

В.Я.Алешкин

курс лекций
«Современная физика полупроводников»

Нижний Новгород 2013

Оглавление

Раздел 1. Зонная структура германия, кремния и арсенида галлия	4
Раздел 2. Движение электронов в кристалле в слабых полях	11
Движение в однородном электрическом поле.....	13
Понятие дырки.....	14
Мелкие примеси в полупроводниках	15
Движение в слабом магнитном поле	20
Раздел 3. Статистика электронов и дырок в полупроводниках. Нахождение химического потенциала	21
Концентрация электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне	22
Концентрация электронов на примесях.....	25
Определение положения химического потенциала в полупроводниках	26
Раздел 4. Рассеяние носителей тока в полупроводниках	32
Релаксационные характеристики пробной частицы	33
Рассеяние на длинноволновых фононах	34
Рассеяние на деформационном потенциале акустических фононов (ДА- рассеяние)	35
Пьезоакустическое рассеяние (ПА-рассеяние)	37
Рассеяние на макрополе оптических фононов (ПО - рассеяние)	38
Рассеяние на деформационном потенциале оптических фононов (ДО-рассеяние).....	39
Рассеяние на междолинных фононах.....	39
Электрон-электронное рассеяние (е-е-рассеяние).....	41
Рассеяние на заряженных примесях	43
Раздел 5. Линейные процессы переноса в полупроводниках	47
Диффузионно-дрейфовое приближение. Соотношение Эйнштейна.....	51
Раздел 6. Неравновесные носители в полупроводниках	53
Время жизни неравновесных носителей	53
Уравнение непрерывности	55
Фотопроводимость	56
Квазиуровни Ферми	57
Амбиполярная диффузия и амбиполярный дрейф	58
Длина дрейфа	60
Раздел 7. Оптические свойства полупроводников	63
Механизмы поглощения света в полупроводниках	63
Поглощение на свободных носителях	63
Межзонное поглощение света	66

Экситонные эффекты в поглощении света	72
Поглощение света в непрямозонных полупроводниках	74
Эффект Бурштейна-Мосса.....	76
Эффект Франца-Келдыша	78
Примесное поглощение.....	81
Решеточное поглощение	83
Испускание света полупроводниками	87
Раздел 8. Оптические свойства низкоразмерных систем	92
Гетеропереходы	92
Квантовые ямы, квантовые провода и квантовые точки	93
Межзонное поглощение света в квантовой яме. Правила отбора для межзонных оптических переходов	96
Коэффициент межзонного поглощение в квантовой яме	98
Особенности экситонных эффектов в квантовых ямах	99
Межподзонное поглощение в квантовых ямах. Деполяризационный сдвиг	103
Модуляторы света на квантовых ямах	107
Фотоприемники на квантовых ямах	108
Квантово-каскадный лазер	109
Раздел 9. Явления в контактах	115
Контактная разность потенциалов	115
Формула Ричарсона-Дэшмана	116
Контакт Шоттки	117
Вольт-амперная характеристика контакта Шоттки	123
Омический контакт. Токи ограниченные объемным зарядом	126

Раздел 1. Зонная структура германия, кремния и арсенида галлия

В современной полупроводниковой электронике кремний, германий и арсенид галлия нашли наиболее широкое применение. Рассмотрим устройство электронного спектра в этих полупроводниках.

Германий и кремний имеют кристаллическую структуру алмаза. Эта структура представляет две гранецентрированные эквивалентные подрешетки, сдвинутые относительно друг друга на четверть большой диагонали куба. Арсенид галлия имеет структуру цинковой обманки. Она аналогична структуре алмаза, только узлы одной подрешетки заполнены атомами галлия, а другой – атомами мышьяка. Обе решетки являются решетками с базисом. На одну элементарную ячейку приходится по два атома. Решеткой Браве для этих структур является гранецентрированная кубическая решетка.

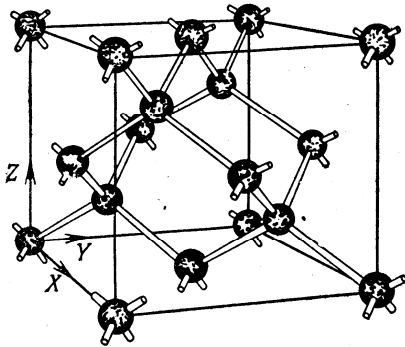


Рис. 1.1.

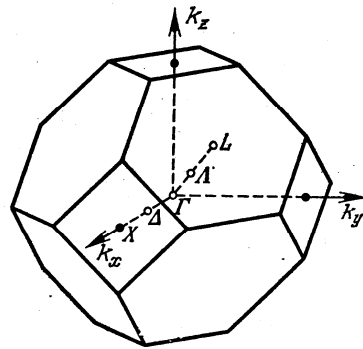


Рис. 1.2.

Для построения зоны Бриллюэна необходимо построить обратную решетку. Обратной решеткой является объемноцентрированная решетка. Ячейкой Вигнера-Зейтца в ней является усеченный октаэдр. Общепринятыми являются следующие обозначения для точек высокой симметрии зоны Бриллюэна: центр зоны обозначается Γ . Точки, находящиеся в центрах квадратных граней обозначаются буквой X. Любая точка, находящаяся на отрезке Γ -X обозначается буквой Δ . Центры шестиугольных граней обозначаются буквой L. Очевидно, что имеется 6 X-точек и 8 L-точек. Отметим, что точки, находящиеся на противоположных гранях – эквивалентны. Γ точка обладает полной симметрией куба. Через X и Δ точки проходит ось четвертого порядка и четыре плоскости отражения. Через L точку проходит ось третьего порядка и три плоскости отражения.

Отметим, что структура алмаза обладает центром инверсии, а структура цинковой обманки – не обладает. Это обстоятельство существенно влияет на вырождение спектра электрона по спину. Покажем, что в кристаллах с центрами инверсии спектр электронов двукратно вырожден по спину в любой точке зоны Бриллюэна. Для этого заметим, что гамильтониан, описывающий движение электрона в кристалле, инвариантен относительно

операции обращения времени. Под действием обращения времени импульс и спин меняют направление на противоположное. Следовательно, энергии электрона с противоположными направлениями спина и импульса одинаковы. Из-за спин-орбитального взаимодействия проекция спина на какую-либо ось не является интегралом движения. Поэтому мы можем под квантовым числом «спин» понимать среднее значение проекции спина на ось z .

Поскольку импульс является полярным вектором, а спин – аксиальным, то под действием операции пространственной инверсии импульс изменяет знак, а спин сохраняется. Поэтому в кристаллах, обладающих центром инверсии, энергии электрона с противоположными импульсами, но одинаковыми спинами равны. Применяя последовательно операции обращения времени и пространственной инверсии, легко видеть, что энергия электрона не зависит от направления спина. Следовательно, спектр электрона двукратно вырожден по спину при любом значении импульса в кристаллах с центром инверсии. В кристаллах без центра инверсии такое вырождение сохраняется лишь при нулевом импульсе. Схематически, устройство спектра в кристаллах с центром и без центра инверсии показано на рисунке 1.2.

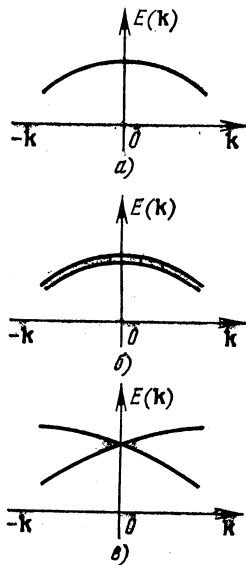


Рис.1.2.

Атомы германия и кремния имеют по 4 валентных электрона. Атом галлия имеет три валентных электрона, а атом мышьяка – пять. Поэтому элементарная ячейка в кристаллах германия, кремния и арсенида галлия имеет 8 валентных электронов. Поскольку каждая зона Бриллюэна имеет число мест для электронов равное удвоенному числу элементарных ячеек в кристалле, то в этих кристаллах имеется по 4 валентных зоны. Иногда в литературе можно встретить утверждение, что в этих кристаллах имеется три валентных

зоны. Это связано с тем, что одна из валентных зон находится глубоко по оси энергии и слабо влияет на электрические свойства полупроводников.

В полупроводниках верхняя валентная зона отделена от зоны проводимости энергетической щелью, которая называется запрещенной зоной (gap) и её величина обозначается E_g . Состояния с максимальной энергией в валентной зоне называются потолком валентной зоны (valence band top). Энергия потолка валентной зоны обозначается E_v . Следующая выше лежащая по энергии зона называется зоной проводимости. Состояния с минимальной энергией в зоне проводимости называются дном зоны проводимости (conduction band bottom). Энергия дна зоны проводимости обозначается E_c .

В идеальном полупроводнике, в котором отсутствуют дефекты и примеси, при нулевой температуре состояния валентных зон заполнены электронами, а состояния зоны проводимости – пусты. При конечной температуре часть электронов из валентной зоны за счет термического возбуждения может перейти в зону проводимости. Характерная величина ширины запрещенной зоны и разрешенных зон порядка 1 эВ, что много больше тепловой энергии при комнатной температуре (26 мэВ). Поэтому электроны в зоне проводимости полупроводников занимают места в окрестности минимума с энергиями, отстоящими от минимума на величины много меньшие ширины зоны, величина которой порядка 1 эВ. Аналогично, незаполненные электронами места валентной зоны располагаются в окрестностях ее потолка.

Рассмотрим, как устроен электронный спектр вблизи точки простого экстремума находящегося в точке $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$. Вблизи этой точки его можно разложить в ряд Тейлора:

$$(1.1) \quad \varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m} \right)_{ij} (p - p_0)_i (p - p_0)_j$$

где $\left(\frac{1}{m} \right)_{ij}$ - тензор обратных эффективных масс, $\left(\frac{1}{m} \right)_{ij} = \frac{\partial^2 \varepsilon(p)}{\partial p_i \partial p_j} \big|_{p=p_0}$. Очевидно, что тензор обратных эффективных масс является симметричным.

Поскольку энергия является квадратичной формой по импульсу, с помощью преобразования системы координат, тензор эффективных масс можно диагонализировать. В этом случае в новых координатах закон дисперсии имеет вид:

$$(1.2) \quad \varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m} \right)_{11} (p - p_0)_1^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m} \right)_{22} (p - p_0)_2^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m} \right)_{33} (p - p_0)_3^2$$

Из формулы (2) видно, что поверхность постоянной энергии в окрестности простого экстремума является эллипсоидом с полуосями $\sqrt{2m_{ii}\varepsilon}$.

При операциях симметрии, оставляющих кристалл неизменным, эллипсоид постоянной энергии переходит сам в себя или в эквивалентный ему эллипсоид, если экстремумов несколько. При операциях симметрии оставляющих точку экстремума на месте эллипсоид должен переходить сам в себя. Если через экстремум проходит ось порядка выше второго, то поверхность постоянной энергии – эллипсоид вращения и ось вращения направлена вдоль оси высокого порядка. Если экстремум находится в Γ -точке, то поверхность постоянной энергии – сфера.

Рассмотрим закон дисперсии электрона вблизи экстремума, где имеется касание двух зон. Такая ситуация имеет место вблизи потолка валентной зоны германия, кремния и арсенида галлия. Единственной функцией с двумя ветвями является квадратный корень. Кроме того, ясно, что вблизи экстремума энергия является аналитической функцией от импульса, пропорциональной квадрату его модуля. Используя эти простые соображения, можно написать следующие общие выражения для закона дисперсии в кубическом кристалле в случае когда $p_0 = 0$.

$$(1.3) \quad \varepsilon(p) = \varepsilon(0) + \frac{1}{2m_0} \left[Ap^2 \pm \sqrt{B^2 p^4 + C^2 (p_x^2 p_y^2 + p_y^2 p_z^2 + p_z^2 p_x^2)} \right]$$

где А, В, С, - безразмерные постоянные, m_0 - масса свободного электрона.

Рассмотрим зонную структуру германия. Дно зоны проводимости германия находится в L-точках – на границе зоны Бриллюэна. Обычно окрестность экстремума называется долиной. Поэтому германий называют многодолинным полупроводником. Поверхности постоянной энергии в окрестности дна зоны проводимости представляют собой восемь половинок эллипсоидов вращения. Из них можно составить четыре полных эллипсоида вращения. Оси вращения – большие диагонали куба в обратном пространстве. См. рис. 1.3.

