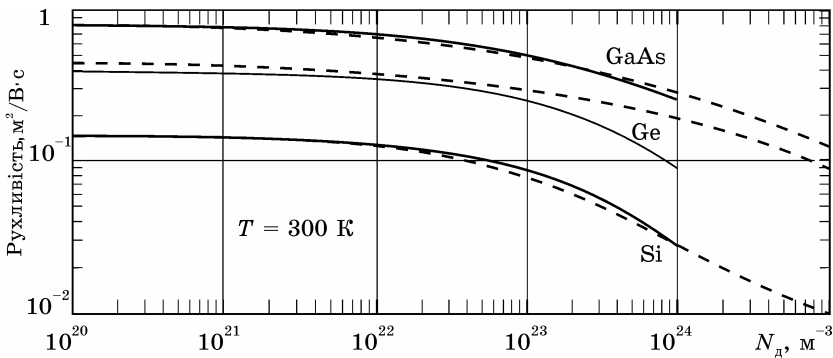


Рис. 2.13. Концентраційні залежності рухливості для силіцію, германію та арсеніду галію при кімнатній температурі. Штрихові лінії – експериментальні

Оптичне розсіювання відбувається на оптичному деформаційному потенціалі і приводить до переходів електронів в еквівалентні долини. Основна відмінність від силіцію пов'язана з особливістю закону дисперсії. Як відомо, дно зони провідності для германію знаходиться в Λ -напрямку на межі зони Бріллюена в точках L [5]. Це відповідає наявності восьми половин або чотирьох повних еквівалентних долин із сильною анізотропією ефективної маси $m_i^*/m_l^* = 0,08/1,58$. При цьому, як і в силіції, можливі різні типи електронних переходів між долинами, але в середньому їх можна змодельювати як одне міждолинне еквівалентне розсіювання на оптичному деформаційному потенціалі при $D_0 = 5,5 \cdot 10^8$ еВ/см за участі оптичних фононів з енергією $\hbar\omega_0 = 0,034$ еВ. Для аналізу домішкового розсіювання тут так само, як і в силіції, перевагу має модель Конуелл – Вайскопфа.

Результати розрахунку обернених часів релаксації, що показують внесок різних механізмів розсіювання, зображено на рис. 2.14, а. При найнижчих температурах домішкове розсіювання переважає як на нейтральних, так і на іонізованих атомах домішки. Воно залежить від концентрації домішки і слабшає зі зменшенням N_d і збільшенням

.....
 температури. Це наочно видно на рис. 2.14, б, де зображено температурну залежність рухливості.

Зі зростанням температури зростає і роль фононних механізмів розсіювання. Але порівняно із силіцієм оптичне розсіювання тут має менше значення. Це проявляється у похилішому спаданні рухливості з максимальним нахилом кривої $\mu(T)$ у логарифмічних координатах, який відповідає степеневій залежності $\sim T^{-1,6}$.

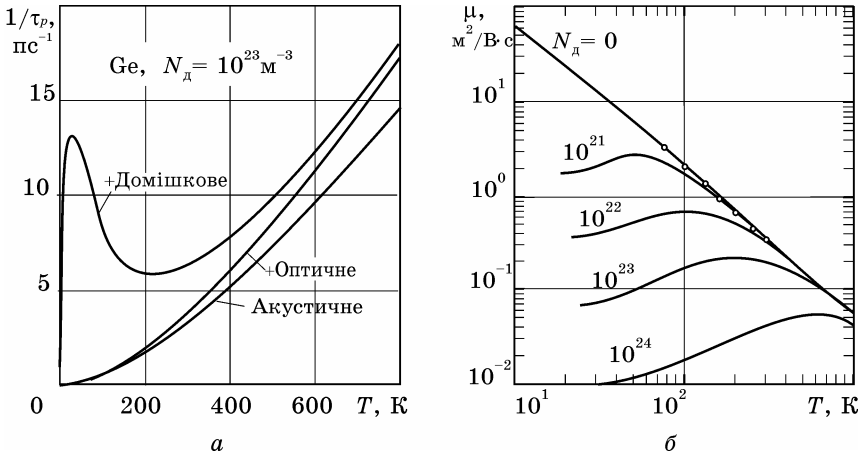


Рис. 2.14. Такі самі залежності, як і на рис. 2.12, для германію. Експериментальні значення для $N_d = 0$ позначено точками

Як і для силіцію, але ще помітніше, обчислені при $T = 300$ К (рис. 2.13) значення $\mu(N_d)$ розходяться з експериментальними, якщо концентрації домішки більші за 10^{23} м^{-3} . Можливо, це пов'язано з меншою енергією іонізації атомів домішки в германії і, відповідно, із ще більшим концентраційним виродженням електронів у зоні провідності. Також невиправдано високою виявилась роль розсіювання на нейтральних домішках, яка оцінювалась за (2.8), що особливо виявляється за високих концентрацій домішки.

Арсенід галію. Одна з головних особливостей розсіювання в GaAs пов'язана з помітним внеском іонного зв'язку між атомами Ga і As. Це приводить до того, що з фононних механізмів основну роль відіграє полярне розсіювання (розд. 2.2.4) за участю оптичних фононів з енергією

.....
 $\hbar\omega_0 = 0,035$ еВ. Результати розрахунку швидкості цього виду розсіювання (2.23) і відповідного часу релаксації (2.37) суттєво залежать від точності задання близьких значень статичної і високочастотної діелектричних проникностей $\epsilon_{ст}$ і ϵ_{∞} , які зв'язані виразом (2.10) із значеннями частот ω_{LO} і ω_{TO} відповідно поздовжньої і поперечної мод фононного спектра (рис. 2.5, в) при $k_{\phi} = 0$. На рис. 2.15 наведено результати для значення $\omega_{LO}/\omega_{TO} = (\epsilon_{ст}/\epsilon_{\infty})^{1/2} = 1,15$. Цей вид розсіювання виявляється при температурах вище ~ 100 К і при кімнатній температурі є переважаючим (якщо немає домішкового розсіювання).

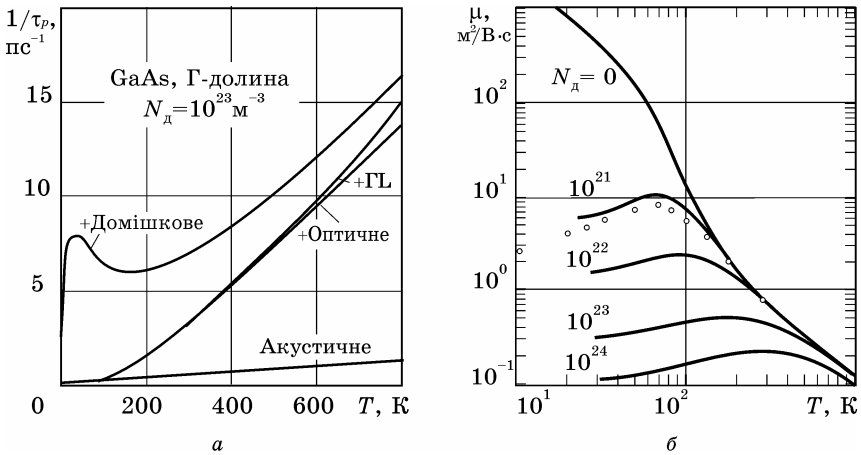


Рис. 2.15. Такі самі залежності, як і на рис. 2.12, для арсеніду галію. Точками позначено експериментальні значення для $N_d = 10^{21} \text{ м}^{-3}$

Друга суттєва відмінність пов'язана з особливістю закону дисперсії GaAs і зі структурою його долин [5]. Крім нижньої Γ -долини біля дна зони провідності з ізотропною ефективною масою $m_{\Gamma}^* = 0,063m$ існують і більш високі: вісім L-долин (як для германію) на межі зони Бріллюена ($M_L = 4$) на відстані вздовж осі енергії $\Delta_{\Gamma L} = 0,33$ еВ із сильно анізотропною ефективною масою $m_t^*/m_l^* = 0,075/1,9$, а також на відстані $\Delta_{\Gamma X} = 0,55$ еВ шість X-долин, як для силіцію, але не в точках Δ , а на межі зони Бріллюена ($M_X = 3$), з ефективними масами $m_t^*/m_l^* = 0,23/1,3$. Наявність L-долин починає виявлятися при температурах

.....
 вище ~ 600 К: взаємодія електронів з оптичними фононами з енергією $\hbar\omega_{ij} = 0,026$ еВ приводить до міждолинного розсіювання, яке спричиняє їх переходи із станів Г-долини у стани L-долин. Для розрахунку часів релаксації цього виду розсіювання можна скористатися співвідношенням (2.40) з константами міждолинної взаємодії $D_{ij} = 10^9$ еВ/см і густиною речовини $\rho = 5,32$ г/см³.

Акустичне розсіювання в GaAs дуже слабке і проявляється лише якщо немає конкуруючих видів розсіювання: полярного оптичного і домішкового. Це видно з рис. 2.15, б, де подано залежності рухливості від температури, для $N_d = 0$: в області температур нижче ~ 70 К у логарифмічних координатах залежність $\mu(T)$ має вигляд прямої з нахилом $-1,5$, характерним саме для акустичного розсіювання. При вищих температурах (до ≈ 600 К) спостерігається зменшення рухливості за рахунок зростання ролі розсіювання на полярних оптичних фононах. При ще вищих температурах включаються механізми розсіювання в L- та X-долини, що приводить до ще крутішого спадання кривої $\mu(T)$.

На тлі цих механізмів домішкове розсіювання виявляється тим сильніше, чим вища концентрація домішки, і відповідно зростає значення температури, при якому рухливість максимальна. Тому, як і для Si та Ge, залежність рухливості від концентрації домішки (рис. 2.13) спадає тим швидше, чим вища N_d . Наведені результати розрахунків близькі до експериментальних, але розходяться з ними в області високих концентрацій, за яких починається виродження напівпровідника. Значення параметрів матеріалів узято переважно з книги [3]. Необхідно зауважити, що в довідковій літературі іноді трапляється суттєва невизначеність у значеннях деяких констант. Це стосується перш за все міждолинних відстаней, акустичного й оптичного деформаційних потенціалів, констант міждолинного зв'язку, а також значень ефективних мас. Тому можна очікувати, що якщо взяти інші значення параметрів, то результати розрахунків ще більше збігатимуться з експериментальними.

3. НОСІЇ В СИЛЬНОМУ ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ

Загальне визначення *сильних електричних полів* дати важко через велику різноманітність ефектів, що в них відбуваються. Найчастіше сильними вважають такі поля, у яких спостерігаються відхилення від закону Ома. Різні причини виникнення цього явища можна поділити на дві групи: ті, що пов'язані зі зміною кінетичних властивостей (рухливості) носіїв у сильних полях, і ті, що спричинені зміною їх концентрації.

3.1. ДРЕЙФ НОСІЇВ

Аналіз процесів дрейфового руху часто передбачає незалежність від електричного поля часу вільного пробігу в «одночастковій» моделі [5] або часу релаксації імпульсу в колективній моделі (розд. 1), що можливо тільки для слабких електричних полів. За цих умов швидкість дрейфового руху залишається пропорційною напруженості електричного поля, що відповідає омічній залежності між густиною струму і напруженістю. У сильних електричних полях наближення часу релаксації стає, строго кажучи, неточним, бо швидкість зміни функції розподілу перестає бути пропорційною її відхиленню від рівноважної. Але в багатьох випадках цю нелінійність враховують, зберігаючи таке наближення лише формально і вважаючи час релаксації (а відповідно й рухливість) таким, що залежить від середньої енергії електрона, а отже, і від напруженості електричного поля. Це викликає нелінійність вольт-амперної характеристики однорідних зразків матеріалу.

3.1.1. Розігрівання електронного газу

Залежність рухливості від напруженості електричного поля можна врахувати, лише розглядаючи *розігрівання електронного колективу* (газу), тобто аналізуючи ступінь впливу електричного поля на середню енергію хаотичного руху, мірою якого є електронна температура, її визначають із співвідношення

$$E_T = 3k_B T_c / 2. \quad (3.1)$$

Основна фізична причина, яка пояснює підвищення електронної температури у сильних полях, – *непружність співударянь*, що формально виявляється у відмінності часів релаксації імпульсу та енергії. Електрон, прискорюючись електричним полем на вільному пробігу, набуває імпульсу $p = m^* v$ і, відповідно, енергії $E_d = m^* v^2 / 2$ спрямованого дрейфового руху. Але ця спрямованість практично повністю втрачається вже після першого співударяння, яке ефективно хаотизує рух, бо час релаксації імпульсу має той самий порядок, що й середній час вільного пробігу. Проте повного розсіювання одержаної за цей час енергії не відбувається, оскільки співударяння всіх видів мають певний ступінь neprужності. Для повного розсіювання необхідним був би час порядку τ_E , який зазвичай більший, ніж τ_p . Залишок енергії поповнює запас не спрямованого, а хаотичного теплового руху, що означає збільшення електронної температури, яку визначають із рівності (3.1).

Розглянемо спочатку механізм розігрівання в **однолинній моделі**, придатній для силіцію або германію, за умови збереження в ній кількості електронів ($dn/dt = 0$), використовуючи рівняння (4.61) і (4.64) у такій формі:

$$d\bar{p}/dt - e\bar{\mathcal{E}} = -\bar{p}/\tau_p, \quad (3.2)$$

$$dE/dt - e\bar{v}\bar{\mathcal{E}} = -(E - E_0)/\tau_E. \quad (3.3)$$

.....
 Для кількісного аналізу розігрівання електронів необхідно з рівнянь балансу повної енергії та енергії дрейфового руху отримати рівняння балансу енергії тільки для хаотичного руху. У рівнянні балансу *повної енергії* (3.3) доданок $e\bar{v}\vec{E}$ характеризує енергію, набуту від поля за одиницю часу, а доданок $(E - E_0)/\tau_E$ – втрачену в результаті зіткнень за той самий час. Щоб отримати рівняння балансу *енергії дрейфового руху* домножимо всі доданки рівняння (3.2) скалярно на \bar{v} і отримаємо

$$dE_d/dt - e\bar{v}\vec{E} = -2E_d/\tau_p. \quad (3.4)$$

Тут права частина – це енергія дрейфу, яка втрачається за 1 с, а $\tau_p/2$ – час її релаксації. Віднімаючи останнє рівняння від (3.3), отримуємо рівняння балансу тільки *хаотичної (теплової) енергії*, яке й визначає динаміку зміни електронної температури:

$$\frac{dE_t}{dt} = -\frac{E_t - E_0}{\tau_E} - \frac{E_d}{\tau_E} + \frac{2E_d}{\tau_p} = -\frac{E_t - E_0}{\tau_E} + \frac{E_d}{\tau_E} \left(\frac{2\tau_E}{\tau_p} - 1 \right). \quad (3.5)$$

Доданок $2E_d/\tau_p$ дорівнює енергії дрейфу, яка за 1 с перетворюється безпосередньо в теплову, але її частина, рівна E_d/τ_E , за той самий час релаксує і переходить до кристалічної решітки. У підсумку збільшення теплової енергії за рахунок дрейфової за 1 с становить $E_d(2\tau_E/\tau_p - 1)/\tau_E$. Відношення $2\tau_E/\tau_p \equiv \gamma$ є параметром, який характеризує ефективність переходу енергії дрейфу в теплову і визначає ступінь непружності співударянь щодо напрямленої енергії. Тому розігрівання електронного газу можливе тільки за умови, що швидкість розсіювання імпульсу перевищує швидкість розсіювання енергії, тобто коли $\tau_E > \tau_p/2$. І тільки за рахунок перевищення електронної температури над рівноважною ($E_0 = 3k_B T/2$), що дорівнює температурі кристалічної решітки, можливий стаціонарний стан, за якого віддана та отримана електронами енергії врівноважують одна одну. Це відбувається, коли електронна

.....
 температура встановлюється на рівні, який відповідає рівності

$$E_{\tau} = E_0 + E_d(\gamma - 1). \quad (3.6)$$

Беручи до уваги, що в стаціонарному стані з огляду на (3.2) швидкість дрейфу $v = e\tau_p \mathcal{E} / m^* = \mu \mathcal{E}$, де $\mu = e\tau_p / m^*$ – рухливість, отримаємо для електронної температури вираз

$$T_e = T + \mu^2 \mathcal{E}^2 m^* (\gamma - 1) / 3k_B. \quad (3.7)$$

Тут потрібно врахувати, що часи релаксації для різних механізмів розсіювання залежать від електронної температури досить складно (див. розд. 2). У літературі відома залежність $T_e(\mathcal{E})$, отримана в припущенні про переважання тільки одного виду розсіювання (зазвичай акустичного), що не враховує доданка E_d / τ_E у (3.5). Але питома вага різних механізмів суттєво змінюється у процесі розігрівання: у сильних електричних полях переважають механізми за участю оптичних фононів. Тому в загальному випадку отримання залежності $T_e(\mathcal{E})$ у явному вигляді практично неможливе і її доводиться знаходити як обернену до $\mathcal{E}(T_e)$:

$$\mathcal{E} = \sqrt{\frac{3k_B(T_e - T)}{m^* \mu^2 (\gamma - 1)}} = \frac{v_{\tau}}{\mu} \sqrt{\frac{T_e / T - 1}{\gamma - 1}}, \quad (3.8)$$

де $v_{\tau} = \sqrt{3k_B T / m^*}$ – рівноважна теплова швидкість електронів, яка відповідає температурі решітки.

Силіцій. На рис. 3.1 подано залежності обернених часів релаксації імпульсу та енергії, а також коефіцієнта непружності розсіювання від електронної температури, розраховані для силіцію при температурі $T = 300$ К за формулами, наведеними у підрозд. 2.3, для тих самих числових значень параметрів, які було використано для розрахунку слабопольової рухливості (підрозд. 2.4). Тут потрібно звернути

.....
 увагу на те, що оптичне розсіювання є переважаючим, оскільки акустичне розсіювання через велику пружність практично не впливає на час релаксації енергії, а домішкове помітне тільки за дуже слабкого розігрівання ($T \approx T_e$).

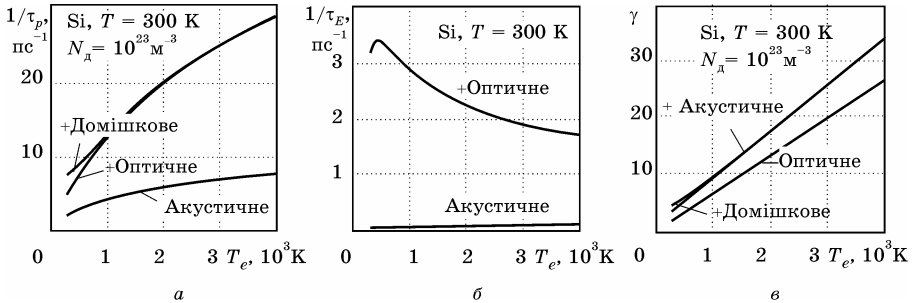


Рис. 3.1. Залежності обернених часів релаксації імпульсу (а), енергії (б) та коефіцієнта непружності (в) від електронної температури в силіції. Криві для кожного виду розсіювання підсумовуються з попередніми

Характерно також, що коефіцієнт непружності γ зі зростанням електронної температури збільшується практично лінійно. Це типово для оптичних механізмів розсіювання відповідно до формули (2.18), де слід узяти $E = 3k_B T_e / 2$, або (2.36).

Наведені результати дозволяють розрахувати важливі характеристики речовини (рис. 3.2): залежності електронної температури (а), як оберненої до (3.8), а також часів релаксації імпульсу (б) та енергії (в) від напруженості електричного поля.

Треба звернути увагу на те, що електронна температура і час релаксації енергії практично не залежать від концентрації домішки, а час релаксації імпульсу, тобто й рухливість, цю залежність виявляють у відносно слабких полях (до 10...20 кВ/см). При цьому τ_p спадає зі збільшенням напруженості електричного поля (у сильному полі $1/\tau_p \sim E$), а τ_E — зростає. У результаті посилюється нерівність $\tau_E > \tau_p$, що означає збільшення ступеня непружності розсіювання.

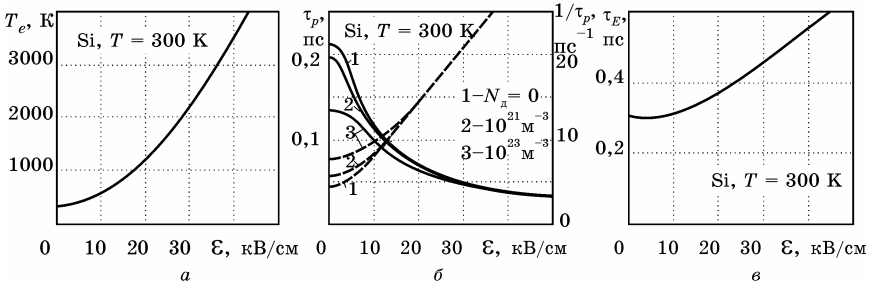


Рис. 3.2. Залежності електронної температури (а), часів релаксації імпульсу (б) та енергії (в) від напруженості електричного поля для силіцію. Штрихові лінії (б) характеризують вплив концентрації домішки на обернений час релаксації імпульсу

Германій. Подібні результати розрахунків для германію подано на рис. 3.3. Основні відмінності від силіцію пов'язані перш за все з переважанням у германії при високих температурах акустичного виду розсіювання, що впливає на значення часу релаксації імпульсу (рис. 3.3, а) і особливо помітно збільшує час релаксації енергії (рис. 3.3, б, в).

Передусім це пояснюється більшою пружністю акустичного розсіювання, що потребує збільшення кількості співударянь для розсіювання енергії, набутої в електричному полі. Характерно також, що коефіцієнт непружності γ (рис. 3.3, в) нелінійно зростає з підвищенням електронної температури, що на перший погляд суперечить співвідношенню (2.18). Але з підвищенням T_e збільшується й енергія акустичних фононів (п. 2.2.3), які можуть брати участь у розсіюванні. Тому γ зростає не так швидко, як це відбувається під час оптичного розсіювання, у якому беруть участь фонони з майже однаковою енергією, але самі значення γ майже на порядок вищі, ніж у силіції. Крім того, більша пружність акустичних співударянь, а також вища рухливість викликають більший ступінь розігрівання: у тих самих полях електронна температура в германії на порядок вища.

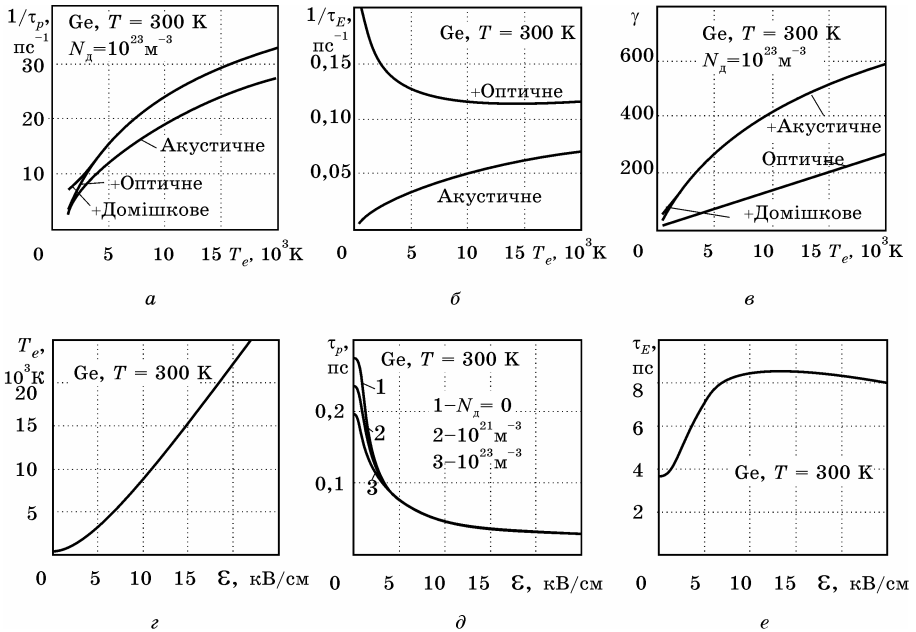


Рис. 3.3. Такі самі залежності, що й на рис. 3.1 и 3.2, для германію. Слід звернути увагу на значно більшу вагу акустичного розсіювання

У багатодолінних напівпровідниках типу GaAs, крім Г-долини біля дна зони провідності, є й більш високі L- та X-долини. У кожній з них механізм розігрівання, у принципі, такий самий, але ситуація ускладнюється тим, що, по-перше, у різних долинах електрони мають різні параметри і ступені їх розігрівання будуть різнитися. По-друге, зі зростанням електронної температури змінюється і концентрація електронів у долинах. Вважаючи, що повна концентрація електронів $n(T)$ у зоні провідності залишається постійною і визначається температурою решітки, а їх перерозподіл по долинах у результаті міждолинного розсіювання залежить від електронної температури, відносну заселеність долин можна охарактеризувати коефіцієнтами ($i, j = \Gamma, L, X$):

$$b_i(T_e) = n_i/n = n_i/(n_i + n_j) = 1/(1 + n_j/n_i) = 1/(1 + \tau_{ji}/\tau_{ni}), \quad (3.9)$$

.....
 які визначають через концентраційні часи релаксації відповідно до (2.41). Вираз (3.9) легко узагальнити і на випадок трьох долин.

Вихідними рівняннями для багатодолинної моделі необхідно вибирати рівняння балансу імпульсу та енергії електронного колективу у формі (3.2) і (3.3) для кожної долини. Відповідно рівняння балансу тільки теплової енергії можна отримати підсумовуванням рівнянь типу (3.5) з ваговими коефіцієнтами, які дорівнюють відносній заселеності долин b_i . Уводячи поняття середньої теплової енергії електронів $E_T = b_\Gamma E_{T\Gamma} + b_L E_{TL}$ (для стислості запису розглянемо тільки дводолинну ΓL -модель), отримаємо для обчислення її значення у стаціонарному стані

$$E_T = E_0 + b_\Gamma E_{d\Gamma} (\gamma_\Gamma - 1) + b_L E_{dL} (\gamma_L - 1). \quad (3.10)$$

Звідси й установлюють зв'язок між середньою для долин електронною температурою і напруженістю електричного поля:

$$T_e = T + \mathcal{E}^2 [b_\Gamma \mu_\Gamma^2 m_\Gamma^* (\gamma_\Gamma - 1) + b_L \mu_L^2 m_L^* (\gamma_L - 1)] / 3k. \quad (3.11)$$

Так само, як для однодолинної моделі, залежність електронної температури від напруженості електричного поля знаходять як обернену до $\mathcal{E}(T_e)$:

$$\mathcal{E} = \sqrt{\frac{3k_B (T_e - T)}{b_\Gamma \mu_\Gamma^2 m_\Gamma^* (\gamma_\Gamma - 1) + b_L \mu_L^2 m_L^* (\gamma_L - 1)}}, \quad (3.12)$$

оскільки параметри b_i , μ_i , γ_i є функціями електронної температури.

Для **арсеніду галію** результати розрахунків обернених часів релаксації імпульсу та енергії в Γ - та L -долинах залежно від електронної температури при $T = 300$ К подано на рис. 3.4 у вигляді діаграм, де крива для кожного виду розсіювання підсумовується з попередньою.

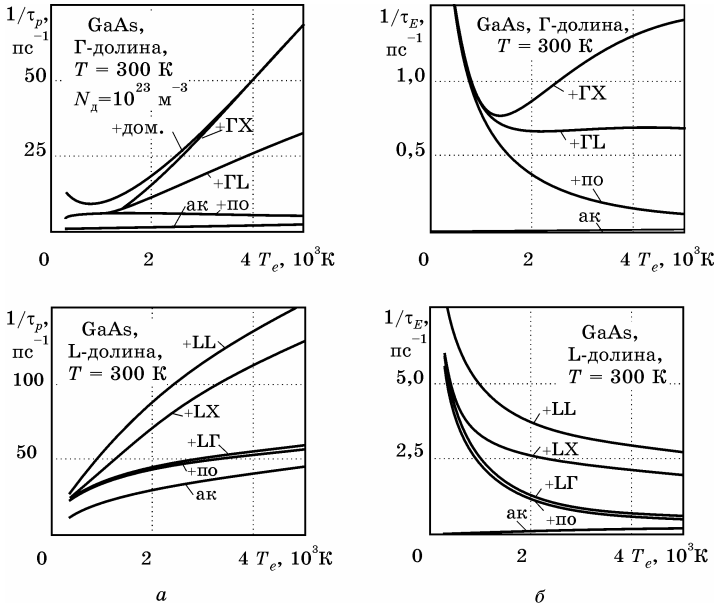


Рис. 3.4. Залежності обернених часів релаксації імпульсу (а) та енергії (б) від електронної температури в Γ - (верхній ряд) і L- (нижній ряд) долинах. Криві для кожного виду розсіювання підсумовуються з попередніми

Порівнявши ці результати з відповідними швидкостями розсіювання на рис. 2.9, слід звернути увагу на те, що домішкове розсіювання, як пружне, не бере участі в розсіюванні енергії і є суттєвим тільки для Γ -долини, причому його роль слабшає із підвищенням електронної температури, а акустичне впливає, практично, тільки на час релаксації імпульсу. Міждолинне розсіювання стає помітним у Γ -долині лише при температурах, вищих за ~ 1000 К, а в L-долині можна знехтувати розсіюванням у Γ -долину через низьку густину станів у ній.

Знання часів релаксації в окремих долинах і розрахунок заселеностей долин (3.9) з використанням (2.41) дозволяє знайти залежність (3.12) між електронною температурою та напруженістю електричного поля, а за нею визначити полетемпературну характеристику $T_e(\mathcal{E})$. На цій залежності (рис. 3.5) можна виділити три характерні ділянки: область

.....
 слабких полів з напруженістю менше 4 кВ/см, де розігрівання визначається, практично, тільки параметрами Γ -долини, перехідну область (до 20 – 40 кВ/см), у якій суттєво змінюється заселеність долин, та область дуже сильних полів, для якої характерне заповнення електронами переважно верхніх долин (рис. 3.5, б) та повільне, майже лінійне зростання електронної температури.

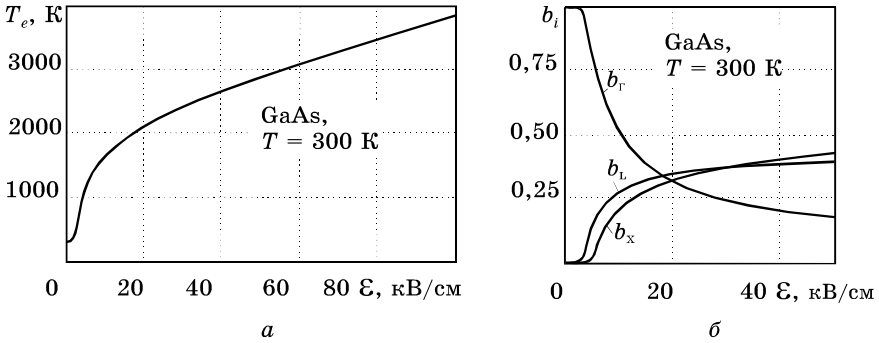


Рис. 3.5. Залежності електронної температури (а) й заселеності долин (б) від напруженості електричного поля в арсеніді галію для кімнатної температури

Отримані результати дозволяють подати функціями напруженості поля, а не електронної температури, й інші важливі характеристики, усереднені по долинах (рис. 3.6):

– рухливість

$$\mu = b_{\Gamma} \mu_{\Gamma} + b_L \mu_L; \quad (3.13)$$

– омічну ефективну масу (рис. 3.6, а)

$$1/m^* = b_{\Gamma} /m_{\Gamma}^* + b_L /m_L^*; \quad (3.14)$$

– час релаксації імпульсу (рис. 3.6, б)

$$\tau_p = \mu m^*/e; \quad (3.15)$$

– час релаксації енергії (рис. 3.6, в)

$$\tau_E = \tau_p/2 + 3k(T_e - T)/2e\mu E^2. \quad (3.16)$$

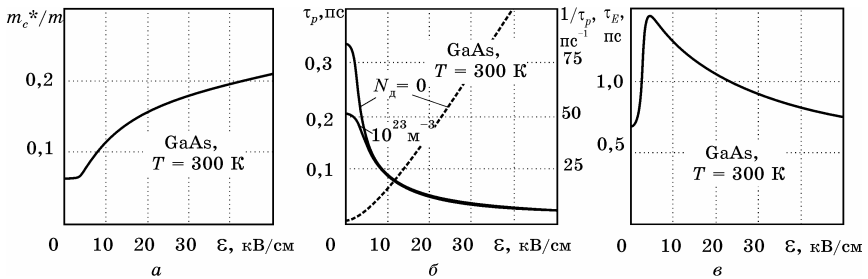


Рис. 3.6. Залежності усереднених по долинах зведеної ефективної маси (а), часів релаксації імпульсу (б) та енергії (в) від напруженості електричного поля для арсеніду галію. Штрихова лінія (б) – обернений час релаксації імпульсу.

Останній вираз впливає з (3.6) та виразів для коефіцієнта непружності γ та енергії дрейфового руху E_d . Отриманий таким чином набір усереднених по долинах параметрів у вигляді функцій від \mathcal{E} дозволяє використовувати рівняння однодолинної моделі для багатодолинних напівпровідників у наближенні заданого поля.

З особливостями механізму розігрівання електронів пов'язана характерна для багатодолинних напівпровідників залежність коефіцієнта дифузії D від напруженості електричного поля (рис. 3.7). Розрахувати її можна, використовуючи співвідношення Ейнштейна: $D = \mu k_B T_e / e$. Враховуючи залежність рухливості від електронної температури та залежність останньої від напруженості поля, легко зрозуміти й хід функції $D(\mathcal{E})$. У слабких полях час релаксації імпульсу, отже й рухливість, майже не залежать від напруженості, тому зростання коефіцієнта дифузії пояснюється тільки підвищенням температури електронного газу. У сильних полях, де переважають оптичне та міждолинне розсіювання, розігрівання не таке значне (рис. 3.5, а) і коефіцієнт дифузії спадає через зменшення часу релаксації імпульсу (рис. 3.6, б) і, відповідно, рухливості. Максимальне значення коефіцієнта дифузії має за напруженості поля, близької до критичної.

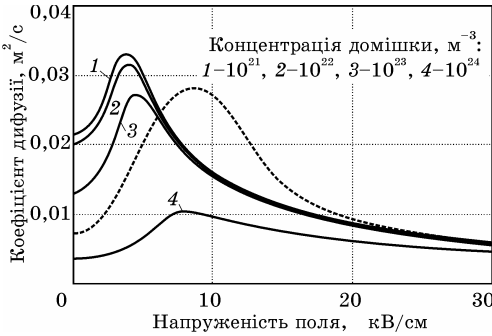


Рис. 3.7. Залежність коефіцієнта дифузії від напруженості електричного поля для різних концентрацій домішки. Штрихова лінія – експериментальна залежність, взята з [6]

між собою як максимальним значенням (до $0,1 \text{ м}^2/\text{с}$), так і положенням максимуму. Це пов'язано, найімовірніше, з різними методами вимірювань та деякою невизначеністю умов експерименту (концентрації домішки).

Вплив концентрації домішки спостерігається практично тільки в слабкому полі через збільшення домішкового розсіювання і відповідне зменшення рухливості за більш високого рівня легування. Слід зазначити, що наявні в науковій літературі експериментальні залежності $D(\mathcal{E})$, загалом маючи однаковий вигляд, різняться

3.1.2. Насичення дрейфової швидкості

Розігрівання електронного газу в сильних електричних полях супроводжується так званим *насиченням дрейфової швидкості*, тобто виникненням ситуації, коли спрямована швидкість стає практично незалежною від напруженості поля, а на вольт-амперній характеристиці з'являється горизонтальна ділянка.

Найпростіше уявлення про причини такого явища можна скласти на прикладі одночасткової моделі дрейфу [5], де середній час вільного пробігу обернено пропорційний середній швидкості, яка має як хаотичну (теплову), так і спрямовану (дрейфову) складову. У слабких електричних полях $v_{\text{др}} \ll v_{\text{хаот}}$ і середня швидкість визначається тільки хаотичною складовою. Тому рухливість залишається постійною, а вольт-амперна характеристика – лінійною. Але в міру того,

.....
 як із зростанням \mathcal{E} дрейфова швидкість стає сумірною з хаотичною, середня швидкість на вільному пробігу зростає як за рахунок дрейфової складової, так і за рахунок хаотичної, яка збільшується із розігріванням електронного газу. У результаті зменшується час вільного пробігу і рухливість, а вольт-амперна характеристика стає похилішою з тенденцією до насичення. Звідси випливає і можливий критерій для визначення терміну «сильне електричне поле»: у ньому дрейфова та хаотична складові швидкості електронів сумірні.

Повніше описати це явище можна з використанням колективної моделі дрейфу. Як видно на прикладі силіцію (див. рис. 3.2, б), обернений час релаксації імпульсу зростає зі збільшенням напруженості поля практично лінійно. Це відбувається при $\mathcal{E} > 10...20$ кВ/см, коли переважаючим стає розсіювання за участю оптичних фононів, причому здебільшого з їх збудженням. За цих умов дрейфова швидкість електронів не може перевищити деяке значення v_n , оскільки чим більша напруженість поля, тим пропорційно вища швидкість розсіювання. Тому тільки-но прискорюваний полем електрон досягне певної (в середньому!) швидкості, що дорівнює швидкості насичення v_n , з великою ймовірністю відбудеться розсіювання із збудженням оптичного фонона і відповідним зменшенням енергії електрона на величину $\hbar\omega_0$. Отже, зростання напруженості електричного поля приводить до збільшення не дрейфової, а хаотичної швидкості, тобто електронної температури.

Деяким аргументом на користь такого уявлення є той факт, що в германії (див. далі), у якому переважає акустичне розсіювання, перехід до режиму насичення помітно «затягнуто» в область високих електронних температур, а в режимі насичення спостерігається помітне підвищення швидкості.

Щоб зрозуміти чинники, які визначають швидкість насичення, іноді використовують таку просту модель. Відповідно до рівняння балансу імпульсу (3.2), розсіяний за час τ_p імпульс m^*v_n дорівнює набутому від поля $-e\mathcal{E}\tau_p$, а відповідно до рівняння балансу енергії (3.1) для дрейфового руху набута від поля за той самий час енергія дрейфу $e v_n \mathcal{E} \tau_p$ у стаціонарному стані дорівнює енергії випромінюваного

.....
 фонона $\hbar\omega_0$. Вилучивши з цих рівностей напруженість електричного поля, отримуємо

$$v_n = (\hbar\omega_0/m^*)^{1/2}. \quad (3.17)$$

Це співвідношення, використовуване зазвичай в навчальній літературі, слід сприймати лише як оціночне. Щоб отримати розрахункові співвідношення, потрібно врахувати особливості механізмів розсіювання у конкретних матеріалах.

Силіцій. Домноживши співвідношення (3.8) на рухливість, одержимо вираз для дрейфової швидкості:

$$v = v_T \sqrt{\frac{T_e/T - 1}{\gamma - 1}}. \quad (3.18)$$

Цей вираз дозволяє, розрахувавши часи релаксації з урахуванням отриманого раніше зв'язку між електронною температурою і напруженістю електричного поля, отримати поле-швидкісну характеристику $v(E)$. Для силіцію її подано на рис. 3.8: у слабких полях швидкість пропорційна

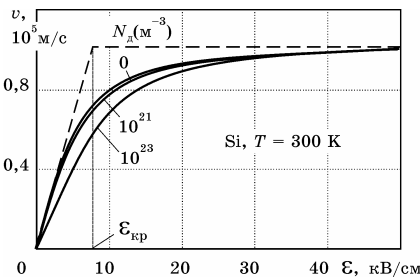


Рис. 3.8. Залежність дрейфової швидкості від напруженості електричного поля в силіції при різних концентраціях домішки та її кусково-лінійна апроксимація (штрихова лінія)

напруженості, а в сильних ($E > 20 \text{ кВ/см}$) маємо дуже похилу ділянку, яка і відповідає насиченню. У цьому режимі практично не спостерігається залежності швидкості від концентрації домішки, що говорить про незначну роль домішкового розсіювання і, відповідно, про переважання фононних механізмів у сильних електричних полях.

Для детальнішого аналізу впливу різних чинників на швидкість насичення та для отримання відповідних аналітичних співвідношень необхідно припустити, що, по-перше, частка акустичного

розсіювання навіть у сильних полях залишається помітною порівняно з часткою оптичного. До того ж співвідношення між ними залишається практично постійним, бо при великих електронних температурах ($k_B T_e \gg \hbar\omega_o$) параметр $t_e = \hbar\omega_o / 2k_B T_e$ малий і $K_1(t_e) \approx 1/t_e$. За цих умов для обчислення оберненого часу релаксації імпульсу при оптичному розсіюванні (2.33) можна використовувати простіший вираз

$$\frac{1}{\tau_{po}} \approx \frac{m^{*3/2} D_o^2}{\pi^{3/2} \rho \hbar^2} \cdot \frac{\sqrt{2k_B T_e}}{\hbar\omega_o \operatorname{sh} t}. \quad (3.19)$$

Оскільки час релаксації імпульсу для акустичного розсіювання (2.29) також пропорційний $\sqrt{T_e}$, то їх відношення, яке дорівнює

$$\frac{\tau_{po}}{\tau_{pa}} = \sqrt{\frac{3\pi}{2}} \cdot \frac{D_a^2 \hbar\omega_o \operatorname{sh} t}{D_o^2 (\hbar\nu_{зв})^2} \cdot k_B T, \quad (3.20)$$

не залежить від електронної температури. Зокрема, для силіцію при кімнатній температурі воно дорівнює $\approx 0,38$. Це дозволяє вважати, що загальний час релаксації імпульсу пропорційний часу оптичної релаксації і його можна подати у такому вигляді

$$\tau_p = \tau_{po} / (1 + \tau_{po} / \tau_{pa}). \quad (3.21)$$

По-друге, коефіцієнт непружності співударянь $\gamma = 2\tau_E / \tau_p$ залежить від T_e практично лінійно (рис. 3.1, в). Якщо знехтувати релаксією енергії за рахунок майже пружного акустичного розсіювання і вважати, що τ_E визначається тільки оптичним розсіюванням ($\tau_E = \tau_{Eo}$), то з урахуванням (3.21) отримаємо

$$\gamma = \gamma_o (1 + \tau_{po} / \tau_{pa}), \quad (3.22)$$

.....
 де γ_0 – коефіцієнт непружності оптичного розсіювання, який визначають відповідно до (2.36):

$$\gamma_0 = \frac{2\tau_{E_0}}{\tau_{p_0}} = 6 \frac{T_e}{T} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^2 = \frac{3}{2tt_e} = \frac{3}{2t^2} \frac{T_e}{T}. \quad (3.23)$$

У результаті повний коефіцієнт непружності зручно подати у вигляді

$$\gamma = \frac{3(1 + \tau_{p_0} / \tau_{p_a})}{2t^2} \frac{T_e}{T} \equiv \beta \frac{T_e}{T}, \quad (3.24)$$

звідки наочно видно, що він пропорційний електронній температурі.

Коефіцієнт пропорційності β , який є коефіцієнтом непружності фоновного розсіювання при $T = T_e$, по-перше, не залежить від T_e , а тільки від температури решітки T , і, по-друге, найчастіше має значення, більші за 1. Наприклад, для силіцію $\beta = 2,6$ при $T = 300$ К. При великих електронних температурах це дозволяє знехтувати одиницею у знаменнику та числівнику (3.18) і отримати для швидкості насичення

$$v_H = \frac{v_T}{\sqrt{\beta}} = \frac{v_T}{\sqrt{6(1 + \tau_{p_0} / \tau_{p_a})}} \frac{\hbar \omega_0}{k_B T}. \quad (3.25)$$

Значення v_T пропорційне $T^{1/2}$, тому, якщо відношення τ_{p_0} / τ_{p_a} мале, швидкість насичення можна наближено вважати пропорційною $T^{-1/2}$. Характерно також, що значення v_H не залежить від концентрації домішки, бо в області насичення переважають оптичні механізми розсіювання.

У підсумку прийняті наближення дозволяють для обчислення поле-швидкісної характеристики замість (3.18) використовувати простіший вираз:

$$v = v_H \sqrt{\frac{T_e/T - 1}{T_e/T - 1/\beta}}. \quad (3.26)$$

.....
 За відомих значень v_n і слабопольової рухливості μ_0 іноді використовують кусково-лінійну апроксимацію (див. рис. 3.8) поле-швидкісної характеристики $v(\mathcal{E})$:

$$v = \mu_0 \mathcal{E} \text{ при } \mathcal{E} < \mathcal{E}_{кр}, \quad v = v_n \text{ при } \mathcal{E} > \mathcal{E}_{кр}, \quad (3.27)$$

де $\mathcal{E}_{кр} = v_n / \mu_0$ — критична напруженість поля, що умовно відповідає межі між сильними та слабкими полями. Така апроксимація зручна, оскільки використані параметри v_n та μ_0 можна відносно просто ідентифікувати.

Ще зручнішою і досить точною може виявитися явна залежність $v(\mathcal{E}) = \mu(\mathcal{E})\mathcal{E}$, у якій залежність рухливості від поля задано наближеним виразом

$$\mu(\mathcal{E}) = \mu_0 / [1 + (\mathcal{E} / \mathcal{E}_{кр})^2]^{1/2}. \quad (3.28)$$

Цю залежність можна використовувати тільки для фонових механізмів розсіювання. Вплив домішки тут помітний у слабких полях і його можна наближено врахувати, якщо в числівнику замість μ_0 використати рухливість $\mu(N_d)$ для певної концентрації домішки, але $\mathcal{E}_{кр}$ слід розраховувати через μ_0 .

Германій. Переважання акустичного розсіювання викликає, як зазначалось у попередньому розділі, нелінійність залежності $\gamma(T_e)$. Але не зважаючи на це, загальний коефіцієнт непружності зручно подати, як і для силіцію, через коефіцієнт непружності тільки для оптичного розсіювання. При цьому на відміну від (3.22) не можна нехтувати внеском акустичного розсіювання в релаксацію енергії, і цей зв'язок матиме вигляд

$$\gamma = \gamma_0 \frac{1 + \tau_{p_o} / \tau_{p_a}}{1 + \tau_{E_o} / \tau_{E_a}}. \quad (3.29)$$

Коефіцієнт непружності оптичного розсіювання γ_0 пропорційний T_e і за характерних для германію параметрів становить $\approx 3,7 T_e / T$. Відношення часів релаксації імпульс-

.....
 су в числівнику (3.29), як і в (3.20), не залежить від T_e і має значення $\approx 2,7$ при $T = 300$ К. Але відношення часів релаксації енергії при високих електронних температурах залежить від T_e практично лінійно $\tau_{E_0}/\tau_{E_a} \approx 0,014 T_e/T$. Тому повний коефіцієнт непружності можна подати так само, як і (3.24), у формі $\gamma = \beta T_e/T$, але коефіцієнт β зменшується із зростанням T_e за законом $\beta \approx \beta_0/(1 + 0,014 T_e/T)$, де $\beta_0 \approx 10,2$.

У підсумку можна вважати, що відповідно до (3.18) при $T_e/T \gg 1$ настає насичення, але в режимі насичення спостерігається відносно повільне зростання швидкості дрейфу. Це уявлення підтверджують результати розрахунків, наведені на рис. 3.9, де зображено поле-швидкісну характеристику (а) і залежність рухливості від напруженості електричного поля (б), отримані з урахуванням поле-температурної характеристики $T_e(\mathcal{E})$ (рис. 3.3, з).

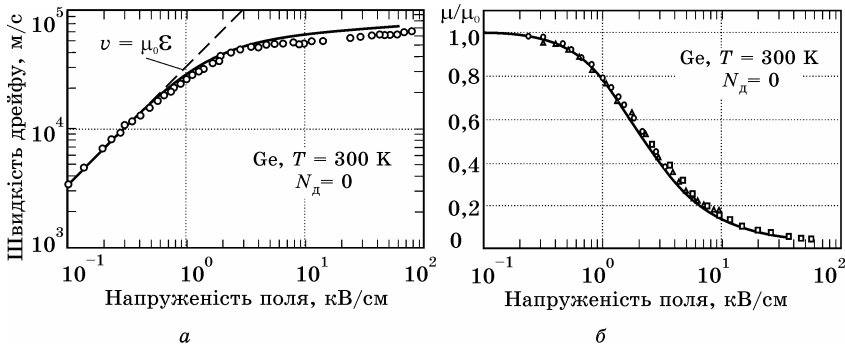


Рис. 3.9. Залежності дрейфової швидкості (а) і нормованої на слабопольове значення рухливості (б) від напруженості електричного поля в германії при кімнатній температурі

На рисунках також наведено результати експериментів, узяті з книги [4], де описано дані, отримані з різних першоджерел.

Арсенід галію. Поле-швидкісна характеристика GaAs має принципово інший вигляд, що пов'язано передусім з багатодолинною структурою закону дисперсії, а також особливостями механізмів розсіювання в різних долинах.

У центральній Γ -долині за відносно невеликого розігрівання ($T_e \approx 1000$ К) з фонових механізмів переважає полярне оптичне розсіювання (рис. 3.4, *a*). Акустичне впливає тільки на розсіювання імпульсу і його внесок визначається відношенням $\tau_{рпо}/\tau_{ра}$, яке в широкій області електронних температур не перевищує 0,1. Оцінка швидкості насичення, яку забезпечують полярні оптичні фонони з енергією $\hbar\omega_o = 0,034$ еВ, за формулою, аналогічною (3.25), дає значення $v_n' \approx 2,2 \cdot 10^5$ м/с. Але через особливості полярного оптичного розсіювання значення $1/\tau_{рпо}$ спадає із зростанням T_e і швидкість зменшується, що частково підтверджує верхня крива рис. 3.10, *a*.

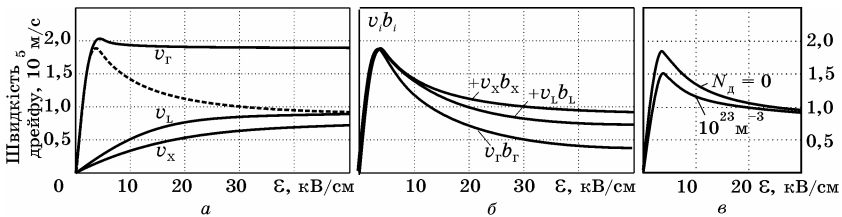


Рис. 3.10. Залежність від напруженості електричного поля швидкості дрейфу електронів для кожної долини та їх усереднена залежність (штрихова лінія) (*a*). Та сама залежність, побудована підсумовуванням швидкостей в окремих долинах з ваговими коефіцієнтами, рівними їх заселеностям (*б*). Вплив концентрації домішки на середню швидкість дрейфу показано на експериментальних кривих (*в*)

Спадання припиняється, коли при електронних температурах ≈ 1500 К включаються механізми міждолинного розсіювання, у яких беруть участь фонони з енергією $\hbar\omega_{ij} \approx 0,8\hbar\omega_o = 0,26$ еВ. При великих електронних температурах ці механізми стають переважаючими і загальний коефіцієнт непружності за цих умов зручно виразити через його значення для міждолинного розсіювання

$$\gamma = \gamma_{ij} \frac{1 + \tau_{pij} / \tau_{рпо}}{1 + \tau_{Eij} / \tau_{Eпо}}. \quad (3.30)$$

Така форма подання дозволяє розраховувати швидкість насичення за формулою (3.25), але з використанням пара-

.....
 метрів міждолинних фононів і поправкового коефіцієнта, що враховує внесок інших фононів, у вигляді дробу з останнього виразу. Для Γ -долини, наприклад, при $T_e = 6000$ К цей коефіцієнт дорівнює 1,02, прямуючи до 1 із подальшим підвищенням електронної температури. Тому з хорошою точністю можна вважати, що за цих умов непружність співударянь визначається тільки непружністю міждолинного розсіювання, яка відповідно до (2.42) практично лінійно зростає зі збільшенням T_e/T у сильних електричних полях з коефіцієнтом пропорційності $\beta \approx 6,2$. А оскільки теплова швидкість електронів у Γ -долині $v_{\Gamma} = \sqrt{3k_B T / m_{\Gamma}^*}$, що при кімнатній температурі становить $4,6 \cdot 10^5$ м/с, то швидкість дрейфу досягає значення насичення $v_{н\Gamma} \approx 1,8 \cdot 10^5$ м/с.

У підсумку поле-швидкісна характеристика для Γ -долини (рис. 3.10), досягнувши максимального значення швидкості $\approx 2,1 \cdot 10^5$ м/с, у результаті зміни переважаючого виду розсіювання з полярного оптичного на міждолинне дещо знижується і насичується при $v_{н\Gamma}$. Пікове значення швидкості має при значенні напруженості електричного поля, дещо меншому за 4 кВ/см, яке зазвичай і беруть як критичне поле.

У L-долинах при достатньо високих електронних температурах також переважають міждолинні види розсіювання, як в еквівалентні долини (LL-), так і в нееквівалентні (LG-, LX-). Але помітну роль відіграють також акустичне і меншою мірою полярне оптичне розсіювання. Тому коефіцієнт непружності визначають, як і в Γ -долині, за (3.29) з поправковим коефіцієнтом 1,2...1,4. Одержане значення $\beta \approx 9$ дає значення швидкості насичення $v_{нL} \approx 1,1 \cdot 10^5$ м/с. Відповідну поле-швидкісну характеристику для електронів L-долини подано на рис. 3.10, а.

У дуже сильних електричних полях не можна обмежитися дводолинним наближенням, бо певна частина електронів знаходиться у станах X-долин. Параметри електронів у них забезпечують швидкість насичення $v_{нX} \approx 0,7 \cdot 10^5$ м/с, яку розраховують так само, як і для L-долин.

Середню швидкість електронів знаходять як суму швидкостей в окремих долинах з ваговими коефіцієнтами, що

.....
дорівнюють відповідним заселеностям (3.9), які також можна подати функціями напруженості поля, використовуючи попередньо знайдену залежність (3.12) між T_e та \mathcal{E} . На рис. 3.10, б подано результуючу поле-швидкісну характеристику і внески до неї електронів кожної долини, а також характерну для GaAs експериментальну залежність (ϵ).