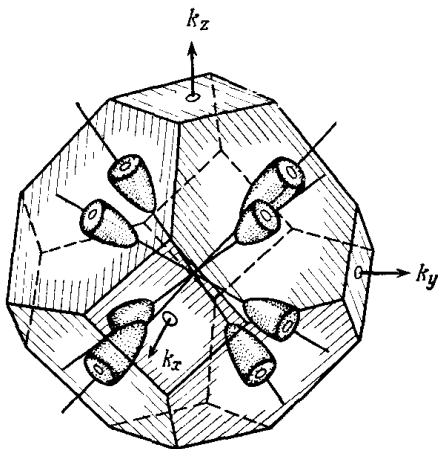


Рис. 1.3 Изоэнергетические поверхности в зоне проводимости германия.

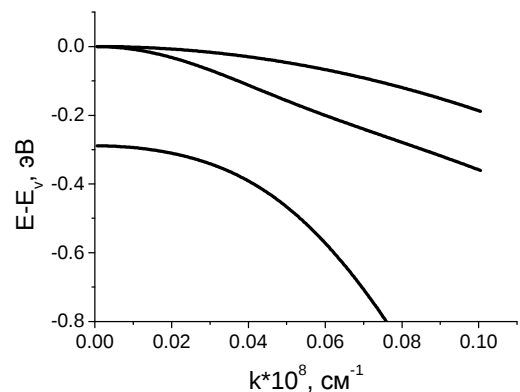


Рис. 1.4. Зависимость энергии электронов от волнового вектора в валентной зоне германия .

Закон дисперсии электронов в окрестности дна зоны проводимости можно записать в виде:

$$(1.4) \quad \varepsilon = E_c + \frac{1}{2m_t} [(p - p_0)_1^2 + (p - p_0)_2^2] + \frac{1}{2m_l} (p - p_0)^2$$

где E_c - энергия дна зоны проводимости, $m_t = 0.082m_0$ - поперечная электронная масса, $m_l = 1.58m_0$ - продольная масса. Ширина запрещенной зоны $E_g = E_c - E_v$ зависит от температуры, поскольку от температуры зависит постоянная решетки. Как правило, постоянная решетки увеличивается с ростом температуры, а ширина запрещенной зоны – уменьшается. В германии $E_g(300K) = 0.66$ эВ, $E_g(4.2K) = 0.74$ эВ. Отметим, что постоянная решетки изменяется при изменении температуры от 4.2K до 300K всего на сотые доли процента. При $T=4.2K$ постоянная решетки равна примерно 5.65Å.

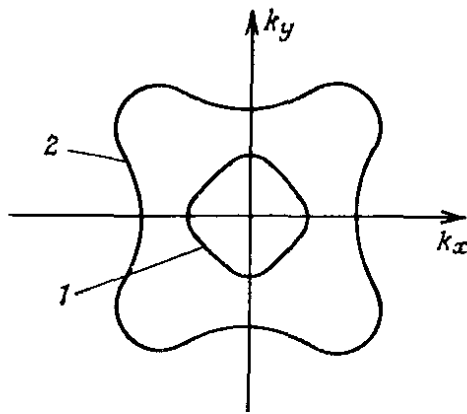


Рис. 1.5. Сечения изоэнергетических поверхностей в валентной зоне германия плоскостью $k_z=0$. 1 соответствует зоне легких дырок, 2 – зоне тяжелых дырок

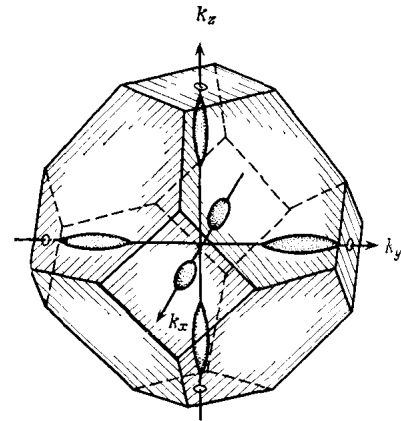


Рис. 1.6. Изоэнергетические поверхности в зоне проводимости кремния

Структура валентной зоны германия вблизи ее потолка изображена на рис 1.4. Потолок валентной зоны в германии образован касанием зон тяжелых и легких дырок и находится в Γ -точке. Ниже находится спин-отщепленная зона. Энергия спинового расщепления составляет 0.29 эВ. Полупроводники, в которых потолок валентной зоны и дно зоны проводимости находятся в разных точках зоны Бриллюэна называются непрямозонными. Германий – непрямозонный полупроводник. В окрестности потолка валентной зоны закон дисперсии описывается выражением (1.3). Знак минус перед корнем соответствует зоне легких дырок, а плюс – зоне тяжелых дырок. Сечение изоэнергетических поверхностей зон легких и тяжелых дырок плоскостью k_z показано на рис. 1.5. Отметим наличие вогнутостей на изоэнергетической поверхности тяжелых дырок. Эти вогнутости принципиально важны для работы NEMAGA, который был предложен Г.Кремером в 1956 г. и создан

группой ученых из ИПФ АН в 1984 г. Значение постоянных А, В, С приведены в таблице 1.1.

В кремнии дно зоны проводимости располагается в Δ -точках, примерно на расстоянии в одну шестую часть отрезка ГХ до Х-точки. Поэтому кремний так же как и германий многодолинный полупроводник. Поверхность постоянной энергии в зоне проводимости – шесть эллипсоидов вращения (см. рис. 1.6). Поперечная и продольная массы равны соответственно $0.19m_0$ и $0.98m_0$. Постоянная решетки 5.43 Å, поскольку атомы кремния меньше атомов германия. Ширина запрещенной зоны при 300К равна 1.12эВ. Валентная зона в кремнии устроена аналогично валентной зоне германия. Поскольку кремний более легкий элемент, то величина спин-орбитального расщепления в нем меньше чем в германии – 0.045эВ. Как и германий, кремний является непрямозонным полупроводником.

В арсениде галлия дно зоны проводимости располагается в Г-точке. Эффективная масса электрона в зоне проводимости составляет $0.067m_0$. Валентная зона в GaAs устроена аналогично таковой в германии. Ширина запрещенной зоны при 300 К составляет 1.424 эВ. Арсенид галлия является прямозонным полупроводником. В дальнейшем будет показано, что этот факт является причиной широкого использования GaAs в светоизлучающих приборах. Величина спин-орбитального расщепления 0.3 эВ. Отсутствие центра инверсии приводит к небольшому расщеплению энергии в окрестности дна зоны проводимости и к его смещению из Г-точки в направлении [111]. Пользуясь соображениями симметрии можно показать, что спин орбитальное взаимодействие приводит к тому, что гамильтониан, описывающий движение электрона в окрестности дна зоны проводимости, имеет вид (вывод этого выражения можно найти в книге «Оптическая ориентация» под ред. Б.П.Захарчени, и Ф.Майера Л. Наука 1989):

$$(1.5) \quad H = \frac{p^2}{2m_c} + \alpha \sigma \Omega + E_c$$

где $\Omega_x = \frac{1}{2m_c \sqrt{2m_c E_g}} p_x (p_y^2 - p_z^2)$, остальные компоненты Ω получаются циклической

перестановкой, α безразмерная постоянная равная в GaAs 0.07, σ - матрицы Паули.

Используя (1.5) можно получить следующее выражение для закона дисперсии электрона

$$(1.6) \quad \varepsilon(p) = E_c + \frac{p^2}{2m_c} \pm \alpha |\Omega|$$

Величина расщепления спектра в зоне проводимости невелика, поэтому часто ей пренебрегают при рассмотрении оптических и электрических явлений в полупроводниках. Одна-

ко, есть ряд явлений, обусловленный ориентацией спина электрона, при их рассмотрении учет спинового расщепления принципиально важен.

Следующие по высоте долины располагаются в L-точках. Энергия их примерно на 0.29 эВ больше, чем энергия дна зоны проводимости. Еще выше имеются минимумы в X-долинах, их энергия примерно на 0.5 эВ выше E_c . Эти долины оказывают существенное влияние на электрические свойства арсенида галлия в полях свыше 4 кВ/см и они являются причиной эффекта Ганна, который будет рассмотрен в разделе о горячих носителях.

Валентная зона в арсениде галлия устроена аналогично таковой у германия. Хотя имеется небольшое спиновое расщепление, которое смещает экстремум в направлениях [111] на величину порядка процента размера зоны Бриллюэна.

В заключение данного раздела приведем рассчитанные зависимости энергий электронов от волнового вектора в германии, кремнии и арсениде галлия.

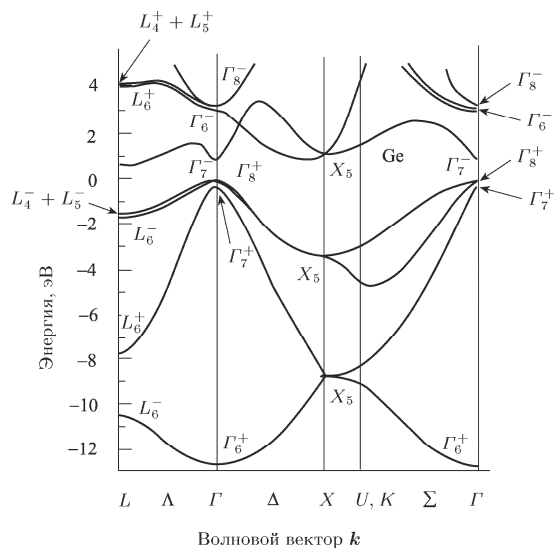


Рис. 1.7. Зонная структура Ge рассчитанная методом псевдопотенциала (из [1]).

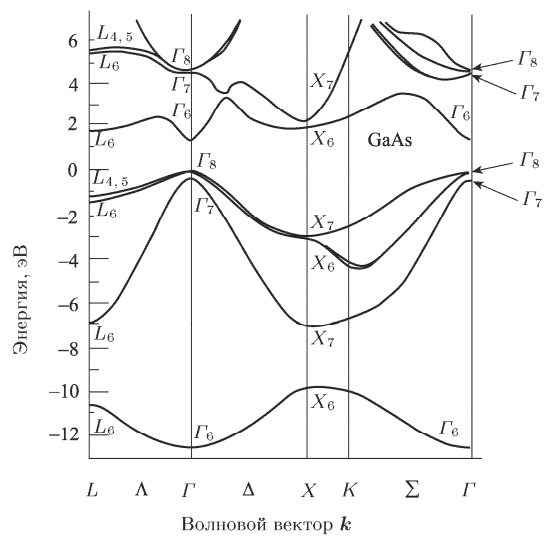


Рис. 1.8. Зонная структура GaAs, рассчитанная методом псевдопотенциала, (из [1]).

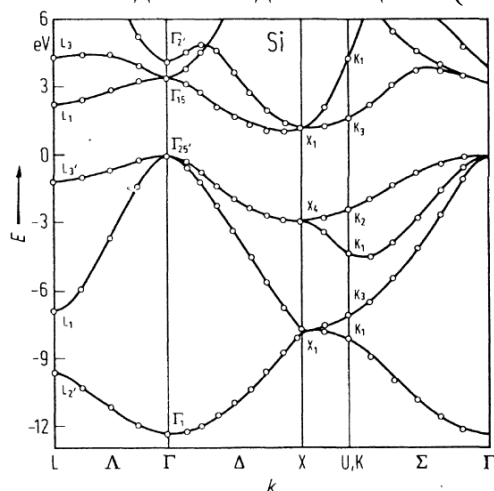


Рис. 1.9. Зонная структура кремния.

[1] П. Ю. М.Кардона Основы физики полупроводников, М.Физматлит 2002.

Раздел 2. Движение электронов в кристалле в слабых полях

В этой разделе мы рассмотрим движение электрона, находящегося в кристалле в слабом внешнем поле. Слабым полем будем называть такое поле, которое слабо изменяется на периоде обратной решетки. Сила, действующая на электрон в таком поле, много меньше сил кристаллического поля. Если внешнее поле потенциальное, то гамильтониан, описывающий движение электрона имеет вид:

$$(2.1) \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + V(r),$$

где $\hat{H}_0$ гамильтониан в отсутствие внешнего поля, $V(r)$ - потенциальная энергия электрона во внешнем поле. Удобно рассматривать задачу, используя разложение волновой функции не по блоховским функциям, а по функциям Ванье. Функции Ванье определяют следующим образом:

$$(2.2) \quad a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}) \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}),$$

где N - число элементарных ячеек в кристалле; $\mathbf{R}$ - векторы, пробегающие значения всех возможных трансляций в кристалле; $\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ - функции Блоха, удовлетворяющая уравнению:

$$(2.3) \quad \hat{H}_0 \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}),$$

$\varepsilon_n(\mathbf{k})$ - закон дисперсии электрона в n -ой подзоне, $\mathbf{k}$ - квазиволновой волновой вектор электрона. Суммирование в (2.2) проводится по всем состояниям зоны Бриллюэна. Покажем, что функции Ванье ортонормированны:

$$(2.4) \quad \begin{aligned} \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}') d^3r &= \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \int \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\mathbf{k}'\mathbf{R}') \Psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi_n(\mathbf{k}', \mathbf{r}) d^3r = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\mathbf{k}'\mathbf{R}') \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{n, n'} = \frac{1}{N} \sum_k \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')) \delta_{n, n'} = \delta_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \delta_{n, n'}. \end{aligned}$$

Покажем теперь, что набор Функций Ванье является полным.

$$(2.5) \quad \begin{aligned} \sum_{n, R} a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) a_n(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{k, k', n, R} \exp(i\mathbf{R}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) \Psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi_n(\mathbf{k}', \mathbf{r}') = \\ &= \sum_{k, k', n} \Psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi_n(\mathbf{k}', \mathbf{r}') \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \sum_{r, n} \Psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned}$$

Функция Ванье $a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ локализована в области с характерным размером порядка периода решетки около точки $\mathbf{r} = \mathbf{R}$. Чтобы проиллюстрировать это рассмотрим случай, когда вместо кристалла рассматривается вакуум. В вакууме $\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \sim \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ и поэтому $a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \sim \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$.