3.1.3. Динамічна провідність

Статична питома електропровідність визначається як коефіцієнт пропорційності між густиною струму провідності й напруженістю електричного поля: $j = \sigma \mathcal{E}$. Відповідно визначимо динамічну (диференціальну) провідність як коефіцієнт пропорційності між змінами dj і $d\mathcal{E}$: $\sigma_d = dj/d\mathcal{E}$. Оскільки щільність струму $j = env$, то при незмінній концентрації $dj = endv$. У слабких електричних полях швидкість дрейфу пропорційна напруженості поля $v = \mu \mathcal{E} = (e\tau_p/m^*)\mathcal{E}$, а оскільки рухливість постійна, то $dv = \mu d\mathcal{E}$ і диференціальна провідність збігається зі статичною. У сильних полях через особливості оптичного розсіювання відбувається насичення швидкості, зменшується час релаксації імпульсу i , відповідно, рухливість. За цих умов із стаціонарного рівняння балансу імпульсу випливає, що $(e/m^*)d\mathcal{E} = (\tau_p^{-1})dv + v d(\tau_p^{-1})$. У режимі насичення $dv = 0$ і $d(\tau_p^{-1}) = (e/m^* v_n)d\mathcal{E}$. Якщо цей зворотний зв'язок між рухливістю і напруженістю поля екстраполювати на перехідну область, то $dv = \mu(1 - v/v_n)d\mathcal{E}$ і

$$\sigma_d = \sigma(1 - v/v_n). \quad (3.31)$$

У слабких полях $v \ll v_n$ і диференціальна провідність збігається зі статичною, але в міру наближення до режиму насичення зменшується до 0. Отримане співвідношення (6.31) придатне для однодолинних напівпровідників (Si, Ge), якщо концентрація електронів у зоні залишається незмінною.

Результати п. 3.1.2 показують, що характерною рисою арсеніду галію й інших багатодолинних напівпровідників є наявність спадної ділянки на залежності дрейфової швид-

кості від напруженості електричного поля. Пояснюється це тим, що з розігріванням збільшується частка електронів, які під час міждолинного розсіювання переходять у верхні долини, де їхня ефективна маса стає більшою. У результаті зменшується середня дрейфова швидкість i , відповідно, струм провідності. Така ситуація приводить до того, що позитивні зміни поля викликають негативні зміни струму провідності в матеріалі, тобто *негативну динамічну провідність* (НДП). На рис. 3.11 (штрихова лінія) наведено залежність такої провідності від напруженості поля, отриману чисельним диференціюванням функції $v(\mathcal{E})$.

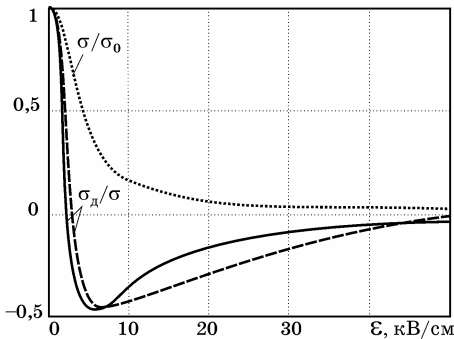


Рис. 3.11. Залежності від напруженості електричного поля питомої електропровідності для арсеніду галію: статичної, нормованої на її слабопольове значення (пунктирна лінія); диференціальної, нормованої на статичну й отриману чисельним диференціюванням функції $v(\mathcal{E})$ (штрихова лінія) та розраховану за (3.37) (суцільна лінія)

Для аналізу основних факторів, що впливають на значення НДП, візьмемо до уваги, що струм створюють різні групи електронів, які мають у різних долинах свої характерні параметри, тобто $j = \sum_i en_i v_i = en \sum_i b_i v_i$, і тому $\sigma_d = \sum_i \sigma_{di}$ із підсумовуванням по Γ -, L-, а за необхідності, і по X-долинах. Для кожної долини

$$\sigma_{di} = end(b_i v_i)/d\mathcal{E} = en[b_i dv_i/d\mathcal{E} + v_i db_i/d\mathcal{E}], \quad (3.32)$$

де перший доданок можна описати співвідношенням, подібним до (3.31). Для другого доданка, пов'язаного з перезаселенням долин, слід мати на увазі, що заселеності долин $b_i = n/n_i$ залежать від напруженості поля, але не явно, а через електронну температуру. Тому

$$db_i = \frac{db_i/dT_e}{d\mathcal{E}/dT_e} d\mathcal{E}. \quad (3.33)$$

Для Γ -долини, використовуючи співвідношення (1.73), можна одержати

$$\frac{db_\Gamma}{dT_e} = -b_\Gamma(1 - b_\Gamma) \frac{\Delta_{\Gamma L}}{k_B T_e^2}. \quad (3.34)$$

Похідну $d\mathcal{E}/dT_e$ можна легко визначити для режиму насичення, у якому і виявляються міждолинні переходи, з умови $d\mathcal{E} = v_n d(\mu^{-1})$. Звідси $d\mathcal{E}/dT_e = v_n d(\mu^{-1})/dT_e$, а оскільки в сильному полі при міждолинному розсіюванні можна вважати, що $1/\tau_p \sim T_e$ (див. рис. 3.6, б), то

$$d\mathcal{E}/dT_e \approx v_n / \mu T_e. \quad (3.35)$$

Отже, для розрахунку диференціальної провідності, обумовленої електронами тільки Γ -долини, можна одержати:

$$\sigma_{д\Gamma} = en\mu_\Gamma b_\Gamma \left[1 - \frac{v_\Gamma}{v_{н\Gamma}} - \frac{v_\Gamma}{v_{н\Gamma}} (1 - b_\Gamma) \frac{\Delta_{\Gamma L}}{k_B T_e} \right]. \quad (3.36)$$

Повна провідність включає подібні вирази для верхньої (верхніх) долини. Для спрощення можна вважати, що в області найбільш різкого спаду результуючої кривої $v(\mathcal{E})$ (рис. 3.10, а) швидкість електронів у верхніх долинах ще не досягає насичення, і їхню рухливість можна вважати постійною і майже на порядок меншою. У підсумку хорошим наближенням може служити вираз

$$\sigma_{д} \approx \sigma(1 - v_\Gamma/v_{н\Gamma} - b_\Gamma b_{L\Delta_{L\Gamma}}/k_B T_e), \quad (3.37)$$

у якому внесок електронів верхніх долин враховано у сумарній статичній електропровідності σ , а в останній доданок можна ввести поправковий коефіцієнт 0,6...0,8.

.....

На рис. 3.11 наведено нормовані залежності $\sigma_{\parallel}/\sigma$ від напруженості електричного поля: розраховані за (3.37) і отримані чисельним диференціюванням кривої $v(\mathcal{E})$ (див. рис. 3.10, *a*). Найхарактерніша особливість одержаних результатів – наявність області НДП, що виявляється практично відразу після початку міждолинних переходів ($\mathcal{E} \approx 4$ кВ/см) і набуває максимального значення при $\mathcal{E} \approx 2 \dots 10$ кВ/см, коли концентрації електронів у верхній і нижній долинах приблизно однакові ($b_{\Gamma} b_L \approx 0,25$).

Розраховувати таким чином диференціальну провідність можна лише для повільних змін електричного поля і, відповідно, струму. Із підвищенням швидкості змін (частоти) необхідно враховувати інерційність таких процесів: запізнювання зіткнень, що характеризується часом релаксації імпульсу (τ_p), релаксації енергії (τ_E), міждолинних переходів (τ_n), використовуючи для цього нестационарні рівняння збереження. Надалі обмежимося режимом малого сигналу, за якого всі змінні величини $a(t)$ подають у вигляді суми постійної складової a_0 і малої гармонічної мінливої в часі з амплітудою a : $a(t) = a_0 + a e^{i\omega t}$. Знехтувавши членами другого порядку малості і з огляду на те, що $d/dt = i\omega$, використовувані рівняння поділимо на незалежні від часу для постійних складових і лінійні рівняння для амплітуд змінних.

Використання такої процедури для щільності струму $j = env$ дозволяє одержати для обчислення його високочастотної складової таке співвідношення

$$j_{\sim} = en_0 v_{\sim} + ev_0 n_{\sim}. \quad (3.38)$$

Величину v_{\sim} можна знайти з рівняння балансу імпульсу (4.61), яке для змінних складових матиме вигляд

$$i\omega v_{\sim} = (e/m^*)\mathcal{E}_{\sim} - (\tau_{p0}^{-1}) v_{\sim} - v_0 (\tau_p^{-1})_{\sim},$$

звідки

$$v_{\sim} = (e/m^*)\tau_{p\omega}\mathcal{E}_{\sim} - v_0\tau_{p\omega} (\tau_p^{-1})_{\sim}, \quad (3.39)$$

де

$$\tau_{p\omega} = \tau_{p0}/(1 + i\omega\tau_{p0}). \quad (3.40)$$

Величину $(\tau_p^{-1})_{\sim}$ можна знайти з функції $\tau_p^{-1}(T_e(\mathcal{E}))$ з урахуванням її неявної залежності від напруженості поля за малого сигналу таким чином:

$$\tau_{p\sim}^{-1} = \frac{d(\tau_p^{-1})}{dT_e} T_{e\sim}. \quad (3.41)$$

Тоді внесок першого доданка з (3.38) у динамічну провідність матиме вигляд

$$\sigma_{\omega}^{(1)} = \frac{e^2 n_0 \tau_{p\omega}}{m^*} \left[1 - \frac{m^* v_0}{e} \frac{d(\tau_p^{-1})}{dT_e} T_{e\sim} \right]. \quad (3.42)$$

Похідну тут, як і раніше, для сильних полів замінюють відношенням τ_{p0}^{-1}/T_e . Високочастотна складова температури $T_{e\sim}$ визначається інерційністю процесів релаксації енергії і її можна знайти з нестационарного рівняння балансу енергії (1.64). Якщо вважати, що із насиченням швидкості хаотичний (тепловий) рух переважає над дрейфовим ($\gamma = E_{\tau}/E_d \gg 1$) і, відповідно, $\tau_E \approx \text{const}(T_e)$, то малосигнальна частина рівняння балансу енергії набуде вигляду

$$i\omega E_{\tau\sim} = e v_H \mathcal{E}_{\sim} - E_{\tau\sim}/\tau_{E0}. \quad (3.43)$$

Звідси, увівши поняття *комплексного високочастотного часу релаксації енергії*

$$\tau_{E\omega} = \tau_{E0}/(1 + i\omega\tau_{E0}), \quad (3.44)$$

одержимо для малосигнальної частини електронної температури:

$$T_{e\sim} = (2 e v_H \tau_{E\omega} / 3 k_B) \mathcal{E}_{\sim}. \quad (3.45)$$

У підсумку (3.42) можна подати в такому вигляді:

$$\sigma_{\omega}^{(1)} = \frac{\sigma_0}{1 + i\omega\tau_{p0}} \left[1 - \frac{v_0}{v_H} \cdot \frac{1}{1 + i\omega\tau_{E0}} \right]. \quad (3.46)$$

Значення змінної складової концентрації n_{\sim} в (3.38) знаходять з рівнянь балансу для концентрацій електронів у долинах (1.74). Записуючи їх для відносних величин $b_i = n_i/n$ (у дводолинному наближенні) і беручи до уваги, що $b_{i\sim} = -b_{j\sim} \equiv b_{\sim}$, одержимо для її малосигнальної частини

$$i\omega b_{\sim} = -b_{\sim}(1/\tau_{i0} + 1/\tau_{j0}) - b_{i0}(\tau_{ij}^{-1})_{\sim} + b_{j0}(\tau_{ji}^{-1})_{\sim}. \quad (3.47)$$

Якщо ввести поняття сумарного для всіх долин часу міждолинної релаксації

$$\tau_m = (1/\tau_{i0} + 1/\tau_{j0})^{-1}, \quad (3.48)$$

то з огляду на (3.47) змінну складову заселеності можна подати таким чином:

$$b_{\sim} = \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_m} \left[\tau_{ij0}(\tau_{ij}^{-1})_{\sim} - \tau_{ji0}(\tau_{ji}^{-1})_{\sim} \right], \quad (3.49)$$

Тут використано співвідношення $b_{i0} = \tau_m/\tau_{i0}$ й $b_{j0} = \tau_m/\tau_{j0}$, які слідують безпосередньо з визначення заселеностей і правих частин рівнянь балансу концентрацій для їх постійних складових. Крім того, співвідношення $b_{j0}/b_{i0} = \tau_{i0}/\tau_{j0}$ зручно використовувати для подання другого співмножника в (3.49) у простішій формі:

$$b_{\sim} = \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_m} \frac{(\tau_{ji} / \tau_{ij})_{\sim}}{\tau_{j0} / \tau_{i0}}. \quad (3.50)$$

Якщо для обчислення відношення часів міждолинної релаксації скористатися співвідношенням (1.73), то одержимо

$$b_{\sim} = -\frac{b_{i0}b_{j0}}{1+i\omega\tau_m} \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e^2} T_{e\sim}. \quad (3.51)$$

Використовуючи (3.45) для $T_{e\sim}$, одержимо з (3.38) на додаток до (3.42) другий доданок для високочастотної електропровідності

$$\sigma_{\omega}^{(2)} = -\frac{e^2 n_0 \tau_{p0}}{m^*} \cdot \frac{v_0}{v_H} \cdot \frac{\tau_{E\omega}}{\tau_{E0}} \cdot \frac{b_{i0}b_{j0}}{1+i\omega\tau_m} \cdot \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e}. \quad (3.52)$$

Якщо, як і раніше, вважати, що значення провідності визначається переважно електронами Γ -долини, то сума (3.42) і (3.52) при $\omega \rightarrow 0$ збігається з формулою (3.37), що описує низькочастотну диференціальну провідність. Значення високочастотної електропровідності, нормоване на її статичне значення, можна розрахувати за співвідношенням

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma} = \frac{\tau_{p\omega}}{\tau_{p0}} - \frac{v_{0\Gamma}}{v_{H\Gamma}} \cdot \frac{\tau_{E\omega}}{\tau_{E0}} \left(\frac{\tau_{p\omega}}{\tau_{p0}} + \frac{b_{i0}b_{j0}}{1+i\omega\tau_m} \cdot \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right). \quad (3.53)$$

Насамперед необхідно зазначити, що провідність має комплексний характер, що проявляється на високих частотах. На рис. 3.12 наведено частотні залежності дійсної (*a*) і уявної (*b*) частин (верхній ряд) електропровідності, нормованої на її статичне значення $\sigma = e^2 n \tau_{p0} / m^*$. У нижньому ряду наведено їхні залежності (*в*, *г*) від напруженості електричного поля для різних частот.

Частотна залежність σ_{ω} визначається множниками типу $(1+i\omega\tau)^{-1}$, що включають три часові константи τ_p , τ_E і τ_m . Перший доданок (див розд. 1.2.4) залежить від частоти зіткнень, тобто від часу релаксації імпульсу, і пояснюється інерційністю змін струму зі зміною поля. Другий доданок пов'язаний з переходом дрейфової швидкості в режим насичення, що вимагає участі оптичних фононів, і можливий тільки у разі підвищення температури електронів. Інерційність процесів розігрівання визначається часом релаксації енергії, тому другий доданок містить ще й τ_E . Для процесів,

пов'язаних з перерозподілом електронів по долинах, характерна інерційність як процесів розігрівання, так і міждолинних переходів. Тому в третій доданок входять часи τ_E і τ_M (3.48). Важливо зазначити, що він пропорційний енергетичній відстані Δ_{ij} між долинами і визначає негативні значення електропровідності.

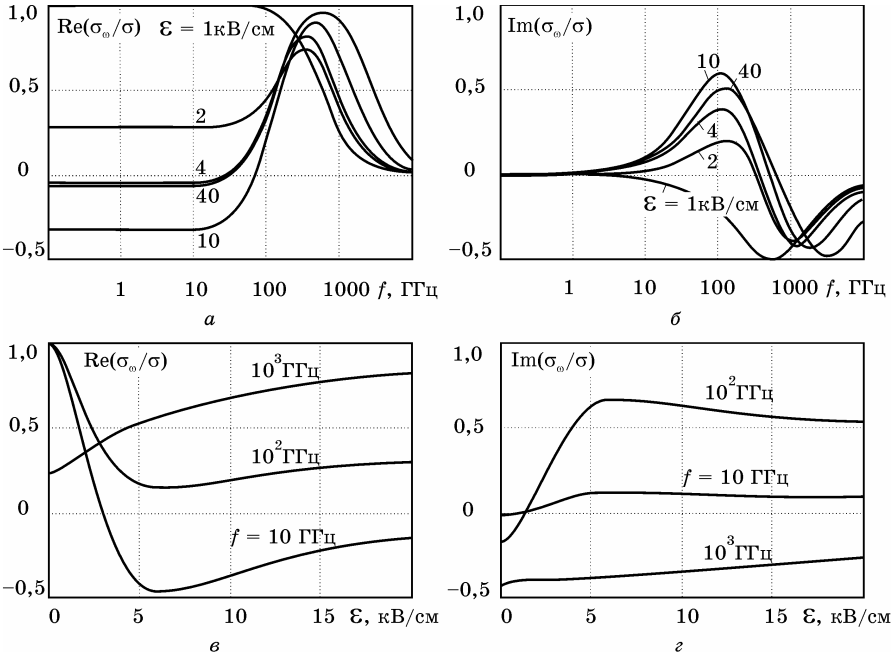


Рис. 3.12. Частотні (верхній ряд) й польові (нижній) залежності дійсної (а, е) та уявної (б, з) частин динамічної питомої електропровідності, нормованої на її статичне значення

Із цих трьох часів найбільше значення (близько 1 пс) має τ_E , тому верхня частотна межа НДП залежить насамперед від інерційності процесів розігрівання електронів і становить десятки гігагерц. У слабкому полі (верхня крива на рис. 3.12, а) процеси розігрівання і міждолинних переходів несуттєві, тому спад провідності визначається значенням τ_D і відбувається на частоті близько 100 ГГц.

.....

Реактивна провідність виявляється на нижчих частотах (близько 10 ГГц), що пояснюється особливостями множників $(1 + i\omega\tau)^{-1} = (1 - i\omega\tau)/(1 + \omega^2\tau^2)$: реактивна провідність, на відміну від активної, пропорційна першому степеню $\omega\tau$. У слабкому полі вона має, як зазначалося в п. 1.2.4, індуктивний характер, але в області НДП змінює знак разом з активною складовою і стає ємнісною. Далі, на дуже високих частотах за час періоду поля не встигають відбуватися міжзонні переходи (високочастотна складова заселеності долин b_{\downarrow} зменшується) і реактивна провідність знову стає індуктивною. При цьому, оскільки більшість електронів знаходиться у верхніх долинах, значення провідності визначається параметрами цих долин.

Урахування струму зміщення $j_{\text{зм}} = i\omega\varepsilon\varepsilon_0\mathcal{E}$ зумовлює появу в комплексній провідності σ_{ω} тільки уявної складової $i\omega\varepsilon\varepsilon_0$, а для нормованої величини σ_{ω}/σ її внесок дорівнює $\Delta\sigma_{\omega}/\sigma = i\omega\varepsilon\varepsilon_0/en\mu = i\omega\tau_{\text{мкс}}$. Тут $\tau_{\text{мкс}} = \varepsilon\varepsilon_0/\sigma$ – максвеллівський час релаксації, який і визначає інерційність процесів, пов'язаних зі струмами зміщення. Його значення може змінюватися в широких межах залежно від концентрації домішки, але для типових значень N_d порядку 10^{23} м^{-3} цей час у сильних електричних полях становить $10^{-1} \dots 10^{-2}$ пс.

Відповідно, вплив струму зміщення помітний лише на частотах у сотні гігагерц. Але вже при концентраціях домішки 10^{21} м^{-3} максвеллівський час релаксації стає більшим, ніж час релаксації енергії, і інерційність провідності визначатиметься переважно струмами зміщення.

Важливим результатом проведеного аналізу є можливість розрахунку граничної частоти існування НДП. Його можна провести, знехтувавши інерційністю міждолинних переходів ($\omega\tau_m \ll 1$), запізнюванням зіткнень ($\omega\tau_p \ll 1$) і вважаючи, що в режимі НДП швидкість електронів досягає насичення ($v_{\text{ог}} = v_{\text{нг}}$). Тоді формула (3.53) спрощується і набуває вигляду:

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma} \approx 1 - \frac{1 - i\omega\tau_{E0}}{1 + \omega^2\tau_{E0}^2} \left(1 + b_{i0}b_{j0} \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right). \quad (3.54)$$

Звідси з умови $\text{Re } \sigma_\omega = 0$, яка і відповідає граничній ситуації, легко одержати

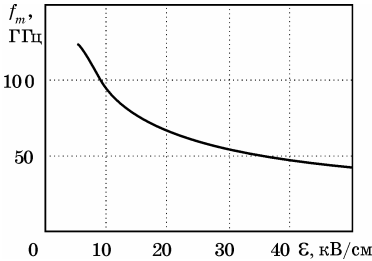


Рис. 3.13. Залежність максимальної частоти існування НДП в арсеніді галію від напруженості електричного поля

$$\omega_m \tau_{E0} = \sqrt{b_{i0} b_{j0} \Delta_{ji} / k_B T_e} . \quad (3.55)$$

При напруженості поля 2...10 кВ/см, коли заселеності верхньої і нижньої долини однакові й значення НДП максимальне, останній вираз спрощується і гранична частота

$$f_m = \frac{1}{4\pi\tau_{E0}} \sqrt{\frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e}} . \quad (3.56)$$

Як видно з рис. 3.13, гранична частота, яка визначається здебільшого часом релаксації енергії, має значення порядку десятків гігагерц, зменшуючись із зростанням напруженості електричного поля.

3.1.4. «Сплеск» дрейфової швидкості

Дрейфові процеси виявляють цікаві особливості в імпульсному електричному полі. У разі різкого збільшення напруженості поля значення швидкості дрейфу може в кілька разів перевищувати стаціонарне. Це явище відоме як «сплеск» (overshoot) дрейфової швидкості. Характерними є результати чисельного експерименту, у якому напруженість поля в GaAs стрибком змінюється в момент часу t_0^+ від значення $\mathcal{E}_1 = 2$ кВ/см до $\mathcal{E}_2 = 40$ кВ/см. Якщо слідувати прикладу з п. 2.3.2, то розв'язком (1.61) у цьому випадку має бути функція, подібна до (2.44), але з початковою умовою $v(t_0^+) = \mu_1 \mathcal{E}_1$:

$$v(t) = v(t_0^+) + [\mu_2 \mathcal{E}_2 - v(t_0^+)] \{1 - \exp[-(t - t_0^+)/\tau_p]\} . \quad (3.57)$$

Оскільки наведеним значенням напруженості електричного поля за статичною поле-швидкісною характеристикою (див. рис. 3.10) відповідають приблизно однакові значення швидкості дрейфу (близько $1 \cdot 10^5$ м/с), то перехідного процесу спостерігатися не повинно. Однак чисельне інтегрування повної системи рівнянь збереження імпульсів, енергій і концентрацій у Г-, L- і X-долинах з розрахунком часів релаксацій на кожному кроці інтегрування дає результати, наведені на рис. 3.14. Найяскравіший з них — це короткочасне збільшення («сплеск») швидкості до значень, що в 6...7 разів перевищують її стаціонарне значення.

Це явище пов'язане з інерційністю процесів розсіювання та із залежністю часів релаксації від напруженості поля. При початковому значенні напруженості 2 кВ/см (яке ще можна вважати слабким) електрони розігріваються до температури ≈ 700 К, якій відповідають часи релаксації імпульсу $\approx 0,2$ пс й енергії ≈ 1 пс, причому практично всі електрони займають стани Г-долини. Із увімкненням поля з напруженістю 40 кВ/см параметри руху якийсь час зберігаються попередніми, і наростання швидкості можна описати виразом (3.57), але з часом релаксації імпульсу 0,2 пс.

На початковій ділянці прискорення визначають як для вакууму відношенням $e\mathcal{E}_2/m^*$, а швидкість зростає за законом $v(t) = v(t_0^+) + (e/m^*)\mathcal{E}_2(t-t_0^+)$, і за час $\tau_{p1} = 0,2$ пс вона досягла б значення $\mu_1\mathcal{E}_2 \approx 20 \cdot 10^5$ м/с. Тобто в процесі наростання швидкість прагне до значення, що визначається високою рухливістю в слабкому полі \mathcal{E}_1 і великою напруженістю \mathcal{E}_2 .

Однак цього значення швидкість досягти не встигає, тому що одночасно із зростанням швидкості відбувається подальше розігрівання електронного газу з переважанням майже пружного акустичного й частково полярного оптичного розсіювання. Інерційність такого процесу визначається не стільки процесами релаксації енергії, як цього можна було б очікувати з огляду на (2.46), скільки інтенсивною хаотизацією спрямованого руху й розігріванням електронів майже без релаксації енергії, що формально відображається в переважанні третього доданка в рівнянні (3.5), оскільки $\tau_{E1} > \tau_{p1}$.

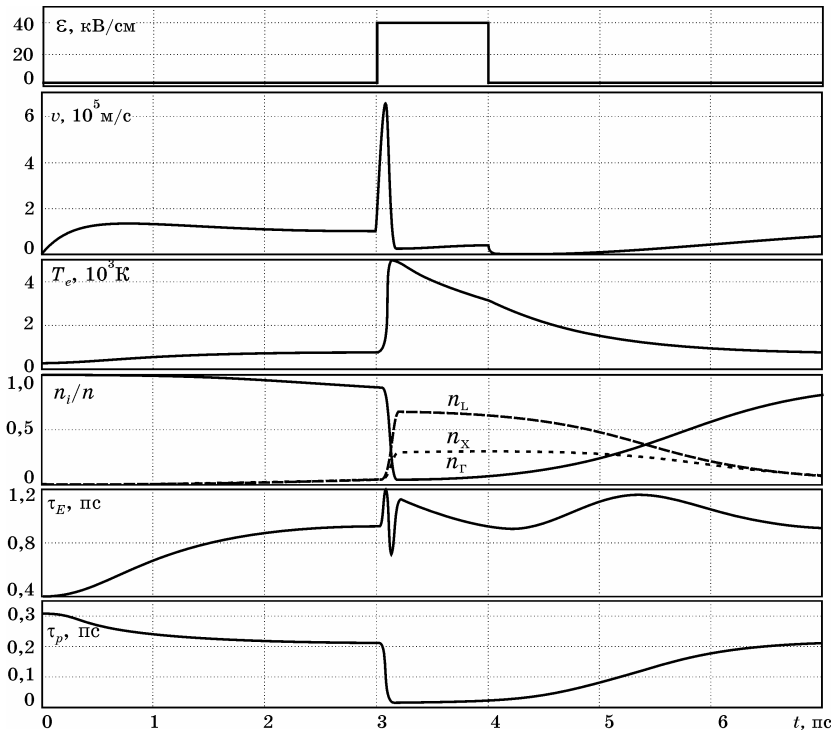


Рис. 3.14. Динамічні (часові) залежності з увімкненням імпульсу електричного поля від 2 до 40 кВ/см для (згори донизу): середньої швидкості дрейфу, електронної температури, заселеності долин, усереднених по долинах часів релаксації енергії та імпульсу. Слід звернути увагу на екстремальні значення швидкості дрейфу з огляду на те, що при напруженостях електричного поля 2 і 40 кВ/см її статичні значення приблизно однакові й дорівнюють $1 \cdot 10^5$ м/с

Така ситуація приводить до «сплеску» й електронної температури, яка на цьому етапі досягає ≈ 5000 К, що майже вдвічі перевищує її стаціонарне значення. Але вже при $T_e \approx 2000$ К включаються міждолинні механізми розсіювання і відбувається швидкий перерозподіл електронів по долинах, зростання τ_E до $\approx 1,4$ пс і зменшення τ_p до значень $\approx 0,02$ пс. Така зміна τ_p викликає швидке зменшення швидкості дрейфу, причому після різкого спаду швидкість може падати нижче стаціонарного значення для $\mathcal{E}_2 = 40$ кВ/см,

а після закінчення імпульсу поля вона може бути навіть негативною. Це явище, відоме як *негативний «сплеск»* (undershoot), пов'язано з різними часами релаксації електронів, які рухаються вздовж поля або назустріч йому. Аналіз такої поведінки електронів не можна провести на основі релаксаційних рівнянь, що використовують усереднені часи релаксації, а лише за допомогою методу Монте-Карло.

Наведене пояснення підтверджують також результати чисельного моделювання перехідних процесів (рис. 3.15) для різних амплітуд імпульсу електричного поля. Із збільшенням напруженості поля, природно, зростає максимальне значення дрейфової швидкості (рис. 3.15, а). Одночасно з цим спостерігається і «сплеск» електронної температури (рис. 3.15, б), який спричиняє зменшення часу релаксації імпульсу із збільшенням напруженості поля і відповідно скорочує тривалість «сплеску» швидкості.

Аналогічні процеси відбуваються і в статичному, але просторово неоднорідному електричному полі. Це легко зрозуміти, враховуючи, що в загальному випадку рівняння збереження містять повну похідну за часом від функцій координат і часу: $d/dt = \partial/\partial t + \bar{v}\partial/\partial \bar{r}$. У змінному в часі, але однорідному в просторі полі $\partial/\partial \bar{r} = 0$ й $d/dt = \partial/\partial t$, а в статичному, але просторово змінному полі $d/dt = \bar{v}\partial/\partial \bar{r}$. Тому рівняння і, відповідно, їх розв'язки матимуть подібний вигляд, якщо замінити $x = \int_{t_0}^t v(t') dt'$.

Проілюструвати це можна рис. 3.16, на якому подано просторову залежність швидкості електронів, що дрей-

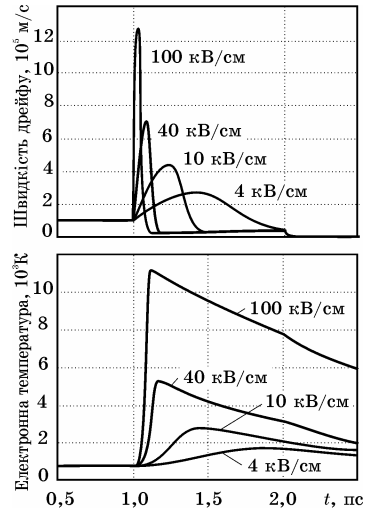


Рис. 3.15. Динамічні залежності дрейфової швидкості та електронної температури для різних значень амплітуди напруженості поля. Тривалість імпульсу поля 1 пс

.....

фували в статичному полі з напруженістю $\mathcal{E}_1 = 2$ кВ/см зі швидкістю $v_0 = \mu_1 \mathcal{E}_1$ і влетіли в поле $\mathcal{E}_2 = 40$ кВ/см. Пунктирною лінією на рис. 3.16 показано залежність $v(x) = \sqrt{v_0^2 + 2(e/m^*)\mathcal{E}_2 x}$, що характеризує рух «вільного» (у наближенні ефективної маси) електрона в однорідному полі з початковою швидкістю v_0 без зіткнень ($\tau_p = \infty$). Штрихова лінія відповідає функції

$$\frac{x}{\tau_{p1}} = v_{ст} \ln \left| \frac{v_{ст} - v_0}{v_{ст} - v(x)} \right| + v_0 - v(x), \quad (3.58)$$

що є розв'язком рівняння балансу імпульсу для $\tau_p = \tau_{p1} = \text{const}$. У цьому виразі час релаксації імпульсу відповідає слабкому полю, а $v_{ст} = \mu_1 \mathcal{E}_2$ – швидкість дрейфу в сталому режимі в полі з напруженістю 40 кВ/см, але з рухливістю μ_1 , такою самою як і перед вльотом електрона в сильне поле.

Із графіків видно, що після вльоту електрона в простір сильного поля спостерігається так званий *балістичний рух*, тобто рух без розсіювання, подібний до руху у вакуумі. Він триває близько 0,1 пс, за цей час електрон встигає пролетіти відстань у декілька сотих мкм (порядку довжини вільного пробігу) і прискоритися до $\sim 7 \cdot 10^5$ м/с. Після цього, як і в динамічному випадку, у результаті зіткнень,

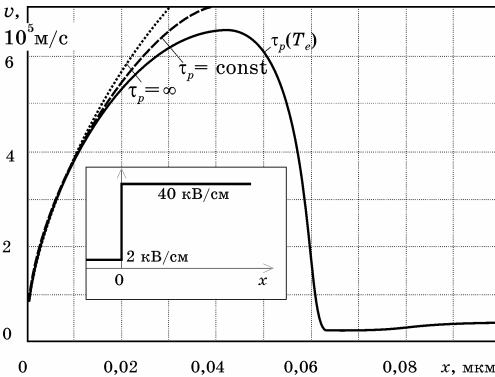


Рис. 3.16. Просторова зміна швидкості електронів, що дрейфували в полі 2 кВ/см і влетіли в поле 40 кВ/см у точці $x = 0$. Пунктирна лінія відповідає балістичному руху без зіткнень, штрихова – руху з тими самими параметрами, що й у слабкому полі

.....
 що починаються, підвищується електронна температура, що супроводжується переходами електронів у верхні долини й зменшенням часу релаксації майже на порядок. Потім швидкість релаксує до значення, що визначається низьким значенням рухливості в сильному електричному полі.

Ефект «сплеску» може виявлятися і в тому випадку, коли напруженість поля змінюється в просторі не стрибкоподібно, а відносно плавно. Він помітний на відстанях порядку 0,1 мкм, тому у субмікронних приладах середню швидкість прольоту можна отримати істотно вищою за стаціонарну. Це наочно видно з рис. 1.7 та 1.8, де наведено розподіли швидкості вздовж каналу польового транзистора з довжиною затвору 0,5 мкм. Крім того, цей ефект можна використовувати для одержання надкоротких імпульсів.

3.1.5. Ефект Ганна

Ефект Ганна, один з ефектів сильного поля, виявляється в протіканні в однорідному зразку пульсуючого струму при постійній напрузі живлення. Ефект спостерігається в напівпровідниках, які подібно до арсеніду галію мають багатодолинний характер зонної структури. Нагадаємо, що в ньому на дисперсійній кривій [5], що відповідає електронним станам коло дна зони провідності, є нижня Γ -долина, розташована в центрі зони Бріллюена, що характеризується великою кривизною й, отже, малою ефективною масою електронів: $m^* \approx 0,063m$. Стани найближчої верхньої L -долини, розташованої на 0,33 еВ вище дна зони провідності, відповідають майже на порядок більшій ефективній масі. Обернено пропорційно ефективній масі змінюється рухливість електронів із переходом їх з нижньої долини до верхньої. Характерною є істотно більша густина станів у верхній долині, викликана значною відмінністю ефективних мас. При звичайних температурах, коли $kT < 0,3$ еВ, і в слабких електричних полях електрони заповнюють практично тільки стани нижньої долини й, маючи високу рухливість, забезпечують високу питому електропровідність і різке зростання вольт-амперної характеристики (початкова ділянка кривої на рис. 3.17, а).

У сильному електричному полі при напруженості вище критичної (для арсеніду галію $\mathcal{E}_{\text{кр}} \approx 4$ кВ/см) спостерігається розігрівання електронного газу, що викликає перехід електронів у верхню долину. У результаті на вольт-амперній характеристиці, що за формою повторює полевидкісну характеристику (див. рис. 3.10), спостерігається спадна ділянка, що відповідає НДП напівпровідника. Такий зразок, що має негативний динамічний опір до змінного струму, будучи включеним у коливальний контур, компенсує активні втрати в ньому і визначає тим самим можливість існування незгасаючих коливань. Генерування коливань струму в однорідному зразку GaAs при прикладанні до нього постійної напруги вперше спостерігалось Ганном, на ім'я якого й названо цей ефект.

Виникнення коливань струму в напівпровіднику викликано *нестійкістю*, зумовленою наявністю НДП. Ця нестійкість виникає, коли до зразка прикладають напругу, достатню для створення критичного поля, що відповідає точці 1 на рис. 3.17, а.

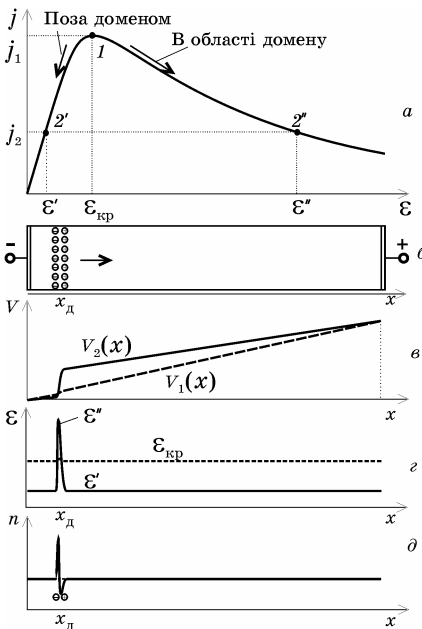


Рис. 3.17. До пояснення процесу струмової нестійкості й формування електричного домену в ефекті Ганна. Штрихові лінії відповідають початку нестійкості (точка 1 на вольт-амперній характеристиці), суцільні – утворенню домену (точки 2' і 2'')

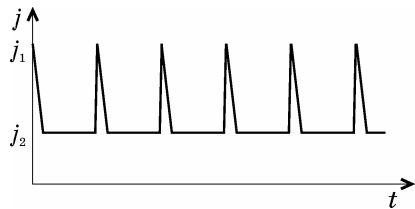


Рис. 3.18. Часова діаграма зміни струму в ефекті Ганна

.....

Значення струму j_1 нестійке, тому що за рахунок неминуче існуючої неоднорідності зразка в деякій локальній області з підвищеним опором (точка x_d на рис. 3.17, б) напруженість поля може дещо перевищувати значення $\mathcal{E}_{\text{кр}}$. Саме в цій точці починається процес зародження домену, викликаний підвищеним розігріванням електронів, що приводить до міждолинних переходів, зменшення їхньої рухливості η , відповідно, до деякого відставання гарячих електронів від основної їх маси в дрейфовому русі.

Розходження в дрейфовій швидкості електронів приводить до перерозподілу просторового заряду (рис. 3.17, д) і появи внутрішнього локального електричного поля, що збігається за напрямком із зовнішнім полем і ще більше посилює розігрівання електронного газу. Цей процес нестійкий і триватиме лавиноподібно доти, доки напруженість поля не досягне значення \mathcal{E}'' (рис. 3.17, з), за якого більшість електронів перейде у верхню долину. Точка 2'' відповідає стану стійкої рівноваги η визначається перетином вольт-амперної характеристики η навантажувальної прямої. Оскільки різниця потенціалів на зразку залишається постійною (рис. 3.17, в), то збільшення поля в локальній області приводить до його зменшення в іншій частині зразка до значення \mathcal{E}' , що відповідає струму j_2 .

У результаті описаного процесу відбувається формування *електричного домену*, тобто області просторового заряду, утвореного гарячими електронами, з підвищеною напруженістю електричного поля. Зазвичай домен не залишається нерухомим, а переміщується вздовж кристала із швидкістю, рівною середній швидкості дрейфу електронів. Досягши анода, домен руйнується, при цьому напруженість поля відновлюється рівною $\mathcal{E}_{\text{кр}}$ і процес формування домену починається спочатку. Повторюючись періодично, цей процес викликає коливання густини струму (рис. 3.18) у межах між значеннями j_1 та j_2 .

Інерційність процесу формування домену визначається здебільшого часом релаксації енергії та максвеллівським часом релаксації просторового заряду і становить пікосекунди. Тому у відносно довгих зразках період коливань визначається переважно часом переміщення домену від місця формування до анода. Оскільки область катодного

.....
 контакту дуже неоднорідна, то домен зазвичай формується на катоді або в спеціально сформованій області біля катода. Якщо, наприклад, довжина зразка – 100 мкм, а середня швидкість дрейфу – 10^5 м/с, то час його руху до анода становить 10^{-9} с, а коливання струму відбуваються із частотою 10^9 Гц. З огляду на простоту конструкції і той факт, що для створення поля із критичною напруженістю 4 кВ/см потрібна анодна напруга лише в 40 В, можна зрозуміти, чому діоди з ефектом Ганна набули значного поширення як генератори надвисокочастотних коливань.

3.2. ПОЛЬОВА ГЕНЕРАЦІЯ

Польовою генерацією називають процес утворення рухливих носіїв (електронів і дірок) у речовині або вільних зарядів (електронів й іонів) у вакуумі або газі під дією сильного електричного поля. Тут розглянемо такі ефекти сильного поля, за яких воно впливає на кількість носіїв.

3.2.1. Ударна іонізація

Ударна іонізація – це один з видів розсіювання, що приводить до утворення нових рухливих носіїв. Електричне поле, викликаючи спрямований потік зарядів, збільшує їхню кінетичну енергію. У сильному електричному полі частки, наприклад електрони, можуть нагромадити енергію, достатню для того, щоб при зіткненні з нейтральними атомами (кристалічною решіткою) акт розсіювання завершився утворенням нових носіїв. Електрони, що утворюються при цьому, також прискорюються електричним полем і можуть, у свою чергу, породжувати нові заряджені частки. Такий процес розмноження носіїв називають *лавинним*. Процеси лавинного розмноження носіїв заряду відбуваються у плазмі твердого тіла або газоподібного середовища.

Найпростіший аналіз процесу лавинного розмноження можна провести в такий спосіб. Виділимо в середовищі шар завтовшки dx (рис. 3.19). Нехай через одиницю поверхні в цей шар надходить за одиницю часу $n(x)$ електронів, а виходить на dn більше.

Природно вважати, що це збільшення пропорційне кількості електронів, що надходять, і товщині шару

$$dn = \alpha n(x) dx. \quad (3.59)$$

Фізичний зміст коефіцієнта пропорційності α , називаного *коефіцієнтом іонізації*, видно з (3.59):

$$\alpha = dn/ndx, \quad (3.60)$$

тобто він дорівнює відносному (у розрахунку на один електрон) збільшенню кількості електронів на одиниці шляху. Розв'язком рівняння (3.59) є функція

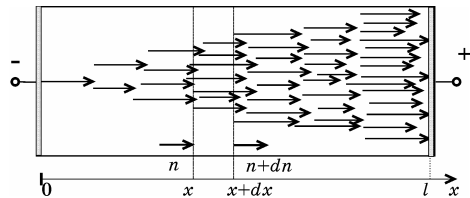


Рис. 3.19. Умовне зображення процесу лавинного розмноження електронів у результаті ударної іонізації в сильному електричному полі

$$n(x) = n(0) e^{\alpha x}, \quad (3.61)$$

яка показує, що електронний струм

$$j_n(x) = en(x) = j_n(0) e^{\alpha x}, \quad (3.62)$$

експоненціально наростає від катода до анода й кожному електрону, який вийшов з катода, відповідає в середньому $e^{\alpha l}$ електронів, що надходять на анод. Цю величину, рівну відношенню струму в анодному колі до струму, стимульованому зовнішніми джерелами,

$$M = j_n(l)/j_n(0) = e^{\alpha l}, \quad (3.63)$$

називають *коефіцієнтом множення*. Гаданого порушення закону сталості повного струму тут не відбувається, тому

.....
 що в цій моделі не враховано струм, створюваний позитивними зарядами. Крім того, ці заряди, у свою чергу, рухаючись до катода, також можуть викликати іонізацію й зустрічний лавинний процес.

У напівпровідниках лавинні процеси створюють і електрони, і дірки. Припустимо, що з боку катода в об'єм напівпровідника вводяться (інжектуються) електрони. Потрапляючи в зону провідності, вони прискорюються електричним полем. Поки їхня кінетична енергія (відстань від дна зони провідності до рівня їхньої повної енергії, зображеного стрілками на енергетичній діаграмі рис. 3.20, *a*) залишається меншою за ширину забороненої зони, зіткнення електронів з решіткою мають майже пружний характер. Лише незначна частина їхньої енергії витрачається на збудження коливань решітки (фононів). Але коли енергія електрона досягає значень, більших за ширину забороненої зони, результатом зіткнення може бути порушення валентного зв'язку, тобто перехід електрона з валентної зони в зону провідності. Триваючи, такий процес приводить до утворення електронної лавини.

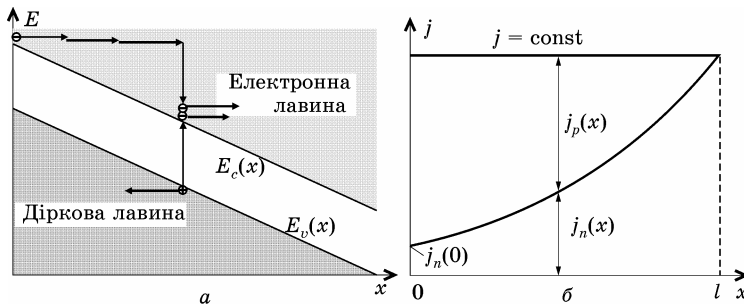


Рис. 3.20. Зміна енергії під час руху електронів у сильному електричному полі й у результаті зіткнень (*a*). При ударній іонізації утворюється електронно-діркова пара. Збільшення електронного й діркового струмів відбувається в різних напрямках (*б*), але так, що повний струм залишається постійним

Генеровані у валентній зоні дірки прискорюються електричним полем і збуджують діркову лавину, що розвивається в напрямку від анода до катода. Зустрічні потоки електронів і дірок створюють повний струм у колі, який у

.....
 кожній точці буде однаковим й, природно, більшим за струм інжекції (рис. 3.20, б).

Утворення нової електронно-діркової пари можливе, якщо енергія електрона досягає деякого мінімального значення

$$E_{\min} = [1 + m^*/(m^* + m_v^*)]\Delta E, \quad (3.64)$$

яке називають *порогом іонізації* E_i . Це співвідношення легко випливає із законів збереження енергії й імпульсу первинного електрона і нової електронно-діркової пари. Залежно від співвідношення ефективних мас електронів і дірок $E_i = (1...2)\Delta E$.

Для створення найпростішої моделі лавинного процесу вважатимемо, що іонізувальна здатність дірок така сама, як і в електронів, тобто на одиниці шляху вони також утворюють α нових електронно-діркових пар. Припустимо, що в якій-небудь точці утворилася пара рухливих носіїв. Рухаючись під дією електричного поля в різні сторони, електрон і дірка пройдуть шлях, у сумі рівний міжелектродній відстані, а в результаті зіткнень утворять у середньому αl нових електронно-діркових пар. Такі «вторинні» частки поведуться подібно «первинним», тобто кожна пара утворює, як і раніше, αl нових або всього $(\alpha l)^2$ «третинних» пар. Ті, у свою чергу, розмножуються в αl разів і т. д. Повну кількість пар, утворених в решті-решт єдиною первісною парою, знаходять як суму ряду

$$1 + \alpha l + (\alpha l)^2 + (\alpha l)^3 + \dots = 1/(1 - \alpha l) = M. \quad (3.65)$$

Отримана величина i є вже згадуваним коефіцієнтом множення. Коефіцієнт іонізації є сильною функцією напруженості електричного поля. Характер цієї залежності можна оцінити з таких простих міркувань. У сильному електричному полі, де електрони дрейфують зі швидкістю насичення v_n , у стаціонарному стані вони мають енергію $E \approx e\mathcal{E}v_n\tau_E$. На довжині релаксації енергії $l = v_n\tau_E \gg l_p$ вона практично повністю переходить у теплову, тому $kT_e \approx \approx 2e\mathcal{E}l/3$. Імовірність того, що енергія якого-небудь електрона перевищить поріг іонізації визначається больцманів-

.....
 ським множником $\exp(-E_i/kT_e) = \exp(-3E_i/2e\mathcal{E}l)$, характерним і для коефіцієнта іонізації. Тому для залежності $\alpha(\mathcal{E})$ часто користуються функцією

$$\alpha(\mathcal{E}) = \alpha_0/\exp(\mathcal{E}_0/\mathcal{E})^m, \tag{3.66}$$

де, як встановлено експериментально, $m = 1$ для германію й силіцію і $m = 2$ для деяких сполук типу A_3B_5 , а константи α_0 й \mathcal{E}_0 залежать від напівпровідника й типу носіїв заряду. За порядком величин $\alpha_0 \approx (10^5 \dots 10^6) \text{ см}^{-1}$, а $\mathcal{E}_0 \approx 10^3 \text{ кВ/см}$. Останні вирази визначають вид вольт-амперної характеристики лавинного процесу:

$$j(\mathcal{E}) = j_0 M = j_0/[1 - \alpha(\mathcal{E})l]. \tag{3.67}$$

З (3.67) можна зробити висновок, що коефіцієнт множення і, відповідно, повний струм у колі зростають із зростанням напруженості поля. За деякої напруженості поля, називаною критичною, $\alpha l \rightarrow 1$ і можливе нескінченне наростання струму через діодний проміжок (рис. 3.21). Таке явище називають *пробоєм*. Насправді в режимі пробую струм переважно обмежується опором зовнішнього кола.

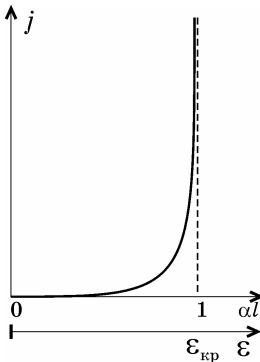


Рис. 3.21. Зростання струму в напівпровіднику зі збільшенням електричного поля викликано ростом інтенсивності лавинних процесів. За певного значення напруженості поля коефіцієнт множення зростає нескінченно й настає лавинний пробій

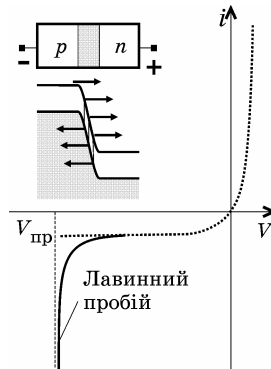


Рис. 3.22. На вольт-амперній характеристиці електронно-діркового переходу (штрихова лінія) лавинні процеси викликають різке зростання зворотного струму (суцільна лінія)

.....
 Якщо електричне поле неоднорідне уздовж зразка, що зазвичай спостерігається за більш-менш значної інтенсивності лавинних процесів, то замість αl треба підставляти $\int_0^l \alpha dx$ і

$$M = 1 / (1 - \int_0^l \alpha dx). \quad (3.68)$$

Якщо дірковий коефіцієнт іонізації $\beta = dp/pdx$ відрізняється від електронного, то умова пробою матиме такий вигляд:

$$\int_0^l \alpha \exp[-\int_0^x (\alpha - \beta) dx'] dx = 1. \quad (3.69)$$

Лавинний пробій можна спостерігати в електронно-дірковому переході (рис. 3.22). При зворотному зміщенні переходу навіть при не дуже великих напругах у тонкій збідненій області можна створити сильне електричне поле, що викликає лавинні процеси. Утворення електронно-діркових пар у збідненій області еквівалентне збільшенню струму неосновних носіїв, що приводить до збільшення зворотного струму при напрузі, близькій до пробивної. Якщо вжити заходів проти необоротних процесів руйнування, то цей режим можна використовувати для стабілізації напруги, оскільки у великому діапазоні зміни струму через перехід напруга на ньому змінюється незначно.

Процеси лавинного розмноження використовують також для створення так званих лавинопролітних діодів (ЛПД), які можуть працювати як генератори на частотах порядку сотень гігагерц, а також у різних діодних і транзисторних структурах, де бажане збільшення робочого струму.

3.2.2. Електростатична іонізація

Ефект *електростатичної іонізації* в напівпровідниках (ефект Зінера) у зовнішній прояві дуже схожий на процес лавинного розмноження: різке зростання струму через напівпровідник зі збільшенням прикладеної напруги. Однак

.....
 природа цього явища зовсім інша, і пояснити його можна тільки з позицій квантової механіки.

В електричному полі спостерігається викривлення енергетичних зон. В однорідному полі це виглядає (рис. 3.23) як нахил зон під кутом, тангенс якого дорівнює силі $F = e\mathcal{E}$. При цьому певному значенню енергії електрона можуть відповідати стани й у валентній зоні, і в зоні провідності. У полі з напруженістю порядку 10^9 В/м відстань

$$\Delta x = \Delta E / e\mathcal{E} \quad (3.70)$$

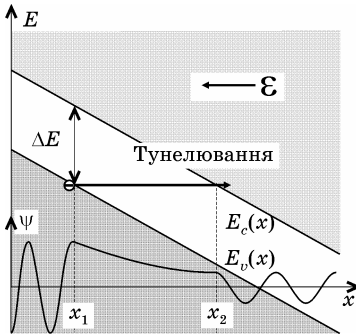


Рис. 3.23. Ймовірність тунельного переходу електронів з валентної зони в зону провідності пов'язана з виникненням у зонах під дією поля станів, що відповідають одній і тій самій енергії

між точками x_1 і x_2 , що відповідають межах дозволених зон, становить близько 1 \AA , що дозволяє електронам валентної зони перейти в зону провідності за рахунок *тунельного ефекту*, тобто без енергетичного збудження. Ймовірність тунелювання зростає зі зменшенням Δx , тобто зі збільшенням напруженості електричного поля, і визначають її за допомогою відомого з квантової механіки виразу для коефіцієнта прозорості трикутного потенціального бар'єра заввишки ΔE :

$$D = D_0 \exp[-4\sqrt{2m\Delta E} / \hbar^2 \Delta x / 3]. \quad (3.71)$$

Збільшення напруженості електричного поля зменшує товщину бар'єра і підвищує ймовірність тунелювання електронів у зону провідності. У результаті пропорційно ймовірності зростає кількість електронно-діркових пар, що беруть участь у провідності. Це дозволяє вольт-амперну характеристику зразка напівпровідника при електростатичній іонізації описати виразом

$$j = j_0 \exp[-4\sqrt{2m^* / \hbar^2 \Delta E^{3/2} / 3e\mathcal{E}}]. \quad (3.72)$$

За зовнішнім виглядом вольт-амперна характеристика нагадує рис. 3.21. Однак вона не має певного асимптотичного значення $E_{кр}$, як у лавинному пробіі. Тим не менше швидкість зростання струму, характерна для експоненціальної функції (3.72), настільки велика, що це явище також називають *електростатичним (тунельним) пробієм*.