Разложим волновую функцию в ряд по функциям Ванье:

$$(2.6) \Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n, \mathbf{R}} C_n(\mathbf{R}, t) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}).$$

Функция $C_n(\mathbf{R}, t)$ называется огибающей волновой функции (envelope function). Отметим, что она определена только в узлах решетки Бравэ.

Подставляя (2.6) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (2.1) получаем уравнение:

$$(2.7) \sum_{n, \mathbf{R}} C_n(\mathbf{R}, t) \hat{H}_0 a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \sum_{n, \mathbf{R}} C_n(\mathbf{R}, t) V(\mathbf{r}) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = i\hbar \sum_{n, \mathbf{R}} \frac{\partial C_n(\mathbf{R}, t)}{\partial t} a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}).$$

Умножим (2.7) на $a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}')$ и проинтегрируем по $\mathbf{r}$. Тогда (2.7) принимает следующий вид:

$$(2.8) \sum_{n, \mathbf{R}} C_n(\mathbf{R}, t) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \hat{H}_0 a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3 r + \sum_{n, \mathbf{R}} C_n(\mathbf{R}, t) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}') V(\mathbf{r}) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3 r = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(\mathbf{R}', t).$$

Рассмотрим последнюю сумму в левой части (2.8). Поскольку потенциал $V(\mathbf{r})$ слабо изменяется на масштабе изменения функций Ванье, то при интегрировании его можно положить равным постоянной величине:

$$(2.9) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}') V(\mathbf{r}) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3 r \approx V(\mathbf{R}) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}') a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3 r = V(\mathbf{R}) \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}.$$

Поэтому последняя сумма в левой части (2.8) равна $V(\mathbf{R}') C_n(\mathbf{R}', t)$. Рассмотрим теперь первую сумму в (2.8).

$$(2.10) \sum_{n, \mathbf{R}} C_n(\mathbf{R}, t) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \hat{H}_0 a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3 r = \frac{1}{N} \sum_{n, \mathbf{R}, k, k'} C_n(\mathbf{R}, t) \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{R}' - i\mathbf{k}\mathbf{R}) \times \\ \times \int \Psi_n^*(\mathbf{k}', \mathbf{r}) \hat{H}_0 \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d^3 r = \frac{1}{N} \sum_{n, \mathbf{R}, k, k'} C_n(\mathbf{R}, t) \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{R}' - i\mathbf{k}\mathbf{R}) \varepsilon_n(\mathbf{k}) \delta_{k, k'} \delta_{n, n'} = \\ = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}, k} C_n(\mathbf{R}, t) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}' - i\mathbf{k}\mathbf{R}) \varepsilon_n(\mathbf{k})$$

Покажем, что (2.10) можно представить в виде $\varepsilon_n(-i\nabla) C_n(\mathbf{R}', t)$. Для этого введем функцию $C_n(\mathbf{k}, t)$

$$(2.11) C_n(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}) C_n(\mathbf{R}, t), \quad C_n(\mathbf{R}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) C_n(\mathbf{k}, t)$$

Отметим, что $\varepsilon_n(-i\nabla) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R})$, поскольку экспонента является собственной функцией оператора ∇ . При этом мы считаем, что $\mathbf{R}$ пробегает непрерывный ряд значений. Последнее допущение справедливо, когда масштаб изменения огибающей много больше постоянной решетки.

$$\begin{aligned}
(2.12) \quad \varepsilon_n(-i\nabla)C_n(\mathbf{R}, t) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} C_n(\mathbf{k}, t) \varepsilon_n(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) = \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{R}} C_n(\mathbf{R}, t) \varepsilon_n(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{R}-\mathbf{R}))
\end{aligned}$$

Сравнивая (2.12) и (2.10) мы видим, что они полностью совпадают. Теперь уравнение Шредингера можно переписать в виде:

$$(2.13) \quad \varepsilon_n(-i\nabla)C_n(\mathbf{R}, t) + V(\mathbf{R})C_n(\mathbf{R}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(\mathbf{R}, t).$$

Как видно из (2.13) при движении в слабом внешнем поле электрон всегда находится внутри одной зоны. Эффективный гамильтониан имеет вид:

$$(2.14) \quad \hat{H}_{eff} = \varepsilon_n(-i\nabla) + V(\mathbf{R}).$$

Из (2.14) видно, что роль оператора кинетической энергии играет оператор $\varepsilon_n(-i\nabla)$. Если характерный масштаб изменения огибающей много меньше масштаба изменения внешнего поля, то в этом случае движение электрона можно рассматривать в квазиклассическом приближении. В этом случае можно ввести классическую функцию Гамильтона

$$(2.15) \quad H(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = E_n(\mathbf{p}) + V(\mathbf{R}),$$

где $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ квазиимпульс, $E_n(\mathbf{p}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})$. В этом случае уравнения движения имеют вид:

$$(2.16) \quad \frac{d}{dt}\mathbf{p} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} H(\mathbf{p}, \mathbf{R}), \quad \frac{d}{dt}\mathbf{R} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} H(\mathbf{p}, \mathbf{R})$$

Согласно (2.16) скорость электрона в n зоне равна $\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \varepsilon_n(\mathbf{p})$.

Движение в однородном электрическом поле

В качестве примера рассмотрим движение электрона в однородном электрическом поле. Сначала для рассмотрения используем квазиклассическое приближение. Пусть электрическое поле направлено вдоль оси x . Тогда $V(R) = -Fx$, где F – сила, действующая на электрон. Используя (2.16) мы видим, что скорость нарастания импульса постоянна:

$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$. То есть скорость движения электрона в квазиимпульсном пространстве постоянна. Дойдя до границы зоны Бриллюэна, электрон оказывается на противоположном ее краю и продолжает движение в x направлении. Из этих рассуждений ясно, что движение электрона периодически, а средняя скорость равняется нулю. Период движения электрона $T = 2\pi\hbar/(Fa)$ равен частному от деления размера зоны Бриллюэна $2\pi\hbar/a$ на скорость движения электрона в квазиимпульсном пространстве F . Круговую частоту этого движения иногда называют блоховской частотой $\omega = 2\pi/T = Fa/\hbar$.

Рассмотрим теперь эту задачу решая уравнение Шредингера (2.14). Гамильтониан имеет вид: $\hat{H} = \varepsilon_n(-i\nabla) - Fx$. Проще решать уравнение Шредингера для функций $C_n(k, t)$. Используя коммутационное соотношение $[k_x, x] = -i$, находим, что в k представлении оператор x имеет вид $\hat{x} = i \frac{\partial}{\partial k_x}$. Поскольку мы интересуемся энергиями и волновыми функциями стационарных состояний, будем искать решение в виде $C_n(k, t) = C_n(k) \exp(-iEt/\hbar)$. Тогда уравнение Шредингера и его решение можно записать в виде:

$$(2.15) \quad \varepsilon(k)C(k) + iF \frac{\partial}{\partial k_x} C(k) = EC(k), \quad C(k) = A \exp\left(\frac{i}{F} \int_0^{k_x} \{\varepsilon(k) - E\} dk_x\right).$$

В (2.15) A – нормировочная постоянная, а индекс n опущен, поскольку он сохраняется. Спектр находится из условия периодичности $C(k_x + 2\pi/a, k_y, k_z) = C(k_x, k_y, k_z)$, которое есть следствие того факта, что состояния, отличающиеся на вектор обратной решетки, есть одни и те же состояния. Из (2.15) получается спектр

$$(2.16) \quad E_m(k_y, k_z) = F a m + \langle \varepsilon(k_y, k_z) \rangle, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad \langle \varepsilon(k_y, k_z) \rangle = \int_0^{2\pi/a} \varepsilon(k_x, k_y, k_z) dk_x$$

Как видно из (2.16) спектр электрона в однородном электрическом поле – эквидистантный простирающийся бесконечно в область положительных и отрицательных энергий для бесконечного кристалла. Отметим, что $Fa = \hbar\omega$. Волновые функции состояний с m и $m+1$ отличаются лишь трансляцией на величину постоянной решетки.

Как видно из рассмотрения движения электрона в однородном внешнем поле в кристалле характер этого движения совершенно иной по сравнению с движением электрона вне кристалла. Поэтому электрон в кристалле иная квазичастица, нежели свободный электрон.

Понятие дырки

При рассмотрении движения электронов в почти заполненной валентной зоне удобно вести суммирование по пустым, а не по заполненным состояниям, поскольку пустых состояний намного меньше. Это можно сделать, поскольку полностью заполненная зона дает нулевой вклад в ток. Действительно, плотность тока равна:

$$(2.15) \quad \mathbf{j} = -\frac{e}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v} f(\mathbf{p}) d^3 p,$$

где $f(\mathbf{p})$ – вероятность заполнения электроном состояния с импульсом $\mathbf{p}$, $-e$ – заряд электрона. Интегрирование в (2.15) проводится по зоне Бриллюэна. Если зона полностью заполнена, то $f(\mathbf{p}) = 1$ и

$$(2.16) \quad \mathbf{j} = \frac{-e}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathbf{v} d^3 p = \frac{-e}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \varepsilon_n(\mathbf{p}) d^3 p = 0,$$

(2.16) равно нулю, поскольку на противоположных граница зоны Бриллюэна энергия одинакова. С учетом сказанного выражение для тока можно представить в виде:

$$(2.17) \quad \mathbf{j} = -\frac{e}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathbf{v} f(\mathbf{p}) d^3 p = \frac{e}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathbf{v} [1 - f(\mathbf{p})] d^3 p = \frac{e}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathbf{v} [1 - f(\mathbf{p})] d^3 p$$

Из (2.17) видно, что для вычисления тока можно суммировать только по незаполненным состояниям зоны Бриллюэна. Это обстоятельство позволяет ввести новую квазичастицу – дырку (hole). Удаление электрона из системы трактуется как добавление в систему новой квазичастицы – дырки. Нетрудно найти связь между характеристиками удаленного электрона и добавленной в систему дырки. Очевидно, что заряд, импульс, энергия, масса и спин электрона и дырки отличаются знаком. Поэтому дырка – фермион с положительным зарядом e . Химический потенциал для дырок также отличается знаком от электронного. Функция распределения дырок $f_h(p) = 1 - f(p)$. Учитывая это обстоятельство, а также то, что скорости электрона и дырки одинаковы, выражение (2.17) можно переписать в виде:

$$(2.18) \quad \mathbf{j} = \frac{e}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathbf{v}_h f_h(\mathbf{p}) d^3 p$$

Мелкие примеси в полупроводниках

Рассмотрим, что произойдет, если в кристаллах Ge или Si место «родного» атома займет атом с валентностью 5, например, атом фосфора. Очевидно, что похожая ситуация может возникнуть и в GaAs, если один из атомов подрешеток будет заменен атомом с большей валентностью. Возникает вопрос: в какой зоне будет располагаться дополнительный валентный электрон? Очевидно, что в валентной зоне, которая вся заполнена, для него нет места, и поэтому состояния с наименьшей энергией находятся в зоне проводимости. Попав в зону проводимости, дополнительный валентный электрон распространяется по всему кристаллу. Атом примеси при этом становится положительно заряженным ионом, поскольку валентные электроны «компенсируют» только заряд равный числу валентных электронов «родного» атома. Таким образом, возникает электрическое поле притяжения электрона, попавшего в зону проводимости к примесному атому.

Примесные атомы, отдающие дополнительные валентные электроны в кристалл, называются донорами. Процесс введения примесных атомов в кристалл называется легированием, а полупроводники, содержащие примеси, называются легированными полупроводниками.

Рассмотрим теперь, что произойдет, если в Ge или Si на место «родных» атомов попадает атом с валентностью 3, например, атом бора. Аналогичная ситуация имеет место и в GaAs, если в местах «родных» атомов появляются примесные атомы с валентностью меньшей на единицу. В этом случае в валентной зоне появляется одно вакантное место – дырка. Как и дополнительный электрон, дырка распространяется по всему кристаллу. Валентные электроны около примесного атома компенсируют заряд «родного» атома, поэтому примесный атом в этом случае становится отрицательно заряженным ионом и притягивает дырку. Примесные атомы, забирающие из валентной зоны электроны, называются акцепторами.

Рассмотрим теперь вопрос о потенциале, в котором двигаются электрон в присутствии донора или дырка в присутствии акцептора. Если характерный размер орбиты, много больше постоянной решетки, то можно воспользоваться методом макроскопической электродинамики и получить следующее выражение для потенциала:

$$(2.19) \quad V(r) = \pm e^2 / \kappa r ,$$

где верхний знак соответствует атому донора, а нижний – атому акцептора, κ - диэлектрическая проницаемость кристалла на нулевой частоте. Отметим, что (2.19) несправедливо на расстояниях порядка постоянной решетки от примесного атома. Разность между истинным потенциалом $U(r)$ и $V(r)$ называется потенциалом центральной ячейки. Из определения ясно, что потенциал центральной ячейки заметно отличен от нуля только вблизи примесного атома на расстояниях порядка постоянной решетки. Если размер орбиты электрона много больше постоянной решетки, то вклад от потенциала центральной ячейки можно рассматривать как возмущение. Поправку к энергии примесного состояния, обусловленную потенциалом центральной ячейки принято называть химическим сдвигом, поскольку эта поправка зависит от химической природы данного примесного центра, тогда как кулоновское взаимодействие и обусловленный им примесный спектр зависят только от величины заряда примеси.

Рассмотрим донор в GaAs. Без учета потенциала центральной ячейки гамильтониан для огибающей имеет вид:

$$(2.20) \quad H = \frac{p^2}{2m_c} - \frac{e^2}{\kappa r} + E_c$$

Очевидно, что такой гамильтониан с точностью до массы и κ совпадает с гамильтонианом, описывающим атом водорода. Поэтому дискретный спектр можно записать в виде:

$$(2.21) \quad \varepsilon = E_c - \frac{m_c e^4}{2\kappa^2 \hbar^2 n^2}$$

Радиус боровской орбиты донора равен $\kappa \hbar^2 / m_c e^2$. Очевидно, что он в $\kappa m_0 / m_c$ больше боровского радиуса атома водорода. Для GaAs величина радиуса основного состояния донора примерно равна 100 Å. Энергия ионизации донора составляет в GaAs около 5.8 мэВ и почти одинакова для атомов германия и кремния, занимающих места атомов галлия.

Примеси, локализованные состояния которых располагаются вблизи краев зон называются мелкими. Если примесные уровни располагаются глубоко в зоне, то такие примеси называются глубокими. Для описания состояния глубоких примесей нужно учитывать как вклад в волновую функцию нескольких энергетических зон и потенциал центральной ячейки.

Значительно сложнее найти спектр мелких доноров в германии и кремнии из-за существования двух масс. Такая задача может быть решена только численно. Неплохое приближение для энергии ионизации дает вариационный метод, если в качестве пробной функции выбрать функцию

$$(2.20) \quad \Psi = \sqrt{\frac{\alpha^2 \beta}{\pi}} \exp \left[-\sqrt{\alpha^2 (x^2 + y^2) + \beta^2 z^2} \right]$$

(см. книгу Б.И. Шкловский А.Л.Эфрос Электронные свойства легированных полупроводников. М. Наука 1979). Ось z направлена вдоль оси вращения эллипсоида постоянной энергии.

Примесные уровни образуются под каждой долиной. Это означает, что без учета потенциала центральной ячейки и спина, основное состояние донора в германии должно быть вырождено четырехкратно, а в кремнии – шестикратно. Учет потенциала центральной ячейки приводит к тому, что четырехкратно вырожденное состояние расщепляется на синглет (А состояние) и триплет (F состояние). В кремнии потенциал центральной ячейки расщепляет шестикратно вырожденное состояние на синглет (А –состояние), дублет (Е – состояние) и триплет (Т состояние). Основным состоянием и в германии и кремнии является синглет (с учетом спина - дублет). Вклад долин в состояния различного типа может быть найден из соображений симметрии (явный вид этого вклада можно найти в книге Г.Е. Бир, Г.Е.Пикус Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.Наука 1972).

Еще более сложной задачей является отыскание волновых функций и энергий мелких акцепторных состояний в полупроводниках с вырожденной валентной зоной, таких как Ge, Si, GaAs. В случае, когда энергия ионизации акцептора много меньше энергии спин-отщепленной зоны на локализованные состояния акцепторов можно пренебречь и уравнение Шредингера представляет систему 4 дифференциальных уравнений в частных производных. Метод решения этих уравнений в

случае почти изотропных изоэнергетических поверхностей дырок был разработан в работах Балдереша и Липари (Phys.Rev. B, v.8, 2697 (1973), v.9, 1525 (1974)). Это приближение дает хорошее описание для состояний мелких акцепторов в Ge и GaAs, а также в большинстве полупроводников A3B5.

Однако для описания состояний мелких акцепторов в кремнии это приближение не подходит, поскольку в кремнии энергия ионизации акцепторов порядка величины спин-орбитального расщепления валентной зоны и влиянием спин-отщепленной зоны на состояния акцептора пренебрегать нельзя. В этом случае уравнение Шредингера представляет собой систему 6 уравнений в частных производных. Кроме того, анизотропия валентной зоны в кремнии не является малой и её некорректно рассматривать по теории возмущений.

Из соображений симметрии можно показать, что основное состояние акцептора четырехкратно вырождено, т.е. имеет ту же кратность вырождения, что и потолок валентной зоны. Причина этого состоит в том, что волновые функции основного состояния акцептора преобразуются при преобразовании системы координат точно также как и состояния, соответствующие потолку валентной зоны (по одному и тому же неприводимому представлению точечной группы соответствующей Γ -точке зоны Бриллюэна). Доказательство этого утверждения можно найти в книге Г.Л.Бира и Г.Е.Пикуса Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках М. Наука 1972.

Следует отметить, что над спин-отщепленной зоной появляются специфические квазистационарные состояния акцептора, которые попадают в непрерывный спектр зон легких и тяжелых дырок (см. рис. 2.1). В этих состояниях волновая функция дырки состоит из локализованной части, которая сформирована состояниями спин-отщепленной зоны и делокализованной части, которая сформирована состояниями зон легких и тяжелых дырок.

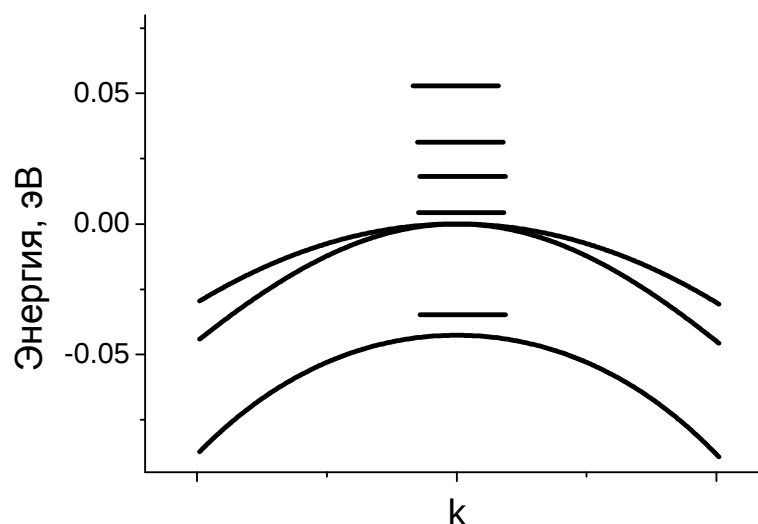


Рис. 2.1. Схематическое изображение акцепторных уровней в кремнии. Уровень, находящийся у потолка спин-отщепленной зоны является резонансным.

В таблицах 1-2 приведены значения энергии ионизации мелких примесей в Ge, Si и GaAs. Обратим внимание на следующее обстоятельство – чем меньше эффективный боровский радиус, тем больше величины химических сдвигов для данного типа примеси.

Таблица 2.1. Энергия донорных состояний в Ge, Si, GaAs. Теоретические значения получены в рамках приближения эффективной массы без учета потенциала центральной ячейки. Для кремния приведены три энергии основного состояния соответствующие синглету, дублету и триплету, а для германия две энергии, соответствующие синглету и триплету.

Полупроводник	Энергия основного состояния донора, мэВ
Si(теория)	31.27
Si (P)	45.5, 33.9, 32.6
Si (As)	53.7, 32.6, 31.2
Si(Sb)	42.7, 32.9 30.6
Ge (теория)	9.81
Ge(P)	12.9, 9.9
Ge(As)	14.17, 10.0
Ge(Sb)	10.32, 10.0
GaAs(теория)	5.79
GaAs(Si _{Ga})	5.76
GaAs(Ge _{Ga})	5.95
GaAs(Se _{As})	5.83

Таблица 2.2. Энергия акцепторных состояний в Ge, Si, GaAs. Теоретические значения получены в рамках приближения эффективной массы без учета потенциала центральной ячейки.

Полупроводник	Энергия основного состояния акцептора, мэВ
Si (теория)	31.56
Si (B)	44.5
Si (Al)	68.5
Si (Ga)	72
Ge (теория)	9.73
Ge (B)	10.47
Ge (Al)	10.8
Ge (Ga)	10.97
GaAs (теория)	26
GaAs (C _{As})	26
GaAs (Zn _{As})	30.7
GaAs (Si _{As})	34.5

Движение в слабом магнитном поле

Гамильтониан движения электрона в слабом магнитном поле для огибающей может быть найден из калибровочных соображений. Действительно, в исходном гамильтониане магнитное поле учитывается добавлением к импульсу слагаемого $e\mathbf{A}/c$ (напомним, что заряд электрона в используемых обозначениях равен $-e$):

$$(2.21) \quad H = \frac{\left(\mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2}{2m_0} + U(r) + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}$$

где $\mu_B = e\hbar/2mc$ - магнетон Бора.

Векторный потенциал слабого магнитного поля является медленно изменяющейся функцией, которая определена с точностью до градиента произвольной функции. При калибровочном преобразовании $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f$ волновая функция приобретает дополнительную фазу: $\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi(\mathbf{r}) \exp(-ief(r)/\hbar c)$. Ясно, что для блоховской волновой функции удобно полагать, что эта фаза появляется в огибающей. Из этих соображений следует, что появление магнитного поля приводит к следующему изменению гамильтониана для огибающей: $\varepsilon(\nabla) \rightarrow \varepsilon(\nabla + ie\mathbf{A}/\hbar c)$. Однако, здесь имеется трудность, с тем как понимать этот

оператор, поскольку вообще говоря операторы квазиимпульса и векторного потенциала не коммутируют. Из-за этой некоммутативности в слабых полях появляется слагаемое пропорциональное магнитному полю. Поэтому в общем случае вблизи простого экстремума гамильтониан имеет вид:

$$(2.22) \quad H = \frac{\left(\mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2}{2m_c} + U(r) + \frac{g}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H},$$

где g –фактор Ланде или g -фактор. Эта величина для свободного электрона равна 2. Для электронов вблизи дна зоны проводимости в GaAs $g=-0.4$, а для электронов в InAs $g=-12$.

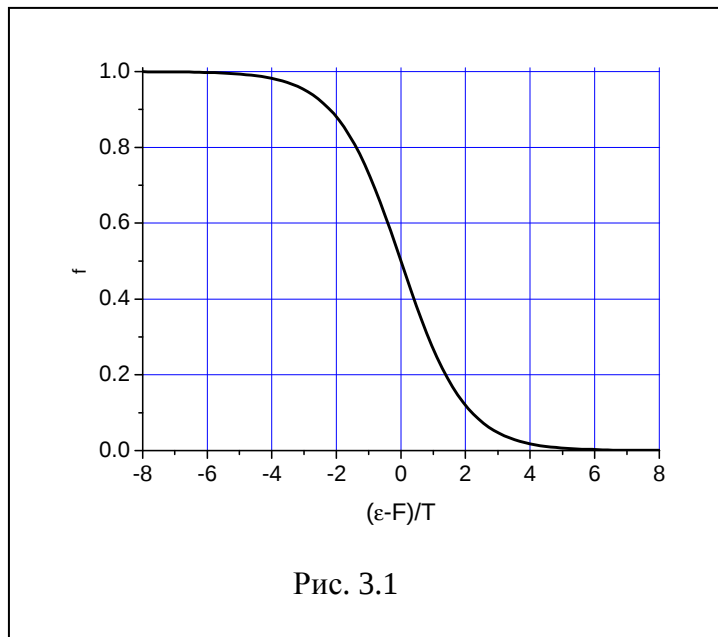
Раздел 3. Статистика электронов и дырок в полупроводниках. Нахождение химического потенциала

В этом разделе будет рассмотрен метод нахождения концентрации электронов в зоне проводимости, дырок в валентной зоне, а также концентраций носителей заряда на примесных центрах.

Электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне можно рассматривать как идеальный Ферми-газ. Это является приближением, поскольку электроны, находящиеся в зоне не проводимости взаимодействуют друг с другом а также с заряженными примесями. Однако в полупроводниках при не очень низких температурах кинетическая энергия электронов больше кулоновской энергии, поэтому электроны можно рассматривать как свободные. Для идеального Ферми-газа вероятность заполнения состояния с энергией ε при температуре T находится с помощью распределения Ферми:

$$(3.1) \quad f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - F}{T}\right)}$$

где F – химический потенциал, а температура измеряется в энергетических единицах



($T = k_B T^*$, k_B - постоянная Больцмана, T^* - температура в Кельвинах). На рис. 3.1 приведена эта зависимость.

Из рисунка хорошо видно, что наиболее быстро функция распределения Ферми изменяется в окрестности размером порядка T вблизи точки $\varepsilon = F$. В предельном случае $\varepsilon - F \gg T$ распределение Ферми переходит в распределение Максвелла:

$$(3.2) \quad f(\varepsilon) \approx \exp\left(\frac{F - \varepsilon}{T}\right)$$

В другом предельном случае $\varepsilon - F \ll T$ функция распределения имеет вид:

$$(3.3) \quad f(\varepsilon) \approx 1 - \exp\left(\frac{\varepsilon - F}{T}\right)$$

Из (3.3) видно, что в этом случае распределение дырок становится распределением Максвелла. Напомним, что энергия и хим. Потенциалы электронов и дырок отличаются знаком.

Концентрация электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне

Найдем теперь концентрацию электронов в зоне проводимости полагая, что хим. потенциал задан. Согласно статистической механике с учетом спина электрона концентрация электронов в зоне проводимости равна:

$$(3.4) \quad n = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 p}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon(p) - F}{T}\right)}$$

интегрирование в (3.4) проводится по зоне проводимости (зоне Бриллюэна). Из (3.4) видно, что для расчета концентрации необходимо знать закон дисперсии электрона в зоне проводимости $\varepsilon(p)$. Однако в полупроводниках электроны проводимости занимают лишь небольшую часть всех состояний в зоне проводимости, потому что их концентрация много меньше концентрации атомов решетки. Кроме того, характерная ширина зон составляет величину в несколько электрон-вольт, а тепловая энергия при 300 К около 26 мэВ. Эти особенности полупроводников означают, что электроны в зоне проводимости сосредоточены в окрестности ее дна, а дырки в окрестности потолка валентной зоны. Поэтому в (3.4) можно распространить интегрирование на бесконечные пределы, а для зависимости энергии электрона от импульса воспользоваться этой зависимостью около дна зоны проводимости. Найдем концентрацию электронов в полупроводнике, у которого имеется L эквивалентных долин с законом дисперсии $\varepsilon(p) = E_c + \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3}$. В этом случае:

$$(3.5) \quad n = \frac{2L}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 p}{1 + \exp\left(\frac{p_1^2}{2Tm_1} + \frac{p_2^2}{2Tm_2} + \frac{p_3^2}{2m_3T} + \frac{E_c - F}{T}\right)}$$

Для упрощения интеграла (3.5) сделаем замену переменных

$$p_1 = p_x \sqrt{m_1/m_0}, \quad p_2 = p_y \sqrt{m_2/m_0}, \quad p_3 = p_z \sqrt{m_3/m_0}.$$

В новых переменных выражение для концентрации имеет вид:

$$(3.6) \quad n = \frac{2L}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{m_0^3}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 p}{1 + \exp\left(\frac{p^2}{2Tm_0} + \frac{E_c - F}{T}\right)},$$

А выражение для энергии: $\varepsilon(p) = E_c + \frac{p^2}{2m_0}$. Введем эффективную массу плотности состояний в зоне проводимости $m_c = (m_1 m_2 m_3)^{1/3} L^{2/3}$

Подынтегральная функция в (3.6) не зависит от направления импульса, поэтому интеграл удобно вычислять в сферической системе координат. Интегрирование по углам дает множитель 4π . Полезно представить интеграл (3.6) еще и в следующем виде:

$$(3.7) \quad n = \frac{4\pi(2m_c)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \int_{E_c}^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon - E_c} d\varepsilon}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - F}{T}\right)} = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\varepsilon)}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - F}{T}\right)} d\varepsilon,$$

где $G(\varepsilon) = \frac{4\pi(2m_c)^{3/2}V}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\varepsilon - E_c} \theta(\varepsilon - E_c)$ - плотность состояний зоны проводимости, V - объем кристалла. Интеграл (3.7) может быть выражен через специальную функцию интеграл Ферми-Дирака индекса $1/2$:

$$(3.8) \quad \Phi_{1/2}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{1 + \exp(x - y)}, \quad \Phi_j(y) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{x^j dx}{1 + \exp(x - y)}$$

$$(3.9) \quad n = N_c(T) \Phi_{1/2}\left(\frac{F - E_c}{T}\right),$$

где $N_c(T) = \frac{2(2\pi m_c T)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}$ - эффективная плотность состояний в зоне проводимости.

Вторая формула (3.8) является общим определением интеграла Ферми-Дирака с любым индексом, Γ - гамма функция.

Интеграл Ферми-Дирака индекса $1/2$ имеет следующую асимптотику при $y \ll -1$:

$$(3.10) \quad \Phi_{1/2}(y) \approx \exp(y)$$

используя которую, можно найти

$$(3.11) \quad n = N_c \exp\left(\frac{F - E_c}{T}\right) \text{ при } E_c - F \gg T,$$

т.е. когда хим. потенциал находится ниже дна зоны проводимости на расстоянии большем T . Выражение (3.11) может быть непосредственно получено из (3.7), если заменить распределение Ферми на распределение Максвелла.

Концентрацию дырок в валентной зоне можно вычислить аналогично, если закон дисперсии дырок имеет вид аналогичный рассмотренному у электрона вблизи дна зоны проводимости:

$$(3.12) \quad p = N_v \Phi_{1/2}\left(\frac{E_v - F}{T}\right), \quad N_v(T) = \frac{2(2\pi m_v T)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}$$

N_v - эффективная плотность состояний валентной зон, m_v - эффективная масса плотности состояний валентно зоны. Оказывается, что выражение (3.12) остается справедливым для вырожденной валентной зоны. Покажем, что (3.12) описывает концентрацию тяжелых дырок с законом дисперсии (1.3), который перепишем в виде:

$$(3.13) \quad \begin{aligned} \varepsilon_{hh}(p) &= E_v - \frac{p^2}{2m_0} \left[A - \sqrt{B^2 + C^2 (\sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta + \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi \sin^2 \vartheta)} \right] = \\ &= E_v - \frac{p^2}{2m_0} g_{hh}(\varphi, \vartheta) \end{aligned}$$

Используя (3.13) можно найти следующее выражение для плотности состояний в зоне тяжелых дырок:

$$(3.14) \quad \begin{aligned} G_{hh}(\varepsilon) &= \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \delta(\varepsilon - \varepsilon_{hh}(\mathbf{p})) = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int p^2 dp d\Omega \delta\left(\varepsilon - E_v + \frac{p^2}{2m_0} g_{hh}(\vartheta, \varphi)\right) = \\ &= \frac{(2m_0)^{3/2} (E_v - \varepsilon)^{1/2} V \theta(E_v - \varepsilon)}{(2\pi\hbar)^3} \int \sin \vartheta d\vartheta d\varphi (g_{hh}(\vartheta, \varphi))^{-3/2} = \frac{(2m_{hh})^{3/2} (E_v - \varepsilon)^{1/2} V \theta(E_v - \varepsilon)}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned}$$

где m_{hh} - эффективная масса плотности состояний в зоне тяжелых дырок. Аналогично можно ввести эффективную массу плотности состояний в зоне легких дырок m_{lh} и эффективную массу плотности состояний валентной зоны $m_v^{3/2} = m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2}$. Плотность состояний вблизи потолка валентной зоны имеет вид:

$$(3.15) \quad G_v(\varepsilon) = \frac{(2m_v)^{3/2} (E_v - \varepsilon)^{1/2} V \theta(E_v - \varepsilon)}{(2\pi\hbar)^3}$$

Концентрация дырок:

$$(3.16) \quad p = \frac{1}{V} \int G_v(\varepsilon) \left[1 - \frac{1}{1 - \exp\left(\frac{\varepsilon - F}{T}\right)} \right] d\varepsilon$$

Из (3.16) с учетом (3.15) получается выражение (3.12).

В случае когда хим. потенциал находится в запрещенной зоне на расстоянии от потолка валентной зоны превышающем T (т.е. $F - E_v \gg T$) выражение для концентрации дырок имеет вид:

$$(3.17) \quad p = N_v \exp\left(\frac{E_v - F}{T}\right)$$

В случае, когда концентрации носителей описываются формулами (3.11) или (3.12) полупроводники называются невырожденными. Если концентрация дырок равна концентрации электронов, то в этом случае полупроводник называется собственным. Концентрации

электронов и дырок в собственном полупроводнике легко находится, поскольку собственный полупроводник является невырожденным (за исключением узкозонных полупроводников у которых ширина запрещенной зоны сравнима с тепловой энергией). Произведение концентрации электронов и дырок в собственном полупроводнике не зависит от хим. потенциала:

$$(3.18) \quad np = n_i^2 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{T}\right) \text{ т.е. } n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(\frac{E_g}{2T}\right)$$

Концентрация электронов на примесях

Найдем теперь вероятность того, что на доноре находится электрон. Для вычисления этой вероятности нельзя использовать распределение Ферми-Дирака, поскольку оно справедливо для идеального Ферми газа, в котором электроны не взаимодействуют. Электроны на доноре нельзя считать невзаимодействующими. Действительно, если на доноре находится один электрон, то разместить на доноре второй электрон с той же энергией невозможно из-за сильного кулоновского отталкивания. Рассмотрим простейший случай, когда донор не может принять второй электрон (т.е. для него не существует связанного состояния). Донор можно рассматривать как систему с переменным числом частиц. Большая статистическая сумма для него имеет вид:

$$(3.19) \quad z = \sum_n 1 + \beta_1 \exp\left(\frac{F - \varepsilon_1}{T}\right) + \dots + \beta_n \exp\left(\frac{F - \varepsilon_n}{T}\right) + \dots$$

где β_n , ε_n кратность вырождения и энергия n-го состояния. Если донор имеет водородоподобную структуру уровней, то сумма (3.19) расходится. Причина расходимости состоит в том, что возбужденные состояния занимают большой объем. В реальном кристалле, структура высоковозбужденных состояний иная по сравнению с водородоподобной. Максимальный радиус орбиты возбужденного состояния, когда его еще можно считать водородоподобным, порядка расстояния между примесями. Более высоковозбужденные состояния уже чувствуют несколько примесей и мы будем их полагать нелокализованными на одной примеси. Фактически это означает, что суммирование по n в (3.19) проводится по конечному числу состояний. Для удобства перепишем (3.19) в виде:

$$(3.20) \quad z = 1 + \beta_D(T) \exp\left(\frac{F - \varepsilon_1}{T}\right), \quad \beta_D(T) = \beta_1 + \beta_2 \exp\left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{T}\right) + \dots$$

$\beta_D(T)$ - называется фактором спинового вырождения донора. При низких температурах $\beta_D(T) \approx \beta_1$ примерно равно степени вырождения основного состояния донора. Среднее число электронов на доноре равно вероятности нахождения электрона на нем. Она может быть вычислена с использованием термодинамического потенциала $\Omega = -T \ln z$:

$$(3.21) \quad W = -\frac{\partial \Omega}{\partial F}, \quad W = \frac{\beta_D(T) \exp\left(\frac{F - \varepsilon_D}{T}\right)}{1 + \beta_D(T) \exp\left(\frac{F - \varepsilon_D}{T}\right)}$$

где $\varepsilon_D = \varepsilon_1$ - энергия основного состояния донора. Используя (3.21) можно найти концентрацию положительно заряженных доноров N_D^+ :

$$(3.21) \quad N_D^+ = \frac{N_D}{1 + \beta_D(T) \exp\left(\frac{F - \varepsilon_D}{T}\right)},$$

где N_D - концентрация доноров.