Його також можна спостерігати при зворотному зміщенні електронно-діркового переходу (рис. 3.24), коли в тонкій збідненій області виникають поля з напруженістю $10^8 \dots 10^9$ В/м.

Часто електростатичний пробій ма-скується лавинним, який може відбуватися у слабших полях. Тому електростатичний пробій у чистому вигляді можна спостерігати тільки на дуже тонких переходах, де лавинний процес не встигає розвиватися. Крім того, ідентифікувати той чи інший вид пробію можна за формою вольт-амперної характеристики через зазначену відмінність.

Електростатичний пробій в електронно-діркового переході, як і лавинний, використовують для створення стабілізаторів напруги.

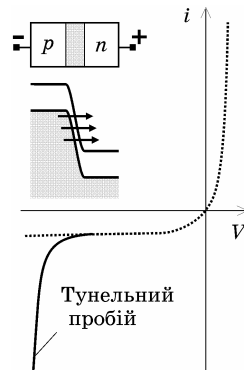


Рис. 3.24. Вольт-амперна характеристика електронно-діркового переходу (штрихова лінія) може мати ділянку різкого зростання зворотного струму (суцільна лінія), викликану тунелюванням електронів.

3.2.3. Іонізація в домішкових напівпровідниках

Явище електростатичної іонізації можна спостерігати і в домішкових напівпровідниках. Сферично-симетричне поле донорного атома, яке втримує «зайвий» електрон (рис. 3.25, а), взаємодіє із зовнішнім електричним полем так, що

.....
 праворуч від атома сила, яка утримує електрон, зменшується. На енергетичній діаграмі (рис. 3.25, в) це зображено як зміна форми потенціального бар'єра в околі домішкового атома. У досить сильних полях (на 2 – 3 порядки нижчих, ніж для власних напівпровідників) потенціальний бар'єр стає настільки вузьким, що з'являється ймовірність тунелювання електрона з донорного рівня в зону провідності.

Однак цей ефект можна спостерігати тільки при дуже низьких температурах, коли ще не відбувається іонізація домішки за рахунок теплового збудження. Уже при температурах в 20...30 К для мілких домішкових рівнів (у германії, силіції) стає помітним теплове збудження електронів з домішкових рівнів у зону провідності. За цих умов може відбуватися *термоелектронна іонізація* (ефект Френкеля), тобто в області іонізації домішки концентрація електронів у зоні провідності зростає за наявності електричного поля. Це пояснюється тим, що в електричному полі знижується енергія іонізації домішки й при певній температурі підвищується ймовірність її теплового збудження.

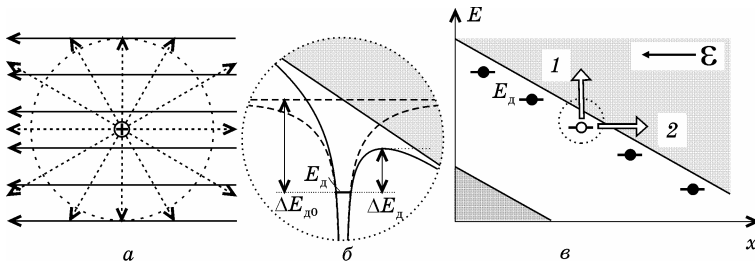


Рис. 3.25. Зовнішнє електричне поле деформує поле домішкового іона (а), зменшує енергію іонізації домішки (б) і полегшує її термічну іонізацію – 1 (в). Крім того, можливе тунелювання «зайвого» електрона домішки через деформований бар'єр – 2 (в)

Оскільки від напруженості електричного поля залежить концентрація носіїв, тобто й електропровідність, то вольт-амперна характеристика зразка відрізнятиметься від лінійної. Тому цей ефект належить до ефектів сильного поля, незважаючи на те, що по суті він є комбінованим. Роль електричного поля зводиться до зниження енергії іонізації домішки, а саме збудження відбувається за рахунок енергії теплових коливань решітки.

3.2.4. Автоелектронна емісія

Автоелектронною називають емісію електронів з речовини за наявності біля її поверхні сильного, порядку $10^8 \dots 10^9$ В/м, електричного поля, що прискорює електрони від поверхні. Інші назви цього виду емісії – холодна, електростатична і, рідше, тунельна – повніше відображають природу цього явища. Вихід електронів при автоелектронній емісії на вимагає зовнішнього збудження і може відбутися з холодних катодів за наявності електростатичного поля. Остання назва підкреслює квантовомеханічну природу цього явища й говорить про те, що причиною виходу електронів є *тунельний ефект*.

Зовнішнє електричне поле у вакуумі знижує потенціальну енергію електрона за межами твердого тіла, змінюючи її за законом $U_{\text{вн}} = -eEx$. На енергетичній діаграмі для металу (рис. 3.26) це зображено трикутним потенціальним бар'єром, трохи округленим за рахунок сил дзеркального зображення. За напруженості поля порядку $10^8 \dots 10^9$ В/м товщина бар'єра поблизу рівнів, що відповідають заповненим електронним станам, стає наскільки малою (одиночі й десятки ангстрем), що з'являється ймовірність виходу електронів із цих станів у вакуум за рахунок тунельного ефекту.

Отже, автоелектронна емісія – суто квантовий ефект, пов'язаний із хвильовими властивостями електронів, і роль електричного поля зводиться тут до формування відповідного потенціального бар'єра, а не до «виривання» електронів, як іноді вважають.

Характерною рисою автоелектронної емісії для металів є вихід електронів з енергіями, близькими до енергії Фермі. Оскільки в холодному катоді немає більш енергійних електронів, а зі зменшенням енергії прозорість бар'єра експоненціально зменшується, розкид швидкостей емітованих електронів дуже невеликий і становить одну-дві десятих електрон-вольта.

Основний закон автоелектронної емісії називається законом Фаулера – Нордгейма і виражає залежність густини

емісійного струму від напруженості електричного поля. Для металів, якщо знехтувати силами дзеркального зображення, вигляд цієї залежності за структурою подібний до закону термоелектронної емісії

$$j(\varepsilon) = B\varepsilon^2 \exp[-4\sqrt{2m/\hbar^2}\Phi^{3/2}/3e\varepsilon], \quad (3.73)$$

де B – константа, що залежить від параметрів енергетичної структури металу, а експоненціальний множник аналогічний (3.72) із заміною ΔE на роботу виходу Φ . Це природно, тому що механізм електростатичної іонізації й автоелектронної емісії однаковий.

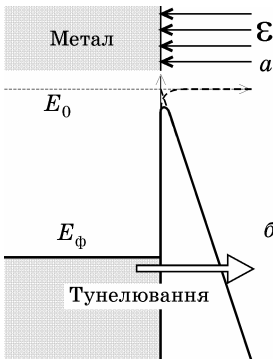


Рис. 3.26. Зміна форми потенціального бар'єра (б) біля поверхні металу під дією зовнішнього прискорювального поля (а) створює передумови для тунелювання електронів у вакуум

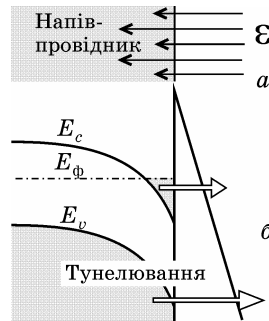


Рис. 3.27. У напівпровіднику електричне поле, проникаючи в приповерхневий шар (а), підвищує там концентрацію електронів. У результаті емісія може відбуватися як із зони провідності, так і з валентної (б)

Основні особливості автоелектронної емісії з напівпровідників пов'язані з проникненням зовнішнього електричного поля в приповерхневий шар (рис. 3.27) і відповідним заповненням електронами енергетичних зон. Оскільки концентрація електронів у зоні провідності в багато разів менша, ніж у валентній, то емісія валентних електронів може виявитися істотною, незважаючи на меншу ймовірність їх ту-

.....
нелювання через ширший бар'єр. Поряд із цим електричне поле викривляє енергетичні зони так, що рівень Фермі може опинитися в зоні провідності, і це спричинить підвищення концентрації електронного газу в приповерхневому шарі та його виродження.

Струм, що протікає через товщу катода і який при автоелектронній емісії може досягти дуже великої густини, розігріває катод за рахунок його омичного опору. При цьому в сильному електричному полі приповерхневого шару можливе розігрівання електронного газу та генерація носіїв за рахунок лавинних процесів або за рахунок електростатичної іонізації. Якщо врахувати, що зовнішні поля й поверхневі стани можуть знижувати ефективну електронну спорідненість до негативних значень, то стає зрозумілим, як складно врахувати спектр усіх цих явищ у теорії автоелектронної емісії з напівпровідників.

Автоелектронну емісію використовують для створення холодних катодів, які забезпечують малий розкид швидкостей електронів і дають можливість формувати дуже тонкі електронні потоки з малими шумами. Наявні холодні катоди мають ряд недоліків, зокрема: нестабільність струму емісії, пов'язану з впливом адсорбованих на поверхні атомів, сильним бомбардуванням катода іонами залишкових газів і зміною в процесі роботи геометрії поверхні катода, який найчастіше виготовляють у вигляді вістря, й тому він сильно розігрівається при великій густині струму. Тому інтенсивні дослідження щодо усунення зазначених недоліків тривають і досі.

4. РЕКОМБІНАЦІЯ НОСІЇВ ЗАРЯДУ

4.1. ЗАГАЛЬНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ РЕКОМБІНАЦІЇ

Рекомбінація – це процес, обернений до генерації, за якого відбувається зникнення рухливих носіїв заряду. Питання про конкретні механізми рекомбінації виникає зазвичай, коли в речовині, крім рівноважних, є надлишкові носії заряду, що з'являються за будь-якого зовнішнього впливу. Після припинення цього впливу відбувається повернення в рівноважний стан, швидкість якого визначається швидкістю рекомбінації. Одним з основних для дослідження рекомбінаційних процесів є твердження про те, що *швидкість рекомбінації* R , тобто кількість носіїв, що зникають в одиниці об'єму за одиницю часу, пропорційна добутку концентрацій часток, що беруть участь у цій рекомбінації. Для електронно-діркової рекомбінації в напівпровіднику

$$R = \alpha_r n p, \quad (4.1)$$

де α_r – коефіцієнт пропорційності, який називають *коефіцієнтом рекомбінації*, $\text{м}^3/\text{с}$.

Очевидно, що в рівноважному стані швидкості генерації G_0 і рекомбінації R_0 рівні між собою:

$$R_0 = \alpha_r n_0 p_0 = G_0,$$

а зміна надлишкової концентрації Δn за одиницю часу дорівнює перевищенню швидкості рекомбінації над швидкістю рівноважної генерації:

$$d(\Delta n)/dt = -(R - G_0) = -\alpha_r (np - n_0 p_0). \quad (4.2)$$

.....
 Аналогічний вираз можна отримати і для дірок. Оскільки нерівноважна концентрація дорівнює сумі концентрацій рівноважних і надлишкових носіїв:

$$n = n_0 + \Delta n; \quad p = p_0 + \Delta p,$$

то

$$d(\Delta n)/dt = d(\Delta p)/dt = -\alpha_r(n_0\Delta p + p_0\Delta n + \Delta n\Delta p). \quad (4.3)$$

Це рівняння дуже просто розв'язати, якщо надлишкові концентрації електронів і дірок рівні, для двох крайніх, але характерних випадків.

У випадку *низького рівня збудження*, коли надлишкова концентрація набагато менша за рівноважну концентрацію основних носіїв, але може бути більшою за концентрацію неосновних, $\Delta n = \Delta p \ll (n_0 + p_0)$ і третій доданок в (4.3) знехтувально малий. Тому

$$d(\Delta n)/dt = d(\Delta p)/dt = -\alpha_r(n_0 + p_0)\Delta n, \quad (4.4)$$

і таку рекомбінацію називають *лінійною*. Розв'язком (4.4) буде експоненціальна функція (рис. 4.1, а):

$$\Delta n(t) = \Delta n(0) \exp(-t/\tau), \quad (4.5)$$

швидкість спадання якої визначається константою

$$\tau = 1/\alpha_r (n_0 + p_0), \quad (4.6)$$

яку називають *часом життя нерівноважних носіїв заряду*.

У другому випадку, коли рівень збудження високий, $\Delta n = \Delta p \gg (n_0 + p_0)$ і основну вагу має третій доданок в (4.3):

$$d(\Delta n)/dt = d(\Delta p)/dt = -\alpha_r\Delta n^2. \quad (4.7)$$

Таку рекомбінацію, за якої швидкість спадання надлишкової концентрації пропорційна її квадрату, називають *квадратичною* й описують гіперболічною функцією (рис. 4.1, б)

$$\Delta n(t) = \Delta n(0) / [1 + \Delta n(0)\alpha_r t]. \quad (4.8)$$

Для цього процесу природної характерної константи не виникає, але часто за аналогією з лінійною рекомбінацією використовують *миттєвий час життя*

$$\tau = 1/\alpha_r \Delta n, \quad (4.9)$$

який випливає з формального порівняння (4.4) та (4.7) і залежить від значення Δn у певний момент часу.

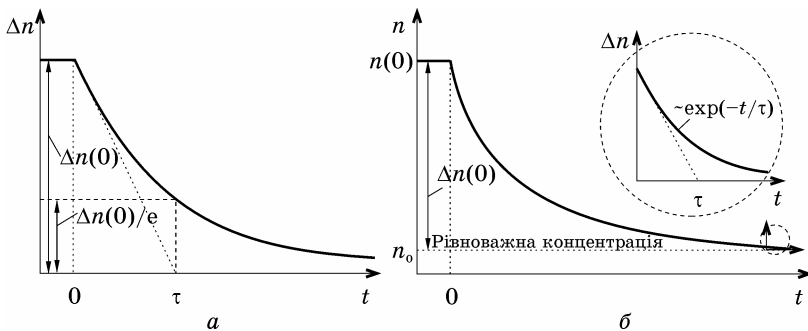


Рис. 4.1. Релаксація нерівноважних носіїв із вимкненням джерела збудження: *a* – за малої концентрації надлишкових носіїв (лінійна рекомбінація) вона спадає експоненціально; *b* – за великих рівнів надлишкових носіїв (квадратична рекомбінація) спад відбувається за гіперболічним законом, що переходить в експоненціальний із наближенням до рівноважного стану

Для газорозрядної плазми поняття надлишкових носіїв заряду зазвичай не використовують, але й у ній відбуваються процеси лінійної і квадратичної рекомбінації.

Оскільки під час рекомбінації рухливих носіїв заряду вивільнюється надлишок енергії, то основна ознака, за якою класифікують механізми рекомбінації, – це спосіб виділення цієї енергії. У зв'язку із цим розрізняють *випромінювальну* рекомбінацію, за якої відбувається вихід кванта електромагнітного випромінювання, і *безвипромінювальну*, коли вивільнювана енергія передається іншим часткам. Одна з важливих особливостей випромінювальної рекомбінації пов'язана з тим, що імпульс випромінюваного кванта знехтувально малий, тому сумарний імпульс часток, що рекомбінують, залишається без зміни.

4.2. ЕЛЕКТРОННО-ДІРКОВА РЕКОМБІНАЦІЯ У НАПІВПРОВІДНИКАХ

За видами електронних переходів на енергетичній діаграмі (рис. 4.2) рекомбінацію електронів і дірок у напівпровіднику можна поділити на два види: міжзонну рекомбінацію (переходи 1 – 3) і рекомбінацію через локальні рівні (переходи 4 – 5).

Міжзонна електронно-діркова рекомбінація означає перехід електрона із зони провідності у вільний стан валентної зони. Природно, що під час такого переходу виділяється енергія, рівна різниці початкового й кінцевого стану, а мінімальне її значення дорівнює ширині забороненої зони. Ця енергія може випромінюватися у вигляді електромагнітного кванта $h\nu \geq \Delta E$ (*випромінювальна рекомбінація*) або передаватися іншим часткам, наприклад електронам або діркам (*ударна або Оже-рекомбінація*), а також фононам кристалічної решітки (*фононна рекомбінація*).

Особливість міжзонної *випромінювальної* рекомбінації легко зрозуміти, аналізуючи (4.6). У власних напівпровідниках $n_0 = p_0 = n_i$, тому $\tau^i = 1/2\alpha_i n_i$. Як випливає з (3.55), $n_i \sim \exp(-\Delta E/2k_B T)$, а отже, із зменшенням ширини забороненої зони зменшується час життя нерівноважних носіїв заряду або збільшується ймовірність їхньої рекомбінації. У домішкових (наприклад, донорних) напівпровідниках з досить великим умістом домішки $n_0 \gg n_i \gg p_0$ і час життя нерівноважних електронів і дірок визначається концентрацією основних носіїв $\tau_n = 1/\alpha_i n_0$ й істотно менший τ_i .

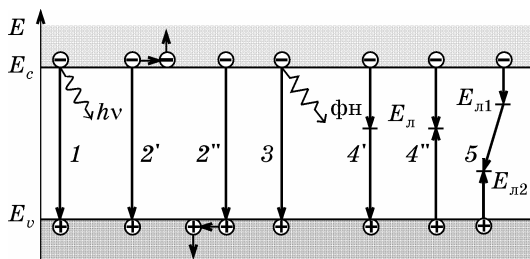


Рис. 4.2. Енергетичні переходи у разі міжзонної рекомбінації (1 – випромінювальної, 2' і 2'' – ударної, 3 – фононної) і рекомбінації через локальні рівні (4', 4'' і 5)

Друга особливість міжзонної випромінювальної рекомбінації випливає із закону збереження квазіімпульсу або пропорційного йому хвильового вектора. Оскільки імпульс випромінюваного кванта знехтувально малий, то квазіімпульс електрона під час переходу у валентну зону практично не змінюється. Такі переходи, називані прямими, найімовірніші в прямозонних напівпровідниках, коли екстремуми дисперсійних кривих відповідають центру зони Бріллюена.

Розглянуті особливості пояснюють, чому випромінювальна рекомбінація істотна лише в прямозонних напівпровідниках із шириною забороненої зони $\Delta E < 0,3 \dots 0,5$ eV, а швидкість рекомбінації зростає з температурою.

У разі *ударної* міжзонної рекомбінації (переходи $2'$ і $2''$, рис. 4.2) у кожному акті бере участь рекомбінувальна пара – електрон і дірка, а також третя частка – електрон ($2'$) або дірка ($2''$), якій передається вивільнювана енергія і яка в результаті переходить у збуджений стан. Імовірність потрійного зіткнення пропорційна концентраціям часток, що беруть участь у рекомбінації, тобто величині n^2p у донорних напівпровідниках, де третьою часткою зазвичай є електрон, і, відповідно, величині pr^2 в акцепторних напівпровідниках, тому що й тут імовірніша зустріч рекомбінувальної пари з основним носієм – діркою. Оскільки ймовірність зіткнення трьох часток у загальному випадку менша, ніж двох, то швидкість міжзонної ударної рекомбінації має бути меншою за швидкість випромінювальної, але зростання її з температурою відбувається швидше, пропорційно третій степені концентрації. Електронні переходи під час ударної рекомбінації необов'язково є прямими, тому що третя частка може прийняти практично будь-який імпульс. Ці властивості приводять до того, що в деяких напівпровідниках ударна рекомбінація може переважати над випромінювальною.

Специфічним різновидом ударної рекомбінації є *плазмова* рекомбінація, за якої енергія, що виділяється, передається всьому колективу рухливих носіїв і витрачається на утворення *плазмонів*. Цей вид рекомбінації виявляється лише за великої концентрації носіїв, наприклад, у вироджених напівпровідниках.

Під час *фононної* міжзонної рекомбінації енергія електрона, що повертається у валентну зону, передається кристалічній решітці й викликає збудження фононів. Оскільки

.....
енергія фононів ($\ll 10^{-2}$ eV) у багато разів менша, ніж ширина забороненої зони, то в кожному акті рекомбінації бере участь велика кількість фононів. Відомо, що багаточасткові ефекти малоімовірні, тому фононну рекомбінацію можна помітити лише у вузькозонних напівпровідниках.

Отже, усі описані механізми міжзонної рекомбінації мають дуже малу швидкість у напівпровідниках із широкою забороненою зоною. Але експерименти показують, що спостережуваний час життя в таких напівпровідниках у багато разів менший за розрахунковий для кожного з видів міжзонної рекомбінації. Це пояснюється тим, що в широкозонних напівпровідниках механізм рекомбінації інший: вона відбувається за участю неминуче існуючих, а іноді створюваних спеціально, різного роду дефектів кристалічної решітки. Створюючи локальні енергетичні рівні в забороненій зоні, ці дефекти, називані *центрами рекомбінації*, забезпечують можливість дво- або навіть триступінчастого переходу електрона у валентну зону (переходи 4 й 5, рис. 4.2). Переходи 4' й 4'' означають, що спочатку рекомбінувальний електрон захоплюється рекомбінаційним центром й енергетично переходить із зони провідності на локальний енергетичний рівень $E_{\text{л}}$, створюваний цим центром. Наступний етап – це перехід 4' електрона з рівня $E_{\text{л}}$ у валентну зону й рекомбінація його з однією з наявних там дірок.

Те саме, але з використанням поняття зв'язаної дірки означає перехід 4'' – дірка з валентної зони захоплюється рекомбінаційним центром, на якому й відбувається рекомбінація електронно-діркової пари. Аналогічно можна описати ступінчастий процес рекомбінації через два локальні проміжні стани $E_{\text{л1}}$ й $E_{\text{л2}}$ (перехід 5). Багатоступінчаста рекомбінація набагато імовірніша, ніж міжзонна, оскільки енергія рекомбінувального електрона виділяється в два або три етапи, а частину цієї енергії може приймати рекомбінаційний центр.

Для зменшення часу життя нерівноважних носіїв ефективні центри рекомбінації часто створюються спеціально введенням у напівпровідник домішок, які утворюють у забороненій зоні *глибокі* локальні рівні. Річ у тім, що роль домішкових центрів може бути неоднаковою залежно від положення відповідних їм рівнів у забороненій зоні. Якщо

енергетичний рівень розташований близько до межі дозволеної зони, то він відіграє роль *рівня прилипання*, тому що електрон або дірка, захоплені таким центром, легко можуть повернутися у відповідну зону в результаті теплового збудження. Типовим прикладом таких центрів є мілкі донорні (аналогічно й акцепторні) стани, які, незважаючи на їхню близькість до зони провідності й більшу ймовірність переходу в них електронів, виявляються в результаті теплового збудження практично повністю вільними навіть при температурах, істотно менших за кімнатну.

Глибокі енергетичні рівні, розташовані ближче до середини забороненої зони, служать ефективними центрами рекомбінації, оскільки ймовірність зворотного теплового збудження в зону провідності захопленого електрона в цьому випадку менша. Чим довше електрон втримується у локальному стані E_d , тим більша ймовірність його переходу у валентну зону, або, що те саме, зустрічі з діркою в стані E_v . От чому центри рекомбінації часто називають *пастками*.

Теорію рекомбінації через локальний рівень розробили Холл, Шоклі й Рід, суть її викладено в численній навчальній літературі з фізики напівпровідників. Не зупиняючись на деталях цієї теорії, наведемо лише її найважливіший практичний висновок, придатний для домішкових напівпровідників з концентрацією надлишкових носіїв $\Delta n = \Delta p$, великою порівняно з концентрацією пасток N_d : *час життя нерівноважних носіїв заряду визначається часом життя неосновних носіїв і обернено пропорційний концентрації пасток*. Для донорних напівпровідників

$$\tau \approx \tau_n = 1/\alpha_{rp}N_d, \quad (4.10a)$$

для акцепторних

$$\tau \approx \tau_p = 1/\alpha_{rn}N_d, \quad (4.10б)$$

де τ_n , τ_p – часи життя електронів і дірок щодо захоплення їх пастками; α_{rn} , α_{rp} – відповідні коефіцієнти рекомбінації (захоплення) електронів і дірок на цих пастках.

Зміст цього висновку легко зрозуміти на прикладі сильно легованого напівпровідника. У донорному напівпровіднику рівень Фермі (імовірність його заповнення електронами дорівнює 1/2) розташований близько до зони провіднос-

.....
 ті й, відповідно, вище рівня пасток E_d . Оскільки функція Фермі – Дірака змінюється в інтервалі кількох $k_B T$ поблизу E_ϕ майже від 0 до 1, то основна маса домішкових центрів буде заповнена електронами, і швидкість рекомбінації визначатиметься лише швидкістю переходу їх з рівня E_d у валентну зону. Інакше кажучи, швидкість рекомбінації залежить від швидкості переходу дірок (неосновних носіїв) з валентної зони на рівень пасток. В акцепторному напівпровіднику майже всі пастки вільні (заповнені дірками) і час життя нерівноважних носіїв складається переважно із часу, необхідного електронам зони провідності для переходу на рівні пасток, тому що подальший перехід їх у валентну зону відбувається практично миттєво через велику кількість дірок, що містяться там.

Наведене пояснення є не дуже строгим, оскільки замість рівня Фермі треба розглядати електронний і дірковий квазірівні, але зміст цього висновку теорії Хола, Шоклі й Ріда залишається незмінним: швидкість двоступінчастого процесу рекомбінації визначається швидкістю захоплення пастками неосновних носіїв, тобто швидкістю менш імовірного (через малу концентрацію останніх) процесу. Таке уявлення про рекомбінацію електронів і дірок на пастках дозволяє формально розглядати акт рекомбінації як деяке зіткнення їх з пасткою і характеризувати його *ефективним перерізом захоплення* S_d , а час життя розглядати як середній час пробігу неосновних носіїв між такими зіткненнями:

$$\tau_p = 1 / S_d v_p N_d; \quad (4.11a)$$

$$\tau_n = 1 / S_d v_n N_d, \quad (4.11b)$$

де v_n , v_p – середні швидкості неосновних носіїв відносно центрів рекомбінації.

Переріз захоплення – важливий і широко використовуваний параметр процесу рекомбінації. Він може змінюватися в межах від 10^{-16} до 10^{-26} м² залежно від виду напівпровідника і домішки.

За способом передачі вивільнюваної енергії рекомбінація через локальні рівні, як і міжзонна, може бути випромінювальною і безвипромінювальною. Частина енергії може приймати центр рекомбінації і передавати її потім кристалічній решітці.

Окремий вид – *поверхнева рекомбінація*, що може відбуватися за участю тампівських поверхневих станів, адсорбованих атомів або інших дефектів на поверхні. Залежно від їхнього впливу на швидкість рекомбінації розрізняють *швидкі й повільні* поверхневі стани. Час обміну електронами між об'ємними і швидкими поверхневими станами становить 10^{-6} с і менше. Повільні стани локалізовані не безпосередньо на самій поверхні напівпровідника, а на поверхні оксидної або іншої діелектричної плівки, що практично завжди покриває поверхню напівпровідника. Зрозуміло, що через малу провідність цієї плівки час переходу електрона між об'ємними й поверхневими станами може бути дуже великим (порядку 10^{-2} с і більше). Тому на час життя нерівноважних носіїв повільні стани безпосередньо не впливають.