Аналогично можно найти концентрацию заряженных акцепторов N_A^- :

$$(3.22) \quad N_A^- = \frac{N_A}{1 + \beta_A(T) \exp\left(\frac{\varepsilon_A - F}{T}\right)},$$

где $\beta_A(T)$ - фактор спинового вырождения акцептора, N_A - концентрация акцепторов. Величина $\beta_A(T)$ в GaAs, Si, Ge близка к кратности вырождения основного состояния акцептора равной четырем.

Определение положения химического потенциала в полупроводниках

Положение химического потенциала в однородном полупроводнике определяется из условия электронейтральности. В общем случае это условие имеет вид:

$$(3.23) \quad n + N_A^- = p + N_D^+$$

Рассмотрим случай собственного полупроводника. Собственный полупроводник имеет очень низкую концентрацию примесей. Так что основная часть электронов в зоне проводимости появилась путем заброса из валентной зоны. В этом случае условие электронейтральности имеет вид $n = p$. Используя выражение (3.11) для концентрации электронов и (3.17) для концентрации дырок находим положение хим. потенциала:

$$(3.24) \quad F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{2} T \ln\left(\frac{m_v}{m_c}\right),$$

Из (3.24) видно, что при $T=0$ хим. потенциал в собственном полупроводнике находится в середине запрещенной зоны. Энергии краев зон зависят от температуры. Если выбрать начало отсчета энергии в середине запрещенной зоны при любой температуре, то хим. потенциал – линейная функция температуры. С ростом температуры он приближается к той зоне, в которой эффективная масса плотности состояний меньше. Это происходит потому

что для обеспечения равенства концентрации электронов и дырок необходимо чтобы хим. потенциал располагался ближе к зоне с меньшей плотностью состояний (см. рис 3.2).

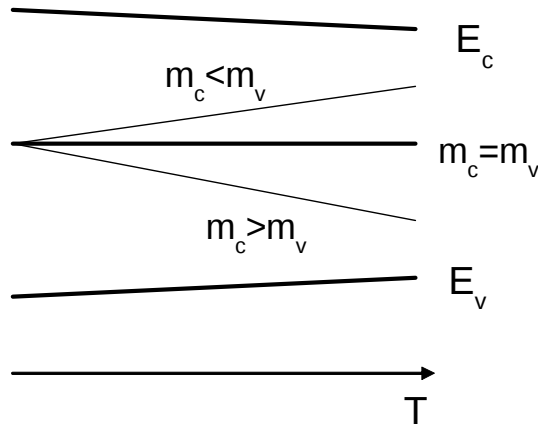


Рис. 3.2.

Определим теперь положение хим. потенциала в полупроводнике, в котором имеется только один сорт примеси. Пусть это будут доноры. Здесь возможны два случая. Если температура не очень велика, тогда электроны в зоне проводимости будут появляться в основном за счет термоионизации доноров. В этом случае концентрацией дырок можно пренебречь и условие электронейтральности имеет вид:

$$(3.25) \quad n = N_D^+$$

При достаточно высоких температурах концентрация электронов в зоне проводимости, пришедших из валентной зоны может оказаться больше, чем концентрации доноров. В этом случае полупроводник будет вести себя как собственный.

Найдем хим. потенциал, когда верно (3.25). Будем полагать, что для электронов справедлива статистика Максвелла и поэтому их концентрация описывается формулой (3.11). Выражая из (3.11) хим. потенциал через концентрацию электронов и используя для концентрации заряженных доноров выражение (3.21), получаем следующее уравнение для нахождения концентрации электронов:

$$(3.26) \quad n = \frac{N_D}{1 + n/n_1}, \quad n_1 = \frac{N_c \exp\left(\frac{\epsilon_D - E_c}{T}\right)}{\beta_D(T)}$$

Уравнение (3.26) имеет два решения. Одно из них нефизично, поскольку соответствует отрицательной концентрации. Физичное решение имеет вид:

$$(3.27) \quad n = \frac{n_1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{4N_D}{n_1}} \right)$$

Рассмотрим два предельных случая. Пусть температура настолько низка, что выполняется условие $n_1 \ll 4N_D$. Тогда из (3.27) получаем:

$$(3.28) \quad n \approx \sqrt{N_D n_1} = \sqrt{\frac{N_D N_c(T)}{\beta_D(T)}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{2T}\right),$$

где $\varepsilon_i = E_c - \varepsilon_D$ - энергия ионизации основного состояния донора. Из (3.28) видно, что при низких температурах зависимость электронной концентрации от температуры определяется в основном экспонентой с показателем равным половине энергии ионизации деленной на температуру. Поэтому, измеряя зависимость концентрации от температуры можно найти энергию ионизации донора. Используя (3.11) и (3.28) найдем зависимость хим. потенциала от температуры:

$$(3.29) \quad F = \frac{E_c + \varepsilon_D}{2} + \frac{T}{2} \ln\left(\frac{N_D}{N_c \beta_D(T)}\right)$$

Из (3.29) видно, что при $T \rightarrow 0$ хим. потенциал располагается посередине между E_c и ε_D . Поскольку $N_c \sim T^{3/2}$, производная от хим. потенциала по температуре стремится к бесконечности по логарифмическому закону. Однако интервал, в котором эта производная положительна, очень мал (см. рис. 3.3), поэтому на зависимости $F(T)$ он не виден без специального увеличения окрестности $T = 0$.

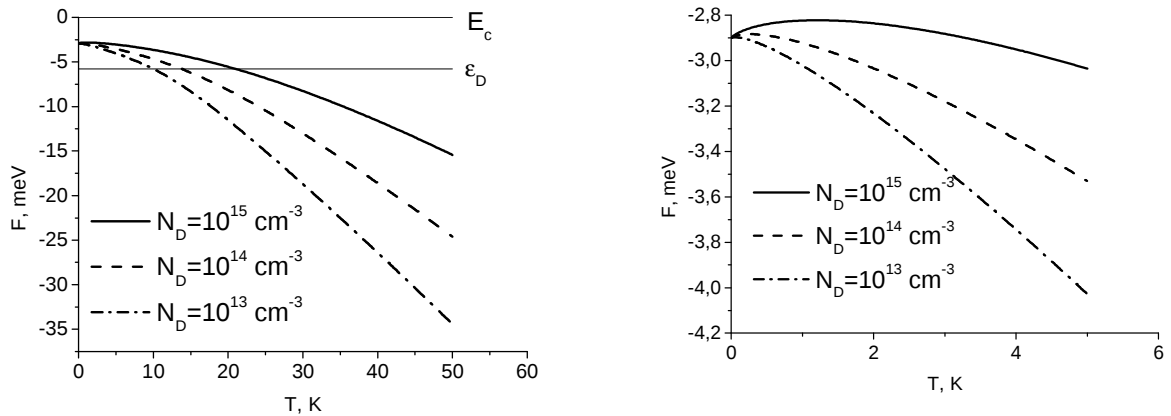


Рис. 3.3. Положение химического потенциала в некомпенсированном p-GaAs как функция от температуры. Энергия ионизации донора положена равной 5.8 мэВ. На правом рисунке показана область малых температур

Рассмотрим второй предельный случай (3.27), когда $n_1 \gg 4N_D$. Он соответствует достаточно высоким температурам, когда эффективная плотность состояний зоны проводимости велика по сравнению с концентрацией доноров, но температура должна быть не слишком велика для того чтобы концентрация дырок была много меньше концентрации

доноров. В этом случае корень в выражении (3.27) можно разложить в ряд Тейлора с точностью до членов малости $4N_D / n_1$. В этом случае

$$(3.30) \quad n \approx N_D,$$

т.е. электроны со всех доноров ушли в зону проводимости. Зависимость хим. потенциала от температуры в этом случае:

$$(3.31) \quad F = E_c + T \ln \left(\frac{N_D}{N_c} \right)$$

Отметим, что логарифм в (3.31) имеет отрицательное значение т.к. в этом предельном случае $N_c \gg N_D$.

Рассмотрим теперь случай компенсированного полупроводника. Компенсированным полупроводником, называется полупроводник, в котором имеются как доноры, так и акцепторы. Пусть $N_D > N_A$. Будем опять рассматривать случай не слишком высоких температур, при которых полупроводник ведет себя как собственный. В этом случае все акцепторы захватывают электроны с доноров и заряжаются отрицательно. Этот процесс энергетически выгоден с точки зрения термодинамики. Оставшиеся на донорах электроны имеют возможность уйти в зону проводимости. Условие электронейтральности в этом случае имеет вид:

$$(3.32) \quad n + N_A = N_D^+$$

Поступая так же, как и для получения (3.26), находим уравнение для концентрации:

$$(3.33) \quad n + N_A = \frac{N_D}{1 + n/n_1}.$$

Физичное решение этого уравнения имеет вид (нефизичное решение дает отрицательное значение для концентрации):

$$(3.34) \quad n = \frac{(N_A + n_1)}{2} \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{4n_1(N_D - N_A)}{(N_A + n_1)^2}} \right]$$

Рассмотрим опять два предельных случая. В случае низких температур $n_1 \ll N_A$ разлагая корень в (3.34) ряд Тейлора получаем:

$$(3.35) \quad n \approx \frac{n_1(N_D - N_A)}{N_A} = \frac{(N_D - N_A)N_c}{N_A} \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{T}\right)}{\beta_D(T)}.$$

Из (3.35) видно, что при низких температурах зависимость электронной концентрации от температуры определяется в основном экспонентой с показателем равным энергии ионизации деленной на температуру. На рис. 3.4 показаны зависимости логарифма концентрации от температуры для компенсированного и некомпенсированного n-GaAs.

Используя (3.35) и (3.11) находим зависимость хим. потенциала от температуры:

$$(3.36) \quad F = \varepsilon_D + T \ln \left(\frac{N_D - N_A}{N_A} \right)$$

Отметим, что при $T \rightarrow 0$ хим. потенциал равен энергии основного состояния донора. Так должно быть, поскольку при нулевой температуре хим. потенциал отделяет занятые состояния от пустых. В рассматриваемом случае при нулевой температуре часть доноров не имеет электронов, а в оставшейся части электрон занимает основное состояние донора.

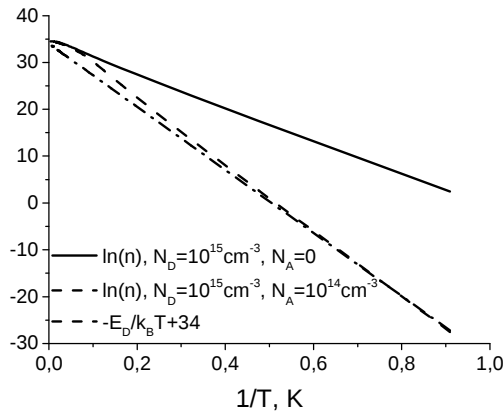


Рис. 3.4. Зависимости от обратной температуры натуральных логарифмов концентрации для компенсированного и некомпенсированного n-GaAs. Для сравнения наклона приведена функция $34 - E_D / k_B T$

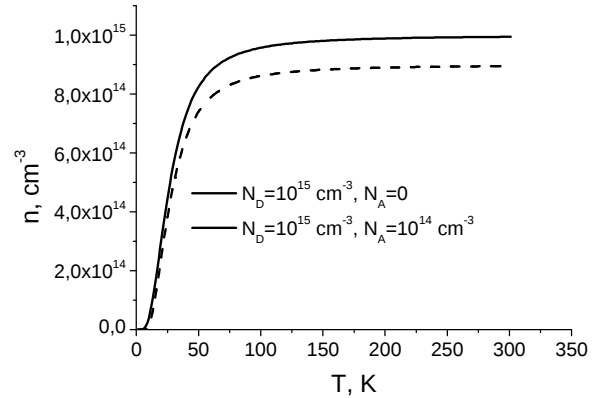


Рис. 3.5. Зависимости от температуры концентрации электронов в n-GaAs, рассчитанные с помощью (3.27), (3.34).

При высоких температурах $n_1 \gg N_D$ и корень в (3.34) опять можно разложить в ряд Тейлора. Выражение для концентрации электронов имеет вид:

(3.37) $n \approx N_D - N_A$, т.е. все оставшиеся электроны после ухода на акцепторы попадают в зону проводимости. Зависимость хим. потенциала от температуры в этом случае имеет вид:

$$(3.38) \quad F = E_c + T \ln \left(\frac{N_D - N_A}{N_c(T)} \right)$$

На рис. 3.5 приведены вычисленные по формулам (3.27) и (3.34) зависимости концентрации от температуры в компенсированном и некомпенсированном n-GaAs. Из рисунка хорошо видно, что при достаточно высоких температурах концентрация электронов слабо зависит от температуры и близка к величине $N_D - N_A$.

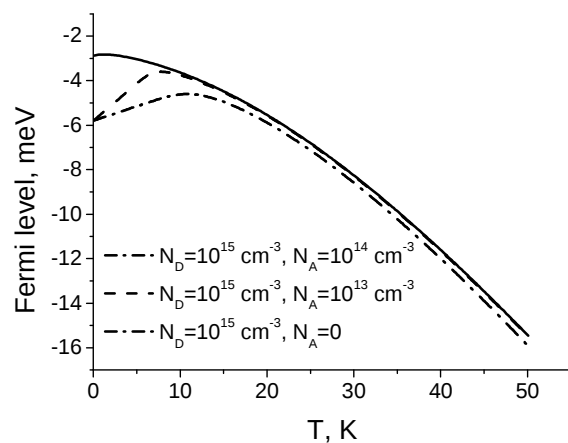


Рис. 3.6. Зависимость хим. потенциала от температуры в компенсированном и некомпенсированном n-GaAs.

На рис. 3.6 приведены зависимости хим. потенциала от температуры для компенсированного и некомпенсированного n-GaAs. Из рисунка хорошо видно, что с уменьшением компенсации область, где хим. потенциалы компенсированного и некомпенсированного полупроводников отличаются, уменьшается.

Раздел 4. Рассеяние носителей тока в полупроводниках

При рассмотрении движения электронов в кристалле в слабых полях было показано, что в постоянном слабом электрическом поле движение электронов финитно. Поэтому это рассмотрение не может объяснить протекание тока в проводящих кристаллах. Причина этого состоит в том, что мы рассматривали движение электрона в идеальном кристалле. В этом приближении нам удалось установить закон дисперсии электронов и разработать методы для его описания. Однако мы пренебрегли неидеальностью кристалла (или дефектами решетки), которая существенна для описания кристалла. Эту «неидеальность» кристалла можно описывать в рамках теории возмущений, поскольку потенциал, который она создает, мал по сравнению с самосогласованным потенциалом Хартри-Фока. Этот добавочный потенциал приводит к тому, что появляется вероятность перехода из одного состояния в другое. Такой процесс называется рассеянием.

Есть три основные причины появления добавочного потенциала, которые приводят к рассеянию:

1. Статические дефекты решетки. К ним относятся точечные дефекты: атомы примеси на местах «родных» атомов кристалла, вакансии (отсутствие атома на своем месте), междоузлия (нахождение атомов между узлами решетки). Имеются также одномерные дефекты – дислокации. Кроме того, имеются двумерные дефекты – плоскости двойникования, поверхность кристалла, межкристаллитные границы в поликристалле.
2. Динамические дефекты решетки. Эти дефекты связаны с движением атомов кристалла (фононы), или их спинов (магноны).
3. Дополнительный потенциал также возникает из-за кулоновского взаимодействия с электронами в зоне проводимости и с дырками в валентной зоне. Действительно, в самосогласованный потенциал Хартри Фока включено только кулоновское взаимодействие с электронами полностью заполненной валентной зоны.

Рассмотрим скорость изменения заполнения состояния с волновым вектором k за счет столкновений в системе, на которую не действуют внешние силы, состояния которой слабо заполнены ($f(k) \ll 1$):

$$(4.1) \quad \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} = \sum_{k'} f(k') W_{k',k} - f(k) W_{k,k'}$$

где $W_{k,k'}$ - вероятность рассеяния из состояния k в k' в единицу времени. Правая часть (9.4) называется интегралом столкновений. Равновесная функция распределения обращает интеграл столкновения в ноль, поскольку она не изменяется со временем.

Релаксационные характеристики пробной частицы

Введем теперь понятие времен релаксации энергии и импульса. Добавим к равновесной функции распределения неравновесную добавку $\delta f(k)$. Тогда изменение какой-либо макроскопической величины A (это может быть энергия, импульс или иная физическая величина), равно $\sum_k A(k) \delta f(k)$. В результате столкновений это изменение будет изменяться во времени до тех пор пока не обратится в ноль, по мере возвращения функции распределения к её равновесному значению. Скорость изменения неравновесной добавки к A равно:

$$(4.1) \quad \begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} &= \sum_k A(k) \frac{\partial f(k)}{\partial t} = - \sum_{k,k'} A(k) [\delta f(k) W_{kk'} - \delta f(k') W_{k'k}] = - \sum_k \delta f(k) \sum_{k'} [A(k) - A(k')] W_{kk'} \\ &= - \sum_k \delta f(k) R(k) \end{aligned}$$

Из (4.1) видно, что скорость изменения величины A в том случае, когда имеется возмущение функции распределения только в состоянии k равно $R(k)$. Если в качестве A выбрать вектор импульса, и положить, что закон дисперсии изотропен, то вектор R может быть направлен только вдоль импульса:

$$(4.2) \quad \mathbf{R}(\mathbf{k}) = \hbar \mathbf{k} / \tau_1(k),$$

где $\tau_1(k)$ называется временем релаксации импульса или временем транспортной релаксации. Отметим, что равновесное значение импульса равно нулю, поэтому скорость релаксации импульса пропорциональна его величине. Для квазиупругого рассеяния, когда изменение энергии в процессе рассеяния мало по сравнению с энергией частицы время релаксации импульса может быть записано в виде:

$$\frac{1}{\tau_1(k)} = \sum_{k'} W_{k'k} (1 - \cos \vartheta),$$

где ϑ угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ (угол рассеяния). Для получения этого соотношения следует иметь ввиду, что вероятность квазиупругого рассеяния для частицы с изотропным законом дисперсии зависит от модуля импульса и угла рассеяния.

Если в качестве A выбрать энергию, то

$$(4.3) \quad R(k) = [\varepsilon(k) - \varepsilon^*] / \bar{\tau}(k)$$

где $\bar{\tau}(k)$ называется временем релаксации энергии. Энергия ε^* - порядка средней тепловой энергии, но не равна ей. Отметим, что для медленных частиц энергия увеличивается, а для быстрых уменьшается.

Время жизни состояния с волновым вектором $\mathbf{k}$ обозначим $\tau(k)$,

$$(4.4) \quad \tau^{-1}(k) = \sum_{k'} W_{k,k'}.$$

Рассеяние на длинноволновых фононах

Рассмотрим рассеяние на длинноволновых оптических фононах. Волновой вектор таких фононов много меньше размера зоны Бриллюэна. В этом случае для акустических фононов циклическая частота равна $\omega = sq$, где s скорость звука. Для длинноволновых оптических фононов частоту можно считать не зависящей от волнового вектора q . Обозначим потенциал, возникающий из-за колебаний решетки через $V(r, t)$. Отметим, что по сути, этот потенциал является разностью самосогласованных потенциалов для электрона в кристалле с фононами и в идеальном кристалле, где атомы неподвижны. Пусть в кристалле имеется только одна волна колебаний с волновым вектором q . Потенциал $V(r, t)$ имеет два пространственных масштаба: постоянная решетки и длина волны колебаний решетки. Усредним потенциал $V(r, t)$ по масштабу много больше постоянной решетки, но много меньшей длины волны. Такой потенциал называется макрополем. Будем обозначать его $\bar{V}(r, t)$. По сути макрополе является потенциалом макроскопических (в смысле электродинамики сплошных сред) электрических полей, возникающих из-за колебаний атомов. Теперь потенциал $V(r, t)$ можно представить в виде суммы:

$$(4.5) \quad V(r, t) = \bar{V}(r, t) + \tilde{V}(r, t)$$

где потенциал $\tilde{V}(r, t)$ называется микрополем. Из определения этих потенциалов, очевидно, что макрополе имеет один масштаб изменения – длину волны колебаний, а микрополе два масштаба также как и потенциал $V(r, t)$. Отметим, что фонон создает сразу оба потенциала макро и микро. Поэтому вероятность рассеяния пропорциональна квадрату модуля матричного элемента суммы (4.5). Однако, как мы покажем ниже, матричные элементы макро и микро полей отличаются фазой $\pi/2$. Поэтому модуль суммы равен сумме модулей и можно независимо рассматривать рассеяние на макрополе и на микрополе. Подчеркнем, что такое упрощение возможно только для длинноволновых фононов.

Поскольку при рассеянии на длинноволновых фононах импульс электрона изменяется на величины, много меньше размеров зоны Бриллюэна. Это приводит к следующему упрощению при вычислении матричных элементов макрополя. Выберем начальные и конечные (до и после рассеяния) волновые функции электрона нормированными на 1.

$$(4.6) \quad \psi_{i,f} = \frac{\exp(i\mathbf{k}_{i,f} \mathbf{r})}{L^{3/2}} u(\mathbf{k}_{i,f}, \mathbf{r})$$

Тогда матричный элемент можно представить в виде:

$$(4.7) \quad \int d\mathbf{r} \psi_f^*(\mathbf{r}) \bar{V}(\mathbf{r}, t) \psi_i(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{L^3} \int d\mathbf{r} \exp(i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \mathbf{r}) \bar{V}(\mathbf{r}, t).$$

Выражение (4.7) можно получить разбив интеграл на элементарные ячейки и просуммировав соответствующие интегралы. При интегрировании внутри элементарной ячейки получается что экспонента и макрополе не изменяется внутри ячейки, а интеграл от быстро осциллирующих частей волновых функций равен единице из-за близости $\mathbf{k}_i$ и $\mathbf{k}_f$. Переходя от суммированию по элементарным ячейкам к интегрированию по координатам, получается соотношение (4.7).

Для микрополя матричный элемент можно переписать в аналогичном виде:

$$(4.8) \quad \int d\mathbf{r} \psi_f^*(\mathbf{r}) \tilde{V}(\mathbf{r}, t) \psi_i(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{L^3} \int d\mathbf{r} \exp(i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)\mathbf{r}) \omega(\mathbf{r}, t)$$

где потенциал $\omega(\mathbf{r}, t)$ называется деформационным потенциалом.

Как деформационный потенциал, так и макрополе должны зависеть от параметров фононной волны. Обычно полагают амплитуды колебаний атомов малыми и поэтому можно полагать что оба этих потенциала пропорциональны амплитуде фононной волны.

Здесь следует иметь ввиду одно очень важное обстоятельство. Для акустических фононов за амплитуду фононной волны принимают амплитуду смещения центра масс элементарной ячейки. Атомы внутри элементарной ячейке в акустических колебаниях колеблются синхронно. Для оптических колебаний под вектором смещения понимается изменение расстояния между атомами внутри элементарной ячейки, поскольку в этом типе колебаний центр массы элементарной ячейки остается неподвижным. Очевидно, что при любой трансляции кристалла как целого энергия электрона не изменяется. Но при стремлении волнового вектора фонона к нулю акустические колебания описывают колебания кристалла как целого. Поэтому деформационный потенциал акустических фононов пропорционален не вектору смещения фононной волны, а тензору деформации:

$$(4.8) \quad u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \right),$$

где ξ - вектор смещения. Напротив, для оптических колебаний деформационный потенциал пропорционален вектору смещения, поскольку в пределе стремления длины волны фонона к бесконечности получается кристалл со смещенными относительно друг друга подрешетками.

Рассеяние на деформационном потенциале акустических фононов (ДА- рассеяние)

Наиболее общее выражение для деформационного потенциала в случае акустических фононов имеет вид:

$$(4.9) \quad \omega(r, t) = \Xi_{ij} u_{ij}$$

где Ξ_{ij} – тензор деформационных постоянных. Очевидно, что этот тензор симметричный. Для электронов Γ - долины, $\Xi_{ij} = \Xi \delta_{ij}$ и деформационный потенциал характеризуется всего одной постоянной. В этом случае

$$(4.10) \quad \omega(r, t) = \Xi S p u = \Xi (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})$$

Отметим аналогию тензора деформации с тензором эффективных масс. Обратим, также внимание на то, что в Γ -точке деформационный потенциал пропорционален относительному изменению объема в результате деформации (шпур u равен относительному изменению объема). Выражение (4.10) можно получить из условия инвариантности деформационного потенциала для Γ - точки относительно преобразований куба, с учетом того, что u_{ij} преобразуется как произведение двух векторов $k_i k_j$. Для Δ и L -точек деформационный потенциал можно записать в виде:

$$(4.11) \quad \omega(r, t) = \Xi_u S p u + \Xi_d u_{33},$$

где ось 3 направлена вдоль оси высокого порядка.