У тих напівпровідниках, де концентрація рекомбінаційних центрів в об'ємі мала, швидкість поверхневої рекомбінації через швидкі стани може бути набагато більшою за швидкість об'ємної. Це особливо істотно для тонких зразків напівпровідника, де рекомбінація відбуватиметься здебільшого через поверхню. Переважання рекомбінації на поверхні викликає спрямований потік нерівноважних носіїв з об'єму. Швидкість цього потоку дорівнює відношенню кількості r_s рекомбінуючих за 1 с на одиниці поверхні електронно-діркових пар до їхньої надлишкової концентрації Δn_s у приповерхневому шарі:

$$v_s = r_s / \Delta n_s. \quad (4.12)$$

Величина v_s має розмірність метр за секунду і називається *швидкістю поверхневої рекомбінації*. Слід зазначити, що v_s – це не швидкість окремих носіїв, а середня швидкість дифузійного потоку нерівноважних носіїв, спрямованого до поверхні й викликаного розходженням в їхній концентрації на поверхні та в об'ємі.

На швидкість поверхневої рекомбінації істотно впливає кількість не тільки рекомбінаційних центрів, а й інших станів (у тому числі й повільних), які в результаті електронного обміну з об'ємом можуть заряджатися позитивно або негативно. Незалежно від знака цього заряду поле, що виникає, буде зменшувати потік до поверхні носіїв того чи

.....
 іншого типу, що приведе до зниження швидкості рекомбінації. Природно, що швидкість поверхневої рекомбінації буде найбільшою, коли потенціал поверхні дорівнюватиме нулю.

4.3. РЕКОМБІНАЦІЯ ЕЛЕКТРОНІВ ТА ІОНІВ

У ГАЗОРОЗРЯДНІЙ ПЛАЗМІ

Для плазми газового розряду найтипівішою є рекомбінація електрона з позитивним іоном. Як правило, вона відбувається за схемою



яка означає або безпосереднє перетворення іона в нейтральний атом, або ступеневе (через проміжні рівні збудження). Швидкість цього процесу пропорційна ймовірності зустрічі електронів й іонів, тобто добутку їхньої концентрації:

$$dn/dt = - \alpha_r n n_i, \quad (4.14)$$

Зазвичай концентрації електронів та іонів у нейтральній плазмі рівні між собою, і така рекомбінація є квадратичним процесом.

Надлишкова енергія ΔE , що виділяється при рекомбінації і дорівнює сумі енергії іонізації атома й кінетичної енергії електрона, може випромінюватися як квант електромагнітної енергії. Тому через розкид електронних швидкостей спектр цього випромінювання має бути безперервним з мінімальною граничною частотою, що відповідає енергії іонізації. При ступеневих процесах спектр має складатися з декількох смуг.

При низьких і середніх тисках газу коефіцієнт об'ємної випромінювальної рекомбінації α_r дуже малий. Це пояснюється не тільки малою ймовірністю зустрічі електронів з іонами через низькі значення їхньої концентрації, але й короткочасністю взаємодії. Час взаємодії електрона й іона має відповідати часу випромінювання кванта, що становить $\sim 10^{-8}$ с. Але при швидкості електронів, характерній для плазми низького й середнього тиску, час їхнього прольоту в

.....
електричному полі іона зазвичай на кілька порядків менший. Тому випромінювальна рекомбінація в об'ємі можлива практично в газорозрядній плазмі лише високого тиску в результаті взаємодії іонів з повільними електронами.

Інший можливий результат процесу (4.13) – передача енергії ΔE , що виділяється, третій частці. Такими частками, зазвичай є нейтральні атоми, концентрація яких на два-три порядки вища за концентрацію електронів та іонів. Але й цей вид рекомбінації відіграє істотну роль лише в плазмі високого тиску, оскільки ймовірність потрібного зіткнення за низьких густин газу мала.

У газових розрядах, що відбуваються при низьких і середніх тисках, рекомбінації в об'ємі практично немає й основною є рекомбінація на стінках, що оточують плазму. Стінки відіграють роль третьої частки, якій можуть бути передані будь-яка енергія й будь-який імпульс рекомбінуючих часток. Потрапляння зарядів на стінки відбувається переважно в результаті хаотичного руху. Однак електрони мають більші, ніж іони, швидкість і довжину вільного пробігу, тому потрапляння їх на стінки більш імовірне. У результаті стінка заряджається негативно відносно плазми, а електричне поле, що виникає при цьому, сприяє витягванню іонів із пристіночного шару плазми. Тому швидкість рекомбінації залежить лише від швидкості приходу іонів на стінки, і така рекомбінація є лінійною.

Ефективною може бути взаємна рекомбінація позитивного й негативного іонів завдяки малим швидкостям і, відповідно, великому часу взаємодії. Хоча для роботи більшості газорозрядних приладів негативні іони небажані, іноді для збільшення швидкості рекомбінації в розрядний проміжок вводять домішку газу, атоми якого мають велику електронну спорідненість й можуть утворювати негативні іони. Швидкість рекомбінації визначається здебільшого швидкістю захоплення електрона домішковими атомами. Цей спосіб використовують, коли потрібно забезпечити швидку деіонізацію розрядного проміжку із вимиканням живлячої напруги.

5. ОПТИЧНА ГЕНЕРАЦІЯ

Під *оптичною генерацією* розуміють утворення рухливих носіїв заряду всередині речовини або емісію електронів з речовини у вакуум при освітленні поверхні. До електромагнітного випромінювання оптичного діапазону зазвичай відносять видиме світло з довжинами хвиль 0,38...0,76 мкм, а також інфрачервоний та ультрафіолетовий діапазони, що примикають до нього. Енергія квантів цього діапазону

$$E \text{ (eV)} = 1,24/\lambda \text{ (мкм)} \quad (5.1)$$

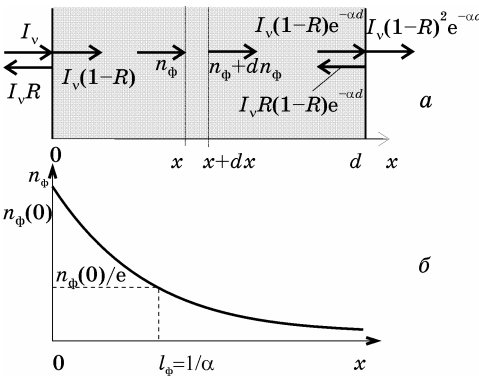
становить величини порядку частин та одиниць електрон-вольтів і відповідає характерним параметрам енергетичної структури твердих тіл. Тому електрони, що поглинули такі кванти, здатні порушувати валентні зв'язки й викликати зміну провідності речовини (*внутрішній або фоторезистивний ефект*), а також, виконуючи роботу виходу, емітувати з речовини (*зовнішній фотоефект або фотоемісія*). До фотоелектричного відносять також ефекти при освітленні контакту двох речовин (фотогальванічні ефекти), які буде розглянуто далі.

5.1. ОСОБЛИВОСТІ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА

Макроскопічна модель поглинання. Нехай поверхня речовини освітлюється монохроматичним світлом частоти ν з інтенсивністю I_ν . Частина енергії, рівна коефіцієнту відбивання R , відбивається від поверхні. Енергія, пропорційна $(1 - R)I_\nu$, проходить у речовину й поглинається. Кількість квантів світла, що проходять через одиницю поверхні за

.....
 одиницю часу, дорівнює відношенню інтенсивності до енергії кванта

$$n_{\phi}(0) = (1 - R)I_{\nu}/h\nu. \tag{5.2}$$



Для встановлення закону поглинання розглянемо шар речовини завтовшки dx (рис. 5.1). Зміна кількості квантів у цьому шарі через поглинання пропорційна кількості вхідних квантів і товщині шару:

$$dn_{\phi}(x) = -\alpha n_{\phi}(x)dx. \tag{5.3}$$

Рис. 5.1. До висновку закону поглинання квантів світла в шарі речовини (а) і залежність кількості квантів від відстані (б)

Знак «-» указує на поглинання, а коефіцієнт пропорційності α , називаний *коефіцієнтом поглинання*, показує, яка

частина квантів поглинається на одиниці довжини. Розв'язок диференціального рівняння (5.3)

$$n_{\phi}(x) = n_{\phi}(0)e^{-\alpha x} = (1 - R)I_{\nu} e^{-\alpha x}/h\nu \tag{5.4}$$

називають *законом Бугера – Ламберта*. Він показує, що інтенсивність світла всередині речовини спадає за експоненціальним законом (рис. 5.1). Швидкість спадання залежить від коефіцієнта поглинання. На відстані $l_{\phi} = 1/\alpha$, називаній *середньою глибиною поглинання* («довжиною вільного пробігу») квантів, інтенсивність світла спадає в $e \approx 2,7$ рази.

Якщо шар має товщину d , то до другої межі доходить світло з інтенсивністю, рівною $(1 - R)I_{\nu}e^{-\alpha d}$, від якої відбивається $R(1 - R)I_{\nu}e^{-\alpha d}$, а частина $(1 - R)^2 I_{\nu}e^{-\alpha d}$ проходить. Звідси коефіцієнт проходження через шар завтовшки d

$$T = I_{\nu}(d)/I_{\nu}(0) = (1 - R)^2 e^{-\alpha d}. \tag{5.5}$$

Цей вираз справедливий, якщо поглинання в шарі велике, тобто $e^{\alpha d} \gg 1$. Інакше необхідно враховувати багаторазове відбивання світла від меж шару й відповідний коефіцієнт проходження

$$T = [(1 - R)^2 e^{-\alpha d}] / (1 - R^2 e^{-2\alpha d}). \quad (5.6)$$

Залежність коефіцієнта поглинання α від частоти називають *спектральною характеристикою поглинання*. Вигляд такої характеристики, наведений для Ge, Si й GaAs на рис. 5.2, залежить від особливостей зонної структури речовин і механізмів поглинання світла в них.

Зміна енергії та імпульсу електрона під час поглинання кванта. Одну з найважливіших особливостей механізмів поглинання світла можна зрозуміти, проаналізувавши закон збереження енергії й імпульсу. Позначивши індексом 1 – початковий, а індексом 2 – кінцевий стан електрона при поглинанні кванта світла, можна записати очевидне на перший погляд співвідношення для енергії електрона: $E_2 - E_1 = h\nu$.

Для вільного електрона збільшення кінетичної енергії на енергію кванта $h\nu$, наприклад близьку до 1 еВ, має привести до помітного збільшення швидкості й імпульсу. Але за законом збереження імпульсу $p_2 - p_1 = h/\lambda$, і поглинання кванта не повинне помітно змінити швидкість, тому що імпульс кванта h/λ дуже малий. Ця суперечність означає, що вільний електрон не може поглинути квант світла, і в акті взаємодії електронів із квантами обов'язково бере участь кристалічна решітка. Тому в рівняннях балансу

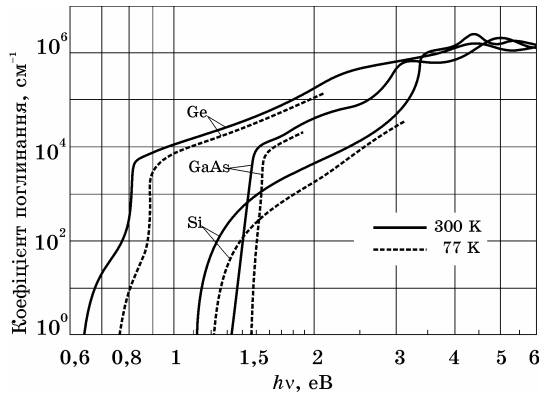


Рис. 5.2. Спектральні характеристики поглинання для основних напівпровідникових матеріалів: германію, силіцію й арсеніду галію

.....
енергії й імпульсу потрібно враховувати участь квантів теплових коливань решітки – фононів:

$$E_2 - E_1 = h\nu \pm E_{\text{фон}} \approx h\nu, \quad (5.7a)$$

$$p_2 - p_1 = h/\lambda \pm \hbar k_{\text{фон}} \approx \pm \hbar k_{\text{фон}}. \quad (5.7b)$$

Знаки « \pm » тут відповідають утворенню (збудженню) фонона і його поглинанню. У першому рівнянні можна знехтувати енергією фононів (соті й тисячні частки електрон-вольта), а в другому – імпульсом кванта світла, тому що імпульс фонона може досягати значень $\hbar k_{\text{фон}} \leq h/a$, які набагато більші за імпульс кванта світла і можуть змінювати хвильовий вектор електрона практично в межах усєї зони Бріллюена.

Участь фононів у поглинанні підтверджується експериментальною спектральною характеристикою поглинання для германію (див. рис. 5.2). Поглинання починається з частоти $\nu_0 = \Delta E/h$, кванти якої здатні перевести електрони з валентної зони лише в ті стани дна зони провідності, які відповідають абсолютному мінімуму дисперсійної кривої (L-долині), що лежить на краю зони Бріллюена. Такі переходи, називані *непрямими*, супроводжуються істотною зміною хвильового вектора електрона, що можливе лише за участі фононів. І тільки коли енергія квантів досягає значень, рівних ширині забороненої зони в центрі зони Бріллюена, починаються прямі переходи, що викликають новий підйом на спектральній характеристиці.

Ці два прості приклади не вичерпують всіх можливих варіантів участі фононів у процесі поглинання світла електронами. Зазначимо лише, що на експериментальних кривих спектрів поглинання участь фононів проявляється в згладжуванні границі поглинання.

Види поглинання. Існує багато причин, що викликають поглинання світла. Тут розглянемо лише ті, які приводять до утворення вільних зарядів. Серед них насамперед слід назвати *власне* або *фундаментальне* поглинання, за якого енергія поглиненого кванта витрачається на розрив валентного зв'язку. У результаті утворюється вільний електрон і

дірка в системі валентних зв'язків, які розглядають як пару рухливих носіїв.

На енергетичній діаграмі (рис. 5.3, а) цей процес виглядає як перехід електрона з валентної зони в зону провідності. Природно, що квант із енергією, меншою за ширину забороненої зони, не зможе порушити валентний зв'язок, тому речовина для таких квантів буде прозорою, якщо немає інших видів поглинання. Відповідно спектральна крива коефіцієнта поглинання (рис. 5.3, б) починається із частоти $\nu_0 = \Delta E/h$, називаної *граничною частотою власного поглинання*.

На частотах, вищих за граничну, коефіцієнт поглинання зростає, тому що в міжзонних переходах беруть участь електрони дедалі глибших станів валентної зони. Результатом фундаментального поглинання є утворення електронно-діркових пар або *біполярна генерація*.

Іншим важливим видом поглинання з погляду утворення носіїв заряду є *домішкове поглинання*. У цьому випадку кванти поглинаються домішковими атомами (наприклад, донорними), а енергія поглиненого кванта витрачається на розрив валентного зв'язку між атомом домішки і його «зайвим» електроном. У результаті утворюється вільний електрон і позитивно іонізований донорний атом. На енергетичній діаграмі (рис. 5.4, а) цей процес зображено як перехід електрона з донорного стану в зону провідності. Природно, що іонізація донорів можлива лише за умови, що енергія кванта перевищує енергію іонізації, тобто на частотах $\nu > \nu_0 = \Delta E_d/h$. Однак на експериментальних спектральних кривих спостерігаються піки поглинання (рис. 5.4, б) на частотах, нижчих за граничну.

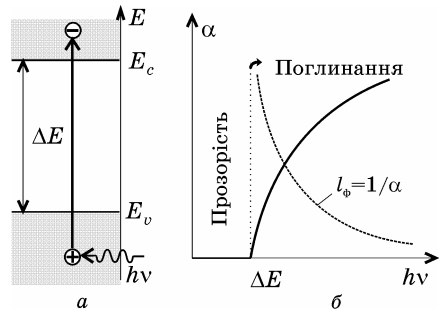


Рис. 5.3. Енергетичні переходи електронів при фундаментальному поглинанні й відповідна спектральна характеристика. Штрихова лінія показує залежність середньої глибини поглинання квантів від їхньої енергії

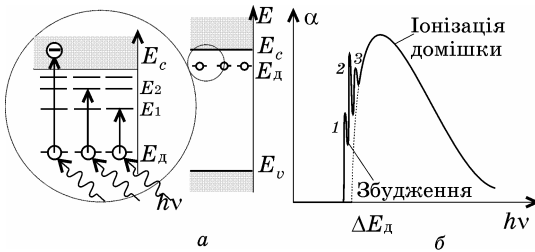


Рис. 5.4. Енергетичні переходи електронів для домішкового поглинання (а) й відповідна спектральна характеристика (б). Піки 1, 2, 3 на характеристиці відповідають переходам електронів на рівні збудження, показані на збільшеній вставці

(E_1, E_2, \dots на енергетичній діаграмі рис. 5.4, а). Таке поглинання не приводить до утворення рухливих носіїв і є «фотоелектрично неактивним».

У результаті домішкове поглинання в донорних напівпровідниках може викликати утворення вільних електронів, а в акцепторних – утворення дірок у валентній зоні. Тому результатом домішкового поглинання є *монополярна генерація*, тобто утворення рухливих носіїв лише одного знака.

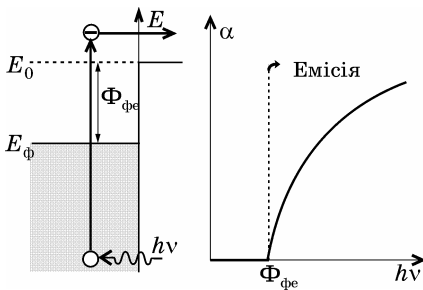


Рис. 5.5. Збудження електронів під час фотоемісії, що можлива тільки у разі їхніх переходів у стани вище рівня вакууму

вакууму, звідки можливий їхній вихід через потенціальний бар'єр. Однак для металів (рис. 5.5) це поглинання можна виділяти в окремий вид.

Це пов'язано з тим, що «зайвий» електрон донорного атома крім основного стану E_d має ще й стани збудження. Кванти світла з енергією, меншою ΔE_d , не можуть викликати іонізацію домішки, але можуть викликати її збудження в різні дискретні стани

Спірним з погляду класифікації є виділення в окремий вид *емісійного поглинання*, тобто поглинання таких квантів світла, які можуть викликати емісію електронів з речовини. Для напівпровідників його насправді можна розглядати як різновид власного (або домішкового) поглинання, що супроводжується збудженням електронів у стани зони провідності вище рівня

.....

Емісія електронів неможлива, якщо енергія квантів світла менша, ніж *фотоелектронна робота виходу*, тобто відстань на енергетичній діаграмі від найвищого заповненого електронами стану до рівня вакууму. Для металів ця величина збігається з термодинамічною роботою виходу, але для напівпровідників – це різні поняття, тому що рівень Фермі (у невироджених напівпровідниках) розташовується в забороненій для електронних станів зоні.

5.2. ВЛАСТИВОСТІ ФОТОЕФЕКТІВ

5.2.1. Поведінка збуджених електронів

Поведінка збуджених електронів визначає й пояснює як спільні риси, так і розбіжності між внутрішнім і зовнішнім фотоэффектами, а це, у свою чергу, визначає технічні параметри фотокатодів для вакуумних фотоелементів і фоторезисторів.

Одним з основних тверджень, які привели Ейнштейна до успіхів у поясненні теорії фотоэффекту, була гіпотеза про те, що світло поглинається в речовині квантами і в кожному одиничному акті має поглинатися енергія не менша, ніж $h\nu$. Якщо такий квант поглинається електроном, то останній збуджується, тобто переходить у стан (рис. 5.6), який на величину $h\nu$ вище початкового (з точністю до малих значень енергій фононів, що беруть участь у процесі поглинання).

У початковий момент поведінка оптично збудженого електрона може істотно відрізнятись від поведінки рівноважних електронів, які перебувають у зоні провідності за рахунок термічного збудження. Оптично збуджені електрони – нерівноважні, і їхня енергія в момент утворення може значно перевищувати середню енергію рівноважних, рівну $3k_B T/2$ у невироджених напівпровідниках. Через це такі електрони називаються «гарячими».

Якщо енергії поглиненого кванта достатньо, то «гарячі» електрони можуть опинитися в станах зони провідності, що

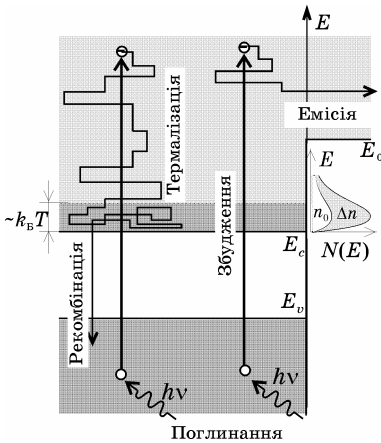


Рис. 5.6. Енергетична діаграма поведінки електронів під час їхнього збудження, емісії, термалізації і рекомбінації. Фрагмент праворуч показує вигляд функції розподілу нерівноважних носіїв

лізуються. Тривалість процесу термалізації можна оцінити, виходячи з таких міркувань. Для розсіювання енергії, наприклад, в 1 eV електрону потрібно кілька десятків зіткнень, тому що при кожному зіткненні він може передати решітці, збуджуючи фонon, енергію, що не перевищує кількох сотих електрон-вольта. Оскільки середній час між двома послідовними зіткненнями в типових випадках становить $10^{-13} \dots 10^{-14}$ с, то всю свою надлишкову енергію «гарячий» електрон розгубить за $10^{-11} \dots 10^{-12}$ с. Цей час релаксації надлишкової енергії й відповідає часу знаходження збудженого електрона в «гарячому» стані до його термалізації.

Енергія термалізованих електронів дорівнює, в середньому, кільком $k_B T$ і відповідає тим самим станам зони провідності, у яких перебувають термічно збуджені рівноважні електрони, концентрацію яких n_0 можна обчислити на основі рівноважної статистики:

$$n_0 = N_c \exp [(E_\Phi - E_c)/k_B T]. \quad (5.8a)$$

лежать вище рівня вакууму. Однак унаслідок зіткнень із кристалічною решіткою, а точніше з фононами, «гарячий» електрон дуже швидко розсіює свою енергію і переходить на вільні, більш низькі дозволені рівні. За сприятливих умов, рухаючись хаотично до поверхні, «гарячий» електрон може подолати потенціальний бар'єр, якщо його енергія залишилася вищою за рівень вакууму. Саме такі «гарячі» електрони в початковий момент свого існування зазвичай і зумовлюють фотоелектронну емісію.

Інші електрони дуже швидко переходять у нижні стани зони провідності, або *терма-*

Час життя термалізованих електронів у зоні провідності на кілька порядків вищий, ніж час термалізації, і може помітно перевищувати 10^{-8} с, після чого відбувається їхня рекомбінація з дірками валентної зони. Отже, практично весь час свого існування збуджені електрони проводять коло дна зони провідності й практично не відрізняються від рівноважних. Відповідно їхній енергетичний розподіл можна описати функцією розподілу (рис. 5.6), подібною до максвеллівської (для невідродженого колективу), але в якій замість енергії E_{Φ} потрібно підставити положення квазірівня Фермі E_{Φ_n} . Тому концентрацію нерівноважних електронів можна визначити за співвідношенням

$$n = N_c \exp [(E_{\Phi_n} - E_c)/k_B T], \quad (5.86)$$

аналогічним (5.8а). Порівнявши ці вирази, одержимо

$$n = n_0 \exp [(E_{\Phi_n} - E_{\Phi})/k_B T]. \quad (5.9)$$

Останнє співвідношення використовують для визначення положення квазірівня Фермі через надлишкову концентрацію електронів, оптично збуджуваних у зону провідності:

$$E_{\Phi_n} = E_{\Phi} + k_B T \ln(1 + \Delta n/n_0). \quad (5.10)$$

Звідси видно, що помітної зміни положення квазірівня можна досягти тільки у разі високого рівня освітленості, коли $\Delta n \gg n_0$. Якщо ж концентрація надлишкових носіїв порівнянна з рівноважною, то зсув квазірівня Фермі становить величину порядку $k_B T$. За малих рівнів освітленості зміною квазірівня можна знехтувати.

5.2.2. Інерційність фотоефектів

З наведеного опису поведінки збуджених світлом електронів випливає, що емісія можлива лише поки вони перебувають в «гарячому» стані, не встигнувши термалізуватися, тому їхній вихід «затримується» після початку освітлення не більш ніж на $10^{-11} \dots 10^{-12}$ с. Це дозволяє вважати, що фотовідгук при зовнішньому фотоефекті практично без-

.....
інерційний. Крім того, з огляду на значення швидкості хаотичного руху електронів (порядку 10^5 м/с), можна зробити висновок, що вихід електронів відбувається із приповерхневого шару, товщина якого не перевищує, в середньому, десятих або сотих часток мікрометрів.

Інша ситуація спостерігається у разі внутрішнього фотоэффекту. Оскільки процес термалізації відбувається практично миттєво, у провідності беруть участь електрони, які затримуються біля дна зони провідності на час, необхідний для їхньої рекомбінації. Тому з увімкненням освітлення спостерігається їх «накопичення» і відповідне зростання провідності доти, доки не встановиться стаціонарний стан, у якому швидкість рекомбінації електронів зрівнюється зі швидкістю їхнього збудження.

Для кількісного аналізу часових залежностей фотовідгуку із вмиканням й вимиканням світла можна скористатися рівнянням безперервності (4.58), яке для однорідного зразка ($\text{div } \vec{j}_n = 0$) набуде вигляду

$$dn/dt = G_n - R_n. \quad (5.11)$$

де $G_n = G_v + G_0$ – швидкість генерації, що містить як оптичну, так і рівноважну теплову складові; R_n – швидкість рекомбінації.

Припускаючи, що і рекомбінація, і збудження нерівноважних носіїв відбуваються за рахунок міжзонних переходів ($\Delta n = \Delta p$), можна вважати $R_n = \alpha_r n p = \alpha_r (n_0 + \Delta n) \times (p_0 + \Delta p)$, а $G_0 = R_0 = \alpha_r n_0 p_0$, де α_r – коефіцієнт рекомбінації. Швидкість оптичної генерації можна оцінити в такий спосіб. Оскільки на одиницю поверхні падає $I_v/h\nu$ квантів світла за секунду, з яких $(1 - R)I_v/h\nu$ поглинається в приповерхневому шарі, товщина якого приблизно дорівнює середній довжині їх «вільного пробігу» до поглинання $l_\phi = 1/\alpha$, і кожен квант збуджує в середньому β' електронів, то концентрація надлишкових електронів за одиницю часу зростає на $G_v = \beta'(1 - R)I_v/l_\phi h\nu$. Коефіцієнт пропорційності β' має сенс середньої кількості електронів, збуджуваних у зону провідності одним поглиненим квантом світла, і його називають *квантовим виходом*. Часто користуються поняттям

.....
 квантового виходу β , розраховуваного на один *падаючий квант*. Очевидно, що $\beta = \beta'(1 - R)$, тоді $G_v = \beta\alpha I_v/h\nu$. У підсумку рівняння безперервності можна подати у формі

$$d(\Delta n)/dt = \beta\alpha I_v/h\nu - \Delta n/\tau_n - \alpha_r \Delta n^2, \quad (5.12)$$

де $\tau_n = 1/\alpha_r(n_0 + p_0)$ – час життя нерівноважних електронів. Звідси очевидно, що в стаціонарному стані ($d/dt = 0$) установлюється значення концентрації надлишкових носіїв

$$\Delta n_{\text{ст}} = \frac{n_0 + p_0}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4\Delta n_\tau}{n_0 + p_0}} - 1 \right), \quad (5.13)$$

де $\Delta n_\tau \equiv \tau_n \beta \alpha I_v/h\nu$ – кількість збуджуваних світлом нерівноважних електронів за інтервал часу τ_n .

Рівняння (5.12) відрізняється від подібного (4.4) лише наявністю генераційного доданка в правій частині. Не розв'язуючи його повністю, обмежимося аналізом двох крайніх, але характерних ситуацій.

Перша. За низької освітленості ($\Delta n \ll n_0 + p_0$) рекомбінацію називають *лінійною*, тому що третім доданком у правій частині (5.12) можна знехтувати, і рівняння стає лінійним

$$d(\Delta n)/dt = \beta\alpha I_v/h\nu - \Delta n/\tau_n. \quad (5.14)$$

У стаціонарному стані, коли швидкості генерації й рекомбінації врівноважують одна одну,

$$\Delta n_{\text{ст}} = \Delta n_\tau \equiv \tau_n \beta \alpha I_v/h\nu. \quad (5.15)$$

Із вмиканням і вимиканням світла в моменти t_0^+ й t_0^- відповідно (рис. 5.7, а) перехідні процеси описують типовими виразами:

$$\Delta n(t) = \Delta n_{\text{ст}} \{1 - \exp[-(t - t_0^+)/\tau_n]\}, \quad (5.15a)$$

$$\Delta n(t) = \Delta n_{\text{ст}} \exp[-(t - t_0^-)/\tau_n]\}, \quad (5.15б)$$

.....
 які відповідають лінійній рекомбінації і графіки яких наведено на рис. 5.7, б. Релаксація фотопровідності в цьому випадку характеризується часом життя нерівноважних носіїв τ_n .

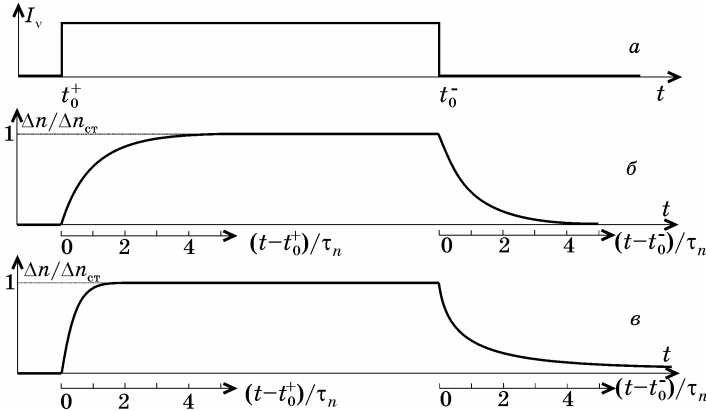


Рис. 5.7. Релаксаційні процеси відносної зміни надлишкової концентрації електронів із вмиканням і вимканням світла (а) для різних рівнів освітленості: б – для малого рівня ($\Delta n_\tau \ll n_0 + p_0$), в – для великого ($\Delta n_\tau = 10(n_0 + p_0)$). Додаткові осі відповідають нормованим на час життя значенням, відліченим від характерного моменту перемикавання

Друга ситуація. За великої інтенсивності світла ($\Delta n \gg \gg n_0 + p_0$) переважаючим у правій частині (5.12) стає третій доданок

$$d(\Delta n)/dt = \beta \alpha I_v / h\nu - \alpha_r \Delta n^2, \tag{5.16}$$

і таку рекомбінацію називають *квадратичною*. Концентрація надлишкових носіїв (5.13) у стаціонарному стані встановлюється на рівні

$$\Delta n_{cr} = [\Delta n_\tau (n_0 + p_0)]^{1/2} \equiv [\beta \alpha I_v / (\alpha_r h\nu)]^{1/2}, \tag{5.17}$$

який нелінійно залежить від інтенсивності світла. Розв’язок (5.16) з увімкненням світла матиме вигляд:

$$\Delta n(t) = \Delta n_{cr} \operatorname{th}[\Delta n_{cr} \alpha_r (t - t_0^+)], \tag{5.18a}$$

.....
а при вимиканні зі стаціонарного стану

$$\Delta n(t) = \Delta n_{\text{ст}} / [1 + \Delta n_{\text{ст}} \alpha_r (t - t_0^+)]. \quad (5.186)$$

Графіки цих функцій наведено на рис. 5.7, в. Незважаючи на їхні розбіжності й відмінність від попереднього випадку, швидкість релаксаційних процесів тут також визначається часом порядку часу життя τ_n . Наочніше ця інерційність фотопровідності спостерігається після вимкнення освітлення: фотовідгук продовжує існувати ще якийсь час до зникнення носіїв унаслідок їхньої рекомбінації. Цей ефект знижує швидкодію фоторезистивних елементів і його підвищення можливе за умови зменшення часу життя нерівноважних носіїв.

5.2.3. Лінійність світлової характеристики

Світлова характеристика фотоефектів, тобто залежність фотовідгуку від інтенсивності світла, також має особливості, зумовлені поведінням збуджуваних носіїв. Як зазначалося, при опроміненні монохроматичним світлом кількість квантів, які поглинаються одиницею поверхні за 1 секунду, визначається інтенсивністю світла I_v і дорівнює $(1 - R)I_v/h\nu$. Якщо вважати, що енергія кванта поглинається цілком в одиничному акті взаємодії і кожен електрон поглинає не більше одного кванта, то кількість емітованих з одиниці поверхні за 1 с електронів n_e буде пропорційна кількості поглинутих квантів:

$$n_e = \beta'(1 - R)I_v/l_{\phi} h\nu, \quad (5.19)$$

де β' – коефіцієнт пропорційності, що показує, скільки електронів емітується в середньому одним *поглиненим* квантом, і його також називають *квантовим виходом*. Часто під квантовим виходом β розуміють кількість емітованих електронів у перерахунку на один *падаючий* квант. Очевидно, що $\beta = \beta'(1 - R)$. У результаті для густини струму фотоемісії з поверхні можна одержати

$$j_{\Phi} = en_e = e\beta'(1 - R)I_{\nu}/h\nu = e\beta I_{\nu}/h\nu = S_{\nu}(\nu) I_{\nu}. \quad (5.20)$$

Коефіцієнт пропорційності $S_{\nu}(\nu)$, що має тут розмірність А/Вт, називають *спектральною чутливістю*, а його залежність від частоти – *спектральною характеристикою* фотоелемента. Факт пропорційності між інтенсивністю падаючого світла й густиною фотоструму є змістом закону, встановленого 1888 року О. Г. Столетовим. Цей закон діє і в тому випадку, коли поверхня опромінюється не монохроматичним світлом, а світлом складного, але постійного спектрального складу. У цьому випадку коефіцієнт пропорційності називають *інтегральною чутливістю*.

Подібний за формою закон спостерігається і для внутрішнього фотоелемента, але тільки за низької освітленості, коли концентрація збуджених електронів пропорційна інтенсивності. При постійному освітленні встановлюється динамічна рівновага між процесами генерації та рекомбінації, при цьому стаціонарне значення надлишкової концентрації фотоелектронів визначається співвідношенням (5.15). Ці електрони викличуть зміну питомої електропровідності речовини на величину

$$\Delta\sigma = e\Delta n_{\text{ст}} \mu_n = e\mu_n \tau_n \beta \alpha I_{\nu}/h\nu = S_{\nu}(\nu) I_{\nu}. \quad (5.21)$$

Подібну зміну електропровідності створюють і дірки, які генеруються світлом у валентній зоні. Співвідношення (5.21), подібно до закону Столетова, характеризує зв'язок між інтенсивністю падаючого світла і фотопровідністю. Коефіцієнт пропорційності, як й у випадку фотоелемента, називають *спектральною чутливістю*, вираженою в сименс-метрах на ват.

Однак співвідношення (5.21) лінійне лише за низького рівня збудження, коли нерівноважних носіїв генерується набагато менше, ніж рівноважних, і, відповідно, значення фотопровідності менше так званої *темної провідності*. Але коли швидкість оптичного збудження стане порівняною зі швидкістю теплового, час життя залежатиме від інтенсивності падаючого світла і лінійність порушиться. Якщо скористатися загальним виразом (5.13) для $\Delta n_{\text{ст}}$, то можна одержати для фотопровідності

$$\Delta\sigma = \frac{\sigma_0}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4\Delta n_\tau}{n_0 + p_0}} - 1 \right). \quad (5.22)$$

Цю залежність наведено на рис. 5.8 як функцію від рівня збудження, який зручно характеризувати параметром $\Delta n_\tau / (n_0 + p_0) \equiv \tau_n \beta \alpha I_\nu / h\nu (n_0 + p_0)$, пропорційним інтенсивності. З неї випливає, що провідність фоторезисторів нелінійно залежить від інтенсивності світла практично в усьому робочому діапазоні, коли фотовідгук стає порівнянний з темновим струмом. Лінійність фотоемісії також може порушуватися, але за дуже великої інтенсивності, характерної для лазерного випромінювання.

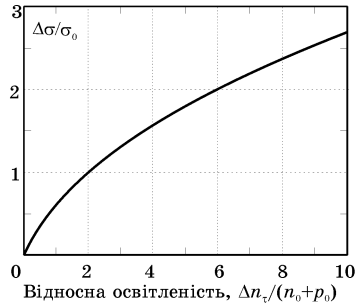


Рис. 5.8. Світлова характеристика внутрішнього фото ефекту в нормованих координатах

5.2.4. Чутливість фото ефектів

Ефект накопичення електронів у зоні провідності за рахунок скінченного часу життя, що приводить до підвищеної інерційності внутрішнього фото ефекту, відіграє й позитивну роль – «за інших рівних умов» чутливість резистивних фото елементів вища, ніж вакуумних, тому що в провідності бере участь більша кількість носіїв, ніж в емісії.

Якщо розглянути фотокатод і фоторезистор з однаковими освітлюваними площами $S = ab$ (рис. 5.9), то з (5.20) випливає, що величина емісійного фотоструму пропорційна потужності світлового потоку P_ν :

$$i_\phi = e\beta I_\nu S / h\nu = e\beta P_\nu / h\nu. \quad (5.23)$$

Для внутрішнього фото ефекту в шарі, товщина якого l_ϕ дорівнює середній глибині поглинання квантів, збуджувані електрони забезпечують фотопровідність, яку можна знайти з (5.21). В електричному полі з напруженістю \mathcal{E} значення відповідного струму через поперечний переріз $al_\phi = a/\alpha$

$$i_{\phi} = a l_{\phi} \Delta \sigma \mathcal{E} = (\tau_n / t_{\text{пр}}) e \beta I_{\nu} S / h \nu = (\tau_n / t_{\text{пр}}) e \beta P_{\nu} / h \nu. \quad (5.24)$$

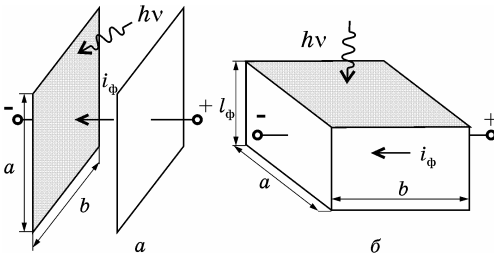


Рис. 5.9. Ескізи до порівняння чутливості зовнішнього (а) і внутрішнього (б) фото ефектів. Освітлювані поверхні (затшовані) мають однакову площу

своєрідне підсилення викликане «затримкою» електронів у зоні провідності на час τ_n , рівний часу життя. Коефіцієнт підсилення може бути отриманий досить великим і стати кілька порядків.

Слід звернути увагу, що підвищення чутливості фоторезисторів за рахунок збільшення часу життя приводить до зменшення швидкодії.

5.2.5. Гранична частота фото ефектів

Гранична частота поглинання й відповідного фотовідгуку значною мірою визначає спектральні властивості фотоелементів. Вона залежить від параметрів енергетичної структури речовини і може істотно відрізнитися для внутрішнього і зовнішнього фото ефектів.

Припустимо, що електрон, перебуваючи в стані з енергією E_1 , поглинає квант енергії $h\nu$ і, розсіявши частину δE своєї енергії, емітується з поверхні. Залишок його енергії у вакуумі проявляється у вигляді кінетичної енергії, яку знаходять з очевидного (див. рис. 5.10) балансу енергії:

$$E_{\text{к}} = E_1 + h\nu - \delta E - E_0. \quad (5.25)$$

Тут вважається, що $\mu \mathcal{E} = v_{\text{др}} = b / t_{\text{пр}}$, де $t_{\text{пр}}$ – час прольоту електронів через зразок завдовжки b із дрейфовою швидкістю $v_{\text{др}}$.

Порівняння останніх виразів показує, що за інших рівних умов фотострум при фоторезистивному ефекті більший, ніж при фотоemisії в $(\tau_n / t_{\text{пр}})$ разів. Це

.....
 точністю до енергії фононів, які трохи «розмивають»
 границю поглинання). Тому у власному напівпровіднику

$$\nu_0 = \Delta E/h. \quad (5.28)$$

У донорному напівпровіднику для збудження носіїв у зону провідності потрібна ще менша енергія кванта – рівна енергії іонізації домішки, тому

$$\nu_0 = \Delta E_x/h. \quad (5.29)$$

Порівняння енергетичних параметрів речовин і відповідна оцінка граничних частот показують, що створити фотоелементи в довгохвильовій ділянці оптичного діапазону набагато простіше з використанням внутрішнього фотоелектричного ефекту. Діаграма рис. 5.11 ілюструє чутливість різних речовин до різних діапазонів електромагнітних хвиль. Так, наприклад, для створення вакуумних (емісійних) фотоелементів, чутливих навіть у ближній частині інфрачервоного діапазону, потрібна речовина з фотоелектронною роботою виходу близько 1 еВ. Створити фотокатоди з такою або меншою роботою виходу досить складно.

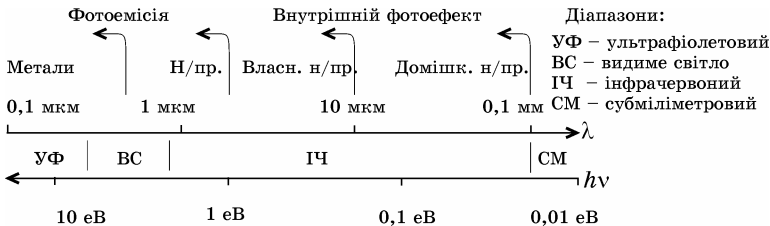


Рис. 5.11. Діаграма, що характеризує типові діапазони застосовності різних фотоелектричних ефектів: н/пр – напівпровідник

Водночас напівпровідник із шириною забороненої зони в кілька десятків часток електрон-вольта може служити фоторезистивним елементом у широкій частині інфрачервоного діапазону. Використовуючи донорні напівпровідники з різною енергією іонізації домішки, можна створити елементи, чутливі не тільки до інфрачервоного, але й до субміліметрового діапазону.

5.3. ФОТОЕЛЕМЕНТИ

5.3.1. Фотоемітери

Спектральною характеристикою фотокатода називають залежність чутливості до монохроматичного світла від його частоти. На вигляд спектральної характеристики впливають оптичні властивості речовини (залежність коефіцієнта відбивання від частоти), енергетичні параметри зонної структури, конструктивні особливості фотоелемента та зовнішні умови (насамперед, температура).

Розглянемо спочатку основні особливості типової спектральної характеристики металевих емітерів (рис. 5.12). Гранична частота фотоемісії відповідає фотоелектронній роботі виходу, яка для металів збігається з термодинамічною. При $T > 0$ границі немає, тобто на частотах, нижчих за граничну, фотострум існує за рахунок електронів, термічно збуджених вище рівня Фермі, які поглинули квант світла. Для більшості металів, що мають роботу виходу 4...5 еВ, границя фотоэффекту лежить в ультрафіолетовій області і лише для лужних і лужноземельних металів, у яких робота виходу становить 1,5...2 еВ, гранична частота потрапляє у видиму область.

На частотах, близьких до граничної, емісія забезпечується електронами, що мали до поглинання енергію, близьку до енергії Фермі. Збільшення частоти приводить до того, що в емісії можуть брати участь електрони дедалі глибших рівнів. Це, природно, викликає ріст спектральної кривої доти, доки енергія кванта не стане рівною повній роботі виходу $U_0 = E_0 - E_c$. При цьому будь-який електрон, що навіть перебував коло дна зони провідності, поглинувши

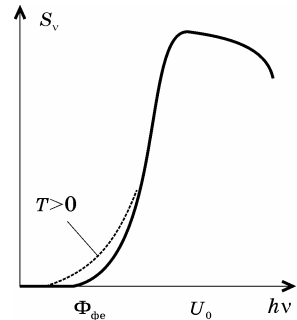


Рис. 5.12. Типовий вигляд спектральної характеристики фоточутливості металів. При $T > 0$ границя «розмивається», тобто фотострум існує на частотах, нижчих за граничну, за рахунок додаткового термічного збудження

.....
 квант, має можливість емітувати, а на характеристиці спостерігається «насичення» щодо кількості вихідних електронів. Така ситуація спостерігається вже в ультрафіолетовій області, тому що повна робота виходу для більшості металів становить 10 еВ і більше.

Фотоефект, що характеризується монотонним ростом спектральної чутливості із підвищенням частоти, називають *нормальним*. Розрізняють ще *селективний* (вибірковий) фотоефект, що характеризується наявністю максимумів (одного або декількох) спектральної чутливості.

Подальше підвищення частоти приводить до зниження чутливості, тому що зростає енергія квантів і їхня кількість при постійній інтенсивності світла зменшується. Формально це враховано наявністю величини $h\nu$ у знаменнику виразів для кількості поглинених квантів (див. підрозд. 5.1). Крім того, зі збільшенням частоти ослаблюється взаємодія фотонів з електронами, що виражається в збільшенні прозорості металу, тобто й у збільшенні довжини «пробігу» фотонів. «Гарячі» електрони утворюються при цьому далі від поверхні, і їхній вихід з металу утруднюється.

Слід також мати на увазі, що на спектральну характеристику фотоелектронних приладів впливає спектральна характеристика вікна, через яке освітлюється фотокатод. Навіть для найкращих вікон прозорість падає на хвилях, коротших 0,1...0,2 мкм.

В області нормального фотоефекту чутливість металевих катодів дуже мала, квантовий вихід становить усього 10^{-3} ... 10^{-5} . Це пояснюється насамперед високою відбивною здатністю металевих поверхонь – лише сота частина всіх падаючих фотонів проникає в метал і поглинається. Малому квантовому виходу сприяє й сильне розсіювання енергії «гарячих» електронів у результаті їхньої взаємодії з електронами зони провідності, концентрація яких у металі дуже велика.

Фотоелектронна емісія з напівпровідників має ряд особливостей порівняно з емісією із металів. Фоточутливість напівпровідників помітно вища, ніж металів. Квантовий вихід у найефективніших напівпровідникових емітерів може досягати 0,2...0,4 і близький до теоретичної межі, рівній 0,5. Квантовий вихід істотно залежить від співвідношення між

шириною забороненої зони й енергією електронної спорідненості. Наприклад, за однакової фотоелектронної роботи виходу (рис. 5.13), квантовий вихід у Cs_3Sb ($\Delta E/\chi \approx 4$) приблизно на порядок вищий, ніж у Cs_3Bi ($\Delta E/\chi \approx 1/3$). Пояснюється це тим, що при $\Delta E < \chi$ виявляється ще один механізм розсіювання: збуджені електрони мають достатню енергію, щоб у свою чергу збудити «вторинні» електрони з валентної зони. Це, звичайно, підсилює розсіювання енергії «гарячих» електронів і знижує ймовірність їхньої емісії.

Спектральна характеристика напівпровідникових емітерів зазвичай має яскраво виражений селективний характер і часто містить не один, а кілька максимумів. Це може бути пов'язане з багатошаровою структурою катода з різними оптичними властивостями шарів. Через внутрішні відбивання в шарі, що емітує, утворюються вузли або пучності стоячої світлової хвилі, що знижує або підвищує чутливість залежно від частоти.

В однорідних напівпровідниках селективність пов'язана насамперед з особливостями зонної структури. Так, до появи максимуму найчастіше приводить наявність донорної домішки. Енергія кванта, необхідна для збудження електронів донорних атомів вище рівня вакууму, зазвичай набагато менша фотоелектронної роботи виходу з основної речовини. Тому на спектральній характеристиці донорного напівпровідника з'являється максимум на частотах нижчих, ніж у власних напівпровідниках.

Фотоемісійні властивості напівпровідників сильно залежать від стану поверхні. Якщо на поверхні є заповнені електронами енергетичні стани, що потрапляють у заборонену зону, можлива емісія із цих станів на частотах, нижчих за граничну.

Однак роль поверхневих станів важлива не тільки з погляду їхньої прямої участі в емісії. Не менш важливим є

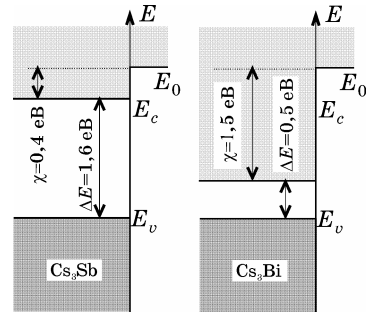


Рис. 5.13. Енергетичні діаграми напівпровідників Cs_3Sb й Cs_3Bi , що мають однакову фотоелектронну роботу виходу, але різні відношення $\Delta E/\chi$

.....
 обмін зарядами між поверхневими й об'ємними станами, що приводить до появи електричного поля в приповерхневому шарі, який істотно впливає на фотоемісію. Із цього погляду напівпровідники p -типу є кращими емітерами порівняно з n -типом.

В акцепторних напівпровідниках електрони з поверхневих станів переходять до акцепторних атомів й утворюється подвійний електричний шар із негативно іонізованих акцепторів і позитивних зарядів поверхневих станів. Електричне поле викривляє енергетичну діаграму приповерхневого шару донизу, знижуючи енергію електронної спорідненості. У донорних напівпровідниках спостерігається протилежна ситуація – поле негативного заряду на поверхні й позитивно іонізованих донорів у приповерхньому шарі підвищує потенціальний бар'єр, підвищуючи енергію електронної спорідненості.

Описаний прийом використовують для створення *фотокатодів з негативною електронною спорідненістю* (НЕС). Для цього поверхню напівпровідника з великою концентрацією акцепторів покривають моноатомним шаром електропозитивних атомів. Обмін електронами приводить до появи тонкого (порядку 100 \AA) подвійного електричного шару, електричне поле якого викликає крутий вигин зон і зниження енергії електронної спорідненості до від'ємних значень (рис. 5.14).

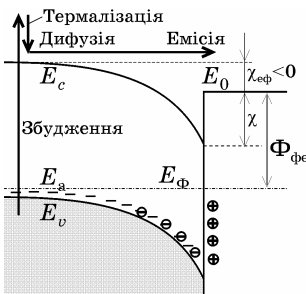


Рис. 5.14. Енергетична діаграма біля поверхні фотокатода з НЕС

Особливістю таких катодів є те, що в них полегшується вихід електронів насамперед із глибоких шарів з області плоских зон. Для електронів, збуджених біля поверхні, потенціальний бар'єр залишається колишнім. «Гарячі» електрони, збуджені в глибині, практично миттєво термалізуються й протягом часу життя в зоні провідності рухаються хаотично. Тому

рух їх до поверхні має дифузійний характер, а глибина, з якої можлива емісія, відповідає дифузійній довжині.

.....

З погляду спектральної характеристики особливістю фотокатодів з НЕС є, по-перше, те, що гранична частота визначається, як і при внутрішньому фотоэффекті, шириною забороненої зони використовуваного напівпровідника й знаходиться переважно в інфрачервоній області. По-друге, зниження електронної спорідненості підвищує їхню чутливість насамперед поблизу границі фотоэффекту, де коефіцієнт фундаментального поглинання малий й кванти поглинаються в глибині речовини. Із підвищенням частоти зменшується довжина «вільного пробігу» фотонів і вони збуджують електрони ближче до поверхні, де ефект зниження електронної спорідненості виявляється слабкіше.

Катооди з НЕС використовують як фотоприймачі насамперед інфрачервоного випромінювання, зокрема у приладах нічного бачення.

5.3.2. Фоторезистивні матеріали

Спектральні характеристики деяких фоторезистивних матеріалів наведено на рис. 5.15.

Для виготовлення фоторезисторів використовують сульфід і селенід кадмію й свинцю, телурид свинцю тощо у вигляді монокристалів, полікристалічних плівок, спресованих і спечених з порошкоподібного матеріалу таблеток. Сульфід кадмію при кімнатній температурі має ширину забороненої зони 2,4 еВ, тому границя власного поглинання знаходиться у видимому діапазоні ($\lambda \approx 0,5$ мкм). Введення до складу CdS домішок хлору (донори), міді або срібла (акцептори) сприяє збільшенню часу життя носіїв заряду, тобто приводить до підвищення чутливості. У середньому чутливість CdS становить 6 мА/В·лм, а в деяких плівкових зразках 400 мА/В·лм, темновий опір $10^7 \dots 10^{10}$ Ом, поріг чутливості $\sim 10^{-10}$ лм, однак вони інерційні ($\tau = 1 \dots 140$ мс).

Чутливість селенідо-кадмійових фоторезисторів ще вища (30...600 мА/В·лм), вони менш інерційні, мінімальний світловий потік, що виявляється, має порядок 10^{-11} лм. Ширина забороненої зони PbS при кімнатній температурі становить 0,37 еВ, що відповідає порогу фотопровідності

.....
 $\lambda_0 \approx 3,3$ мкм; в PbSe $\Delta E = 0,27$ еВ й $\lambda_0 \approx 4,6$ мкм. Ці фоторезистивні матеріали призначені для роботи в середній інфрачервоній області спектра. При охолодженні до температури рідкого азоту характеристики суттєво зміщуються в довгохвильову область.

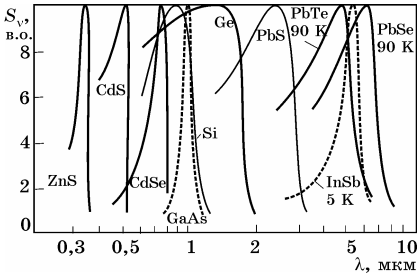


Рис. 5.15. Спектральні характеристики fotocутливості деяких фоторезистивних напівпровідникових сполук

Для виготовлення фоторезисторів на основі власної фотопровідності використовують також сульфід талію, сульфід і селенід цинку, арсенід галію, антимонід й арсенід індію, а також германій з домішкою марганцю й силіцій з домішкою цинку. Фоторезистори із власного Ge й Si не одержали поширення через малу чутливість.

Для реєстрації випромінювання далекої інфрачервоної області спектра ($\lambda_0 > 6$ мкм) використовують, головним чином, домішкові фоторезистори на основі германію, силіцію і їхніх сплавів. Як домішки для легування германію використовують золото, цинк, сурму, мідь, кадмій і ртуть. Zn, Cu, Cd, Hg утворюють акцепторні рівні, Au – три акцепторні й один донорний, Sb застосовують як компенсвальну домішку.

У субміліметровому діапазоні використовують фотоприймачі з InSb з донорною фотопровідністю, охолоджувані рідким гелієм. Значення домішкової фотопровідності залежить від концентрації домішки й від ступеня термічної іонізації при цій температурі. При кімнатній температурі домішка з $\Delta E_{\text{дом}} \approx 0,1 \dots 0,01$ еВ практично повністю термічно іонізована. Тому для одержання домішкового поглинання світла необхідно охолоджувати напівпровідник – і тим сильніше, чим менша енергія іонізації домішки.

УСЕРЕДНЕННЯ ШВИДКОСТЕЙ РОЗСІЮВАННЯ

Часи релаксації знаходять як середні для електронного колективу швидкості розсіювання для кожного виду зіткнень. Способи усереднення можуть бути різними, але більшість з них у кінцевому результаті відрізняються між собою коефіцієнтом пропорційності порядку 1.

Основна проблема при усередненні пов'язана з тим, що в правій частині кінетичного рівняння (1.12) стоїть функція розподілу, яка необхідна для усереднення і яку потрібно знайти заздалегідь. Оскільки зробити це зазвичай неможливо без розв'язку рівняння Больцмана, то часто роблять деяке припущення про її форму і усереднення проводять по цій гіпотетичній функції. Найпоширенішим є середнє по функції розподілу $N(\vec{k})$

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \int_{V_k} \lambda_i(\vec{k}) N(\vec{k}) d\vec{k} / \int_{V_k} N(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (1)$$

де значення λ_i вибирають для кожного виду розсіювання окремо. Оскільки в знаменнику підінтегральний вираз $N(\vec{k}) d\vec{k}$ являє собою кількість електронів в елементарному об'ємі dV_k \vec{k} -простору, то, вибравши його між двома ізоенергетичними поверхнями, які відповідають приросту енергії на dE і де кількість електронів дорівнює $N(E)dE$, можна перейти від усереднення по \vec{k} -простору до усереднення по енергетичній функції розподілу

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \int_0^{\infty} \lambda_i(E) N(E) dE / \int_0^{\infty} N(E) dE. \quad (2)$$

Тут інтегрування проводять по всій енергетичній зоні (або відповідній підзоні) від її дна до ∞ .

Найпростішим є припущення про те, що функція $N(E)$ має вигляд розподілу Максвелла-Больцмана, але визначається не температурою кристалічної решітки, а електронною температурою T_e . При квадратичному законі дисперсії $g(E) \sim E^{1/2}$, $f(E) = \exp(-E/k_B T_e)$.

Використовуючи позначення $E/k_B T_e \equiv \varepsilon$, отримаємо після скорочення

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \int_0^{\infty} \lambda_i(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon} d\varepsilon / \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \lambda_i(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (3)$$

Тут використано значення табличного інтеграла, що стоїть у знаменнику

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = \sqrt{\pi} / 2.$$

Інший спосіб обчислення часу релаксації імпульсу полягає в усередненні λ_i з ваговим коефіцієнтом \bar{k} відповідно до (1.63)

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \int_{V_k} \lambda_i(\bar{k}) \bar{k} N(\bar{k}) d\bar{k} / \int_{V_k} \bar{k} N(\bar{k}) d\bar{k}. \quad (4)$$

Перейшовши від усереднення по \bar{k} -простору до усереднення по енергетичним станам зони подібно до попереднього випадку, при квадратичному законі дисперсії отримаємо

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \int_0^{\infty} \lambda_i(E) \sqrt{E} N(E) dE / \int_0^{\infty} \sqrt{E} N(E) dE. \quad (5)$$

Якщо вважати, що електронний газ залишається невідродженим, а його функція розподілу – максвелівською, та враховуючи, що $\int_0^{\infty} \varepsilon e^{-\varepsilon} d\varepsilon = 1$, то з тими ж позначеннями, що й для (3), отримаємо

$$\frac{1}{\tau_{pi}} = \int_0^{\infty} \lambda_i(\varepsilon) \varepsilon e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (6)$$

Домішкове розсіювання. Для розсіювання на іонізованих домішках у моделі Конуелл-Вайскопфа подамо (2.5) у розгорнутому вигляді, використовуючи наведені там позначення:

$$\lambda_d = 2N_d \sqrt{\frac{2}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \right)^2 E^{-3/2} \ln \left(1 + \frac{4\pi\varepsilon\varepsilon_0}{e^2} \cdot \frac{E}{N_d^{1/3}} \right). \quad (7)$$

Аналітичне інтегрування цього виразу ускладнюється наявністю останнього співмножника. Тому враховуючи, що логарифмічна залежність є слабкою порівняно зі степеневою, без особливих втрат точності можна вважати $E = 3k_B T_e / 2$. Нормуючи енергію ($E/k_B T_e = \varepsilon$), подамо

$$\lambda_d = N_d \sqrt{\frac{8}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right)^2 (k_B T_e)^{-3/2} \ln \left(1 + \frac{6\pi\epsilon\epsilon_0}{e^2} \cdot \frac{k_B T_e}{N_d^{1/3}} \right) \varepsilon^{-3/2}. \quad (8)$$

Використовуючи другий спосіб усереднення (6) та беручи до уваги, що $\int_0^\infty \varepsilon^{-1/2} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = \sqrt{\pi}$, отримуємо для часу релаксації імпульсу при розсіюванні на іонізованих домішках

$$\frac{1}{\tau_{pd}} = \sqrt{\frac{8\pi}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right)^2 \ln \left(1 + \frac{6\pi\epsilon\epsilon_0}{e^2} \cdot \frac{k_B T_e}{N_d^{1/3}} \right) N_d (k_B T_e)^{-3/2}. \quad (9)$$

Слід зазначити, що в літературі використовуються й інші способи усереднення, що дають результат, який відрізняється коефіцієнтом пропорційності порядку 1. Крім того, якщо об'єм $N_d^{-1/3}$, який займає в середньому один домішковий атом, вважати сферичним, і взяти за максимальну прицільну відстань його радіус, то результат (9) треба зменшити в $6/\pi$ разів. Це свідчить про те, що при порівнянні з експериментом у (9) можна ввести деякий підгоночний параметр.

Акустичне розсіювання. Вираз (2.21) для швидкості розсіювання на акустичних фонах з використанням змінної ε має вигляд

$$\lambda_a = \frac{(2m^*)^{3/2} D_a^2 k_B T}{2\pi\rho v_{зв}^2 \hbar^4} \sqrt{k_B T_e} \sqrt{\varepsilon} \equiv A_a \sqrt{\varepsilon}. \quad (10)$$

Обчислення часу релаксації імпульсу за (6) приводить до інтеграла

$$\frac{1}{\tau_{pa}} = A_a \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = 3 A_a \sqrt{\pi} / 4 = \frac{3(2m^*)^{3/2} D_a^2 k_B T}{8\sqrt{\pi}\rho v_{зв}^2 \hbar^4} \sqrt{k_B T_e}. \quad (11)$$

Іноді використовують вираз, який впливає з (10) після простої заміни $E = 3k_B T_e / 2$:

$$1/\tau_{pa} = \sqrt{3/2} A_a = \frac{(m^*)^{3/2} D_a^2 k_B T}{\pi \rho v_{зв}^2 \hbar^4} \sqrt{k_B T_e}. \quad (12)$$

Оптичне розсіювання. Для зручності запису подальших результатів подамо множник $(N_\phi + 1/2 \pm 1/2)$, який враховує кількість оптичних фононів, що беруть участь у розсіюванні, з урахуванням формули Планка (2.11) у такій формі:

$$N_\phi + 1/2 \pm 1/2 = e^{\pm t}/2 \operatorname{sh} t. \quad (13)$$

Тут уведено позначення $t = \hbar \omega_0 / 2k_B T$. Використовуючи також позначення $t_e = \hbar \omega_0 / 2k_B T_e$ та нормуючи енергію $(E/k_B T_e \equiv \varepsilon)$, запишемо вираз (2.22) для швидкості розсіювання на **оптичному деформаційному потенціалі**

$$\lambda_o^\pm = \frac{(m^*)^{3/2} D_o^2}{\sqrt{2\pi} \rho \hbar^3 \omega_o} \cdot \frac{e^{\mp t}}{2 \operatorname{sh} t} \sqrt{k_B T_e} \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e} \equiv A_o^\pm \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e}. \quad (14)$$

Визначити час релаксації імпульсу в аналітичному вигляді тут можна з використанням усереднення за (3)

$$\frac{1}{\tau_{po}^\pm} = \frac{2A_o^\pm}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (15)$$

Для поглинання фононів (верхній знак) $\varepsilon + 2t_e > 0$, оператор Re втрачає сенс. У результаті приходимо безпосередньо до табличного інтеграла (див. Г. Н. Ватсон. Теория бесселевых функций. – М.: ИЛ, 1949.)

$$\int_0^\infty \sqrt{\varepsilon(\varepsilon + 2t_e)} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = t_e \exp(t_e) K_1(t_e), \quad (16)$$

де $K_1(t_e)$ – модифікована функція Бесселя від уявного аргументу другого роду першого порядку.

Для збудження фононів (нижній знак) оператор Re можна опустити, якщо нижньою межею інтегрування вибрати значення $\varepsilon = 2t_e$, вище якого підкореневий вираз у (15) стає додатним. Привести цей інтеграл до вигляду (16) можна заміною змінної $\varepsilon = \xi + 2t_e$:

$$\int_{2t_e}^{\infty} \sqrt{\varepsilon(\varepsilon - 2t_e)} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = e^{-2t_e} \int_0^{\infty} \sqrt{\xi(\xi + 2t_e)} e^{-\xi} d\xi = t_e e^{-t_e} K_1(t_e). \quad (17)$$

З урахуванням двох останніх інтегралів вираз (15) можна записати в загальному вигляді

$$\frac{1}{\tau_{po}^{\pm}} = \frac{2A_{\nu}^{\pm}}{\sqrt{\pi}} t_e e^{\pm t_e} K_1(t_e) = \frac{(m^*)^{3/2} D_o^2}{2\sqrt{2}\pi^{3/2} \rho \hbar^2} \cdot \frac{e^{\mp(t-t_e)}}{\sqrt{k_B T_e} \operatorname{sh} t} K_1(t_e). \quad (18)$$

Підсумовування обернених часів при поглинанні та збудженні приводить до повного оберненого часу релаксації імпульсу для неполярного оптичного розсіювання:

$$\frac{1}{\tau_{po}} = \frac{(m^*)^{3/2} D_o^2}{\sqrt{2}\pi^{3/2} \rho \hbar^2} \cdot \frac{\operatorname{ch}(t - t_e)}{\sqrt{k_B T_e} \operatorname{sh} t} K_1(t_e). \quad (19)$$

При *полярному оптичному розсіюванні* подамо вираз (2.23) з використанням тих самих позначень, що й при неполярному, і введенням полярної оптичної константи

$$\alpha = \frac{e^2 \sqrt{m^*}}{4\sqrt{2}\pi \varepsilon_o \hbar (\hbar \omega_o)^{1/2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_{\text{ст}}} \right)$$

у такому вигляді

$$\lambda_{\text{по}}^{\pm} = \frac{\alpha \omega_o}{\sqrt{2}} \cdot \frac{e^{\mp t}}{\operatorname{sh} t} \sqrt{\frac{t_e}{\varepsilon}} \ln \left| \frac{\sqrt{\varepsilon} + \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e}}{\sqrt{\varepsilon} - \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e}} \right| \equiv \frac{A_{\text{по}}^{\pm}}{\sqrt{\varepsilon}} \ln F^{\pm}(\varepsilon). \quad (20)$$

Викорстання усереднення (3) дає вираз для обернених часів релаксації при поглинанні та збудженні фонуна:

$$\frac{1}{\tau_{\text{по}}^{\pm}} = \frac{2A_{\text{по}}^{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \ln F^{\pm}(\varepsilon) e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (21)$$

Обчислювати ці інтеграли краще окремо. При поглинанні фонуна подкореневі вирази є додатними і оператор Re втрачає сенс, тому

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^+} = \frac{2A_{\text{по}}^+}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \ln \frac{\sqrt{\varepsilon + 2t_e} + \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon + 2t_e} - \sqrt{\varepsilon}} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (22)$$

Подальше інтегрування зручно проводити по частинах. Позначивши $u = \ln F^+(\varepsilon)$, $dv = e^{-\varepsilon} d\varepsilon$ та врахувавши, що $e^{-\varepsilon} \ln F^+ \Big|_0^\infty = 0$, а $d(\ln F^+) = d\varepsilon / 2\sqrt{\varepsilon(\varepsilon + 2t_e)}$, одержимо інтеграл

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^+} = \frac{A_{\text{по}}^+}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{e^{-\varepsilon} d\varepsilon}{2\sqrt{\varepsilon(\varepsilon + 2t_e)}} = \frac{A_{\text{по}}^+}{\sqrt{\pi}} e^{+t_e} K_0(t_e), \quad (23)$$

де $K_0(t_e)$ – модифікована функція Бесселя від уявного аргументу другого роду нульового порядку.

При збудженні фонуна (нижній знак) вираз (21) має сенс тільки якщо $\varepsilon > 2t_e$, тому

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^-} = \frac{2A_{\text{по}}^-}{\sqrt{\pi}} \int_{2t_e}^\infty \ln \frac{\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon - 2t_e}}{\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon - 2t_e}} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (24)$$

Заміною змінної $\varepsilon = \xi + 2t_e$ цей інтеграл можна привести до вигляду (22):

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^-} = \frac{2A_{\text{по}}^-}{\sqrt{\pi}} e^{-2t_e} \int_0^\infty \ln \frac{\sqrt{\xi + 2t_e} + \sqrt{\xi}}{\sqrt{\xi + 2t_e} - \sqrt{\xi}} e^{-\xi} d\xi = \frac{A_{\text{по}}^-}{\sqrt{\pi}} e^{-t_e} K_0(t_e). \quad (25)$$

Вирази (22) і (23) можна об'єднати

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}^\pm} = \frac{\alpha\omega_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{\mp(t-t_e)}}{\text{sh } t} \sqrt{t_e} K_0(t_e). \quad (26)$$

Повний час релаксації імпульсу для полярного оптичного розсіювання знаходять через суму останніх виразів при поглинанні і збудженні

$$\frac{1}{\tau_{p\text{по}}} = \frac{1}{\tau_{p\text{по}}^+} + \frac{1}{\tau_{p\text{по}}^-} = \frac{\alpha\omega_0\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \frac{\text{ch}(t-t_e)}{\text{sh } t} \sqrt{t_e} K_0(t_e). \quad (27)$$

Міждолинне розсіювання. Вираз (2.25) для швидкості міждолинного розсіювання дещо подібний до (2.22) для неполярного оптичного розсіювання і для нормованої енергії ($E/k_B T_e \equiv \varepsilon$) з урахуванням (13) для переходів з i -долини в j -ту можна подати так:

$$\lambda_{ij}^{\pm} = \frac{Z_j (m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{\sqrt{2\pi} \hbar^3 \omega_{ij}} \cdot \frac{e^{\mp t}}{\text{sh } t} \sqrt{k T_e} \text{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e - \delta} \equiv A_{ij}^{\pm} \text{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e - \delta}. \quad (28)$$

Тут слід мати на увазі, що в параметри t_e й t треба підставляти енергію міждолинних фононів $\hbar \omega_{ij}$, а величина $\delta \equiv \Delta_{ij}/k_B T_e$ – це нормована міждолинна відстань Δ_{ij} , яку відраховують від дна j -долини до дна i -ї з урахуванням знака (для скорочення запису тут біля δ індекси опущено).

Як і для оптичного розсіювання час релаксації імпульсу визначимо в аналітичному вигляді, використовуючи усереднення за (3)

$$\frac{1}{\tau_{pij}^{\pm}} = \frac{2A_{ij}^{\pm}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \text{Re} \sqrt{\varepsilon \pm 2t_e - \delta} e^{-\varepsilon} d\varepsilon. \quad (29)$$

Подальше інтегрування залежить від співвідношення між енергією фононів та міждолинною відстанню. На практиці важливішою є ситуація, коли $\hbar \omega_{ij} < \Delta_{ij}$, або $\delta > 2t_e$, бо саме в цьому випадку виявляються специфічні особливості багатодолинних напівпровідників.

Для переходів електронів з нижньої долини у верхню величина δ , а отже й $\delta \pm 2t_e$, більше 0, і розсіювання можливе тільки якщо енергія електрона перевищує величину $\Delta_{ij} \pm \hbar \omega_{ij}$. При цьому оператор Re можна опустити, якщо нижньою межею інтегрування буде величина $\delta \pm 2t_e$. У цьому випадку інтеграл (3) обчислюють як і при оптичному розсіюванні

$$\int_{\delta \mp 2t_e}^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon - (\delta \mp 2t_e)} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = (\delta / 2 \mp t_e) e^{-(\delta / 2 \mp t_e)} K_1(\delta / 2 \mp t_e). \quad (30)$$

Переходи в нижню долину ($\delta < 0$) можливі при довільній енергії, а оскільки $\pm 2t_e - \delta > 0$, то оператор Re втрачає сенс і

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon - \delta \pm 2t_e} e^{-\varepsilon} d\varepsilon = (\pm t_e - \delta/2) e^{-(\pm t_e - \delta/2)} K_1(\pm t_e - \delta/2). \quad (31)$$

Ці два інтеграли можна подати як один: $|\delta/2 \mp t_e| \exp(-\delta/2 \pm t_e) K_1|\delta/2 \mp t_e|$, а час релаксації імпульсу для розсіювання між *нееквівалентними* долинами при поглинанні та збудженні фононів обчислити за формулою

$$\frac{1}{\tau_{pij}^{\pm}} = \frac{Z_j(m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{\sqrt{2}\pi^{3/2}\rho\hbar^3\omega_{ij}} \cdot \frac{e^{-\delta/2}}{\text{sh } t} \sqrt{k_B T_e} e^{\mp(t-t_e)} \left| \frac{\delta}{2} \mp t_e \right| K_1 \left| \frac{\delta}{2} \mp t_e \right|. \quad (32)$$

Вираз для сумарного оберненого часу релаксації не вдається отримати компактним у загальному вигляді, але для найважливішого для практики випадку при суттєвому перевищенні $\Delta_{ij} \gg \hbar\omega_{ij}$ можна знехтувати t_e порівняно з $\delta/2$ у повільних функціях під знаком модуля і подати

$$\frac{1}{\tau_{pij}} = \frac{Z_j(m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{2\pi^{3/2}\rho\hbar^2(\hbar\omega_{ij})^{1/2}} \cdot \frac{\text{ch}(t-t_e)}{\text{sh } t} \cdot \frac{|\delta|}{t_e^{1/2}} e^{-\delta/2} K_1 \left| \frac{\delta}{2} \right|. \quad (33)$$

Якщо міждолинна відстань незначна й $\Delta_{ij} < \hbar\omega_{ij}$, то для часу релаксації імпульсу можна використовувати формулу (19) для неполярного оптичного розсіювання, де до значення енергії фонона треба внести поправку $\pm\Delta_{ij}$, або (32), де під знаком модуля підставляти половину загальної зміни енергії, яка відбувається під час розсіювання того чи іншого виду.

В окремому випадку при $\Delta_{ij} = 0$ приходимо до розсіювання між *еквівалентними* долинами, а інтеграл (29) фактично зводиться до (15) і відповідний час релаксації можна обчислити, як і для розсіювання на оптичному деформаційному потенціалі

$$\frac{1}{\tau_{pii}^{\pm}} = \frac{(Z_i - 1)(m_i^*)^{3/2} D_{ii}^2}{\sqrt{2}\pi^{3/2}\rho\hbar^3\omega_{ii}} \cdot \frac{e^{\mp(t-t_e)}}{\text{sh } t} \sqrt{k_B T_e} K_1(t_e), \quad (34)$$

а для повного часу

$$\frac{1}{\tau_{pii}} = \frac{(Z_i - 1)(m_i^*)^{3/2} D_{ii}^2}{\pi^{3/2}\rho\hbar^2(\hbar\omega_{ii})^{1/2}} \cdot \frac{\text{ch}(t-t_e)}{\text{sh } t} \sqrt{t_e} K_1(t_e), \quad (35)$$

.....
 де $(Z_i - 1)$ – кількість «інших» еквівалентних долин, у які відбувається перехід електрона; m^* – ефективна маса густини станів в одній долині.

Для спрощення отриманих розрахункових співвідношень можна використовувати наближені формули для функцій Бесселя. При малих значеннях аргументу ($x \ll 1$) можливі апроксимації $K_0(x) \approx \ln(2/x)$, $K_1(x) \approx 1/x$, а при великих аргументах ($x \gg 1$) $K_0(x) \approx K_1(x) \approx \sqrt{\pi/2x} \exp(-x)$. До того ж корисним може бути диференціальне співвідношення $K_n'(x) = -K_{n-1}(x) - nK_n(x)/x$.

Поблизу значень точки x_0 біля 1 можливе лінійне подання функції $K_1(x)$ при розкладанні її в ряд за степенями, оберненими аргументу

$$K_1(x) \approx -x_0 K_0(x_0) + [x_0 K_0(x_0) + K_1(x_0)] x_0/x. \quad (36)$$

Тут використано попереднє співвідношення для функції першого порядку: $K_1'(x) = -K_0(x) - K_1(x)/x$.

Таке подання дозволяє суттєво спростити вигляд функції (33) для міждолинного розсіювання. Якщо за точку розкладу узяти електронну температуру $T_e = \Delta_{ij}/k_B$, при якій $\delta = 1$, то

$$K_1\left(\frac{\delta}{2}\right) \approx -\frac{K_0(0,5)}{2} + \left[\frac{K_0(0,5)}{2} + K_1(0,5)\right] \frac{k_B T_e}{\Delta_{ij}} = -0,4622 + 2,1186 \frac{k_B T_e}{\Delta_{ij}}.$$

При цих температурах $t_e \ll t$ і $\text{ch}(t - t_e) \approx \text{cht}$, а інші співмножники, крім $K_1(\delta/2)$, являють собою досить слабку функцію електронної температури, що має похилий максимум при $\delta = 1$. Замінивши цей добуток його максимальним значенням

$$[t_e^{-1/2} \cdot \delta \cdot \exp(\delta/2)]_{\max} = \sqrt{2\Delta_{ij}/e \hbar \omega_{ij}},$$

отримаємо, що обернений час міждолинної релаксації з хорошим наближенням можна вважати лінійною функцією температури

$$\frac{1}{\tau_{pij}} = \frac{Z_j (m_j^*)^{3/2} D_{ij}^2}{2\pi^{3/2} \rho \hbar^3 \omega_{ij}} \sqrt{2\Delta_{ij}/e} \cdot \text{cth } t (-0,4622 + 2,1186 k_B T_e / \Delta_{ij}). \quad (37)$$

Слід мати на увазі, що ця апроксимація придатна для переходів до верхніх j -долин ($\Delta_{ij} > 0$) в області температур (2000...6000 К), де міждолинне розсіювання є переважаючим. Для

.....
 розрахунку часу релаксації при переходах у нижні i -долини ($\Delta_{ji} < 0$) іноді зручніше використовувати співвідношення (1.73), враховуючи, що $\tau_{nij} \approx \tau_{pij}$:

$$\frac{1}{\tau_{pji}} = \frac{n_i}{n_j} \cdot \frac{1}{\tau_{pij}} = \left(m_i^*/m_j^*\right)^{3/2} \exp(-\Delta_{ji}/k_B T_e) \frac{1}{\tau_{pij}}. \quad (38)$$

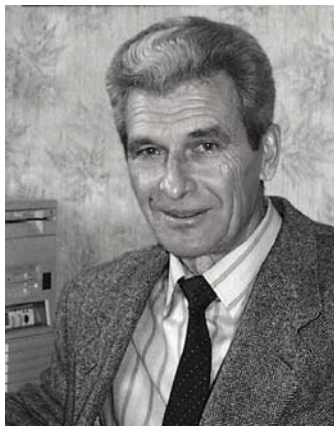
Для розсіювання між еквівалентними долинами аргументом функції Бесселя є відношення $t_e = \hbar\omega_{ii}/2k_B T_e$, яке в області великих електронних температур суттєво менше за 1, і можлива апроксимація $K_1(x) \approx 1/x$, яка дозволяє подати (35) у простішому вигляді

$$\frac{1}{\tau_{pii}} = \frac{(Z_i - 1)(m_i^*)^{3/2} D_{ii}^2}{\pi^{3/2} \rho \hbar^3 \omega_{ii}} \cdot \text{cth } t \cdot \sqrt{2k_B T_e}. \quad (39)$$

Для полярного оптичного розсіювання при великих електронних температурах ($\hbar\omega_o/2k_B T_e \ll 1$) можна скористатися апроксимацією $K_0(x) \approx \ln(2/x) - 0,5772$.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ТА РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Зеегер К.* Физика полупроводников: Пер. с англ. – М.: Мир, 1977. – 616 с.
2. *Зи С.* Физика полупроводниковых приборов: В 2 кн.: Пер. с англ. – М.: Мир, 1984. – Кн. 1. – 456 с.
3. *Иващенко В. М., Митин В. В.* Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло. – К.: Наук. думка, 1990. – 192 с.
4. *Конуэлл Э.* Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях: Пер. с англ. – М.: Мир, 1970. – 384 с.
5. *Москалюк В. А., Синекон Ю. С., Кассинг Р.* Физика электронных процессов: Учеб. пособие. – Ч. I: Электронные состояния. – К.: УкрИНТЭИ, 2001. – 148 с.
6. *Прохоров Э. Д., Белецкий Н. И.* Полупроводниковые материалы для приборов с междолинным переносом. – Х.: Вища шк.; Изд. при Харьк. ун-те, 1982. – 144 с.
7. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц: Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
8. *Шур М.* Современные приборы на основе арсенида галлия: Пер. с англ. – М.: Мир, 1991. – 632 с.



**МОСКАЛЮК
ВОЛОДИМИР ОЛЕКСАНДРОВИЧ**

Народився 1939 року. Кандидат технічних наук, професор кафедри фізичної і біомедичної електроніки Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут». Автор більше 100 наукових і методичних робіт. Фахівець у галузі моделювання надвисокочастотних твердотільних структур.

Навчальне видання

МОСКАЛЮК Володимир Олександрович

**ФІЗИКА ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ
ДИНАМІЧНІ ПРОЦЕСИ**

Навчальний посібник

Редактор *О. А. Кушик*
Коректор *Л. О. Олійник*
Комп'ютерна
верстка і оригінал-макет
(авторські) *В. О. Москалюк*

ІВЦ “Видавництво «Політехніка»” – редакційно-видавничий відділ

Темплан 2004 р., поз.4-1-2-017

Підп. до друку _____.2004. Формат 60×84¹/₁₆. Папір офс. Спосіб друку офсетний.
Ум. друк. арк. 10,46. Обл.-вид. арк. 17,4.

Інформаційно-видавничий центр “Видавництво «Політехніка»” НТУУ «КПІ»
Свідоцтво про держреєстрацію ДК № 1665 від 28.01.2004 р.
03056, Київ-56, вул. Політехнічна, 14, корп. 15,
тел./факс (044) 241-68-78, 241-66-64, e-mail: izdatelstvo@ntu-kpi.kiev.ua