Рассмотрим рассеяние на длинноволновых фононах в Γ -точке. Пусть в кристалле имеются фононы только с одним волновым вектором q . Проведя процедуру вторичного квантования находим оператор смещения центра масс элементарной ячейки:

$$(4.12) \quad \xi_{q,s} = \frac{\mathbf{d}_{sq}}{L^{3/2}} \left(\frac{\hbar a^3}{2M\omega_{sq}} \right)^{1/2} (\hat{b}_{sq} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + \hat{b}_{sq}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})),$$

где индекс s обозначает поляризацию, ω_{sq} – частота фонона s с волновым вектором q , M – масса элементарной ячейки, $\mathbf{d}_{sq}$ – единичный вектор поляризации (в кубическом кристалле имеется две ветви поперечных и одна ветвь продольных акустических фононов), b_{sq} , b_{sq}^+ – операторы рождения и уничтожения фононов. Используя (4.12) и (4.10) находим

$$(4.13) \quad \omega(r) = \frac{i\Xi \mathbf{q} \mathbf{d}_{sq}}{L^{3/2}} \left(\frac{\hbar a^3}{2M\omega_{sq}} \right)^{1/2} (\hat{b}_{sq} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) - \hat{b}_{sq}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}))$$

Из выражения (4.13) видно, что деформационный потенциал для электронов Γ -долины создают только продольные фононы. Для вычисления вероятности рассеяния необходимо вычислить матричный элемент оператора взаимодействия. При вычислении матричного элемента следует иметь ввиду, что в качестве волновых функций необходимо брать произведение электронной волновой функции и фононной волновой функции. Из вида оператора взаимодействия (4.13) ясно, что рассеяние приводит либо к увеличению числа фононов (испускание электроном фонона), либо к уменьшению числа фононов (поглощение электроном фонона).

Согласно квантовой механике вероятность рассеяния равна:

$$(4.14) \quad W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{\omega} | i \rangle|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f)$$

где ε_i - энергия всей системы до рассеяния (т.е. энергия электрона + энергия фононов), ε_f - энергия системы после рассеяния, k_i , k_f - волновые векторы электрона до рассеяния и после рассеяния соответственно. Используя (4.13) и (4.8) находим для процесса испускания фонона:

$$(4.15) \quad \langle f | \hat{\omega} | i \rangle = -\frac{i\Xi q}{L^{3/2}} \left(\frac{\hbar a^3}{2M\omega_{sq}} \right)^{1/2} \sqrt{N_q + 1} \delta_{k_i, k_f + q},$$

где N_q - числа заполнения фононных состояний. Если система находится в состоянии равновесия, то

$$(4.16) \quad N_q = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_q / T) - 1}.$$

Аналогичный матричный для испускания фонона имеет вид:

$$(4.17) \quad \langle f | \hat{\omega} | i \rangle = \frac{i\Xi q}{L^{3/2}} \left(\frac{\hbar a^3}{2M\omega_{sq}} \right)^{1/2} \sqrt{N_q} \delta_{k_i, k_f - q}$$

Общую формулу для вероятности рассеяния в единицу времени из состояния с волновым вектором k в состояние с волновым вектором k' можно записать в следующем виде:

$$(4.18) \quad W_{k \rightarrow k'}^{\pm q} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{k \rightarrow k'}^{\pm q}|^2 \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k') \mp \hbar\omega_q)$$

где $\varepsilon(k)$ - энергия электрона с волновым вектором k и

$$(4.19) \quad M_{k \rightarrow k'}^{\pm q} = \mp iq \frac{i\Xi}{L^{3/2}} \left(\frac{\hbar a^3}{2M\omega_{sq}} \right)^{1/2} \delta_{k, k' \pm q}.$$

В формулах (4.18) и (4.19) верхний знак относится к процессу испускания фонона, а нижний – к процессу поглощения фононов. Квадрат модуля $|M_{k \rightarrow k'}^{\pm q}|^2$ для случая ДА- рассеяния электронов Γ -долины можно представить в виде [1]:

$$(4.20) \quad |M_{k \rightarrow k'}^{\pm q}|^2 = \frac{Bq}{L^3} \delta_{k, k' \pm q}, \quad B = \frac{\hbar\Xi^2}{2\rho S},$$

$\rho = M / a^3$ - плотность кристалла, S – скорость продольного звука $\omega_q = Sq$.

Пьезоакустическое рассеяние (ПА-рассеяние)

Рассмотрим теперь рассеяние на макрополе, которое создают акустические фононы. Причиной возникновения макрополя при акустических колебаниях является пьезоэффект. Этот эффект отсутствует в Ge и Si, но имеет место во всех полупроводниках со структурой цинковой обманки. При пьезоэффекте имеется следующая связь между тензором деформации и вектором поляризации $\mathbf{P}$:

$$(4.20) \quad P_i = \beta_{ilm} u_{lm}$$

тензор третьего ранга β_{ilm} называется тензором пьезоэлектрических постоянных. Для кристаллов со структурой цинковой обманки все ненулевые компоненты этого тензора равны друг другу. А отличными от нуля являются компоненты, у которых все три индекса различны.

Макроскопический потенциал, создаваемый акустическими фононами можно найти из следующего выражения:

$$(4.21) \quad \Delta\varphi = 4\pi \text{div} \mathbf{P}$$

Используя (4.8), (4.12), (4.20) и (4.21) находим оператор потенциала, создаваемого акустической волной:

$$(4.22) \quad \hat{\varphi}(r) = \frac{4\pi}{L^{3/2}} \left(\frac{\hbar a^3}{2M\omega_{sq}} \right)^{1/2} \frac{d^{sq}_j \beta_{jlm} q_l q_m}{q^2} \left(\hat{b}_{sq} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + \hat{b}_{sq}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \right).$$

Из (4.22) видно, что пьезопотенциал создают как продольные так и поперечные фононы.

Для электронов Γ -долины усредняют величину $\frac{d^{sq}_j \beta_{jlm} q_l q_m}{q^2}$ по направлениям вектора $\mathbf{q}$ и поляризациям фононов. Усредненная величина обозначается символом β_q . Обратим внимание, что макрополе (4.22) отличается от микрополя (4.13) фазой $\pi/2$, что делает справедливым независимое рассмотрение рассеяние на двух этих потенциалах, создаваемых акустическими колебаниями.

Вероятность рассеяния на пьезоакустическом потенциале имеет вид (4.18), где

$$(4.23) \quad \left| M_{k \rightarrow k'}^{\pm q} \right|^2 = \frac{B}{qL^3} \delta_{k_i, k_f \pm q}, \quad B = \frac{\hbar (e\beta_q)^2}{2\rho S},$$

Рассеяние на макрополе оптических фононов (ПО - рассеяние)

Макрополе оптических фононов возникает только в полярных кристаллах. Поляризация для оптических колебаний пропорциональна вектору смещения. В кубических кристаллах:

$$(4.24) \quad \mathbf{P} = \gamma \boldsymbol{\xi}, \quad \gamma = \left(\frac{1}{4\pi\bar{\kappa}} \right)^{1/2} \left(\frac{\bar{M}}{a^3} \right)^{1/2} \omega_0, \quad \frac{1}{\bar{\kappa}} = \frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0}$$

где ω_0 - частота продольного оптического фонона, $\kappa_{0,\infty}$ - диэлектрическая проницаемость на нулевой частоте и частотах много больших ω_0 (но меньших $E_g / \hbar$), $\bar{M}$ - приведенная масса элементарной ячейки ($\bar{M} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$). Доказательство (4.24) можно найти в книге [2]. Оператор смещения для оптических фононов можно записать в виде [1]:

$$(4.25) \quad \xi_{q,s} = \frac{\mathbf{h}_{sq}}{L^{3/2}} \left(\frac{\hbar a^3}{2\bar{M}\omega_s} \right)^{1/2} (\hat{b}_{sq} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + \hat{b}_{sq}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})),$$

$\mathbf{h}_{sq}$ - единичный вектор поляризации. Используя (4.21), (4.24) и (4.25) находим оператор потенциала, создаваемого оптическими колебаниями решетки:

$$(4.26) \quad \hat{\phi}(r) = -\frac{4\pi i \mathbf{q} \mathbf{h}_{sq}}{L^{3/2} q^2} \left(\frac{\hbar a^3}{2\bar{M}\omega_s} \right)^{1/2} (\hat{b}_{sq} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) - \hat{b}_{sq}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}))$$

Из (4.26) видно, что макроскопический потенциал возникает только при продольных оптических колебаниях кристалла.

Для вероятности рассеяния справедлива формула (4.18), где

$$(4.27) \quad |M_{k \rightarrow k'}^{\pm q}|^2 = \frac{B}{L^3 q^2} \delta_{k_i, k_f \pm q}, \quad B = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_0}{\bar{\kappa}},$$

Рассеяние на деформационном потенциале оптических фононов (ДО-рассеяние)

Как было отмечено выше, деформационный потенциал оптических фононов пропорционален вектору смещения. В общем случае:

$$(4.28) \quad \hat{\omega}(r) = \Gamma \xi$$

Для электронов Г-долины вектор Γ равен нулю. Для L и Δ -долин вектор направлен вдоль оси высокого порядка, проходящей через эти точки. В этом случае для вероятности рассеяния можно использовать (4.18) с

$$(4.29) \quad |M_{k \rightarrow k'}^{\pm q}|^2 = \frac{B}{L^3} \delta_{k_i, k_f \pm q}, \quad B = \frac{\hbar \Gamma^2}{2\bar{\rho} \omega_0},$$

где Γ - усреднена по углам волнового вектора и поляризациям фононов, $\bar{\rho} = \bar{M} / a^3$ - приведенная плотность кристалла. Отметим, что ДО-рассеяние отсутствует в зоне проводимости кремния.

Рассеяние на междолинных фононах.

В многодолинных полупроводниках, таких как германий и кремний, возможно рассеяние на фононах, когда начальное и конечное состояния электрона находятся в окрестностях разных долин. Такое рассеяние называется междолинным. Фононы, которые участвуют в

этом рассеянии называются междолинными. Волновой вектор междолинных фононов не может считаться малым, поскольку его величина сравнима с размером зоны Бриллюэна. В этом случае потенциал, создаваемый колебаниями решетки, нельзя разделить на микрополе и макрополе, поскольку длина волны фонона сопоставима с постоянной решетки. Однако в задаче о рассеянии и в этом случае есть малые параметры. Действительно при междолинном рассеянии отличие начального и конечного волнового вектора от волновых векторов, соответствующих минимальным значениям энергий долин, в которых электроны находились до и после рассеяния, малы по сравнению с волновым вектором, связывающим долины. Поэтому часто полагают, что матричный элемент оператора взаимодействия не зависит от начального и конечного импульса электрона, кроме той его части, которая соответствует закону сохранения импульса. Следует также отметить, что закон сохранения импульса в этом случае имеет вид:

$$(4.30) \quad \mathbf{k}_i = \mathbf{k}_f \pm \mathbf{q} + \mathbf{b}$$

где $\mathbf{b}$ – любой вектор обратной решетки. В том случае, если $\mathbf{b}$ равен нулю то такой процесс рассеяния называется нормальным. Для $\mathbf{b}$, отличных от нуля, процесс рассеяния называется рассеянием с перебросом. В законе сохранения энергии в выражении для вероятности рассеяния в качестве энергии междолинного фонона берут энергию фонона $\hbar\omega_{12}$, соответствующую фонону с волновым вектором, соединяющим экстремумы долин. В кремнии имеются шесть долин. Процессы рассеяния, когда электрон переходит в долину, напротив называются g – процессами, а процесс рассеяния в другие долины называется f-процессом. Величину матричного элемента оператора взаимодействия можно найти в справочниках. В кремнии она имеет величину для разных фононов от десяти до 62 мэВ. Отметим, что для g- рассеяния величина волнового вектора превышает половину зоны Бриллюэна, и поэтому это рассеяние с перебросом.

Вероятность рассеяния в этом случае записывается в виде:

$$(4.31) \quad W_{k \rightarrow k'}^{\pm} = \frac{2\pi A^2}{\hbar L^3} \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k') \mp \hbar\omega_{12}),$$

где A – величина матричного элемента оператора взаимодействия. В том случае, если A отлична от нуля, то междолинный переход называется разрешенным. Если $A=0$, то переход называется запрещенным. Для запрещенного перехода необходимо продолжить разложение матричного элемента по начальному и конечному импульсу. Введем $\mathbf{p} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, $\mathbf{p}' = \mathbf{k}' - \mathbf{k}_0'$, где $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_0'$ соответствуют экстремумам долин, в которых электрон находился до и после рассеяния. В этом случае (4.31) принимает вид:

$$(4.32) \quad W_{k \rightarrow k'}^{\pm} = \frac{2\pi |\mathbf{B}\mathbf{p} + \mathbf{B}'\mathbf{p}'|^2}{\hbar L^3} \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k') \mp \hbar \omega_{12})$$

где $\mathbf{B}, \mathbf{B}'$ - фиксированные векторы.

В заключении этого подраздела отметим, что междолинное рассеяние важно не только для описания транспортных явлений в германии и кремнии, но важно также для описания таковых в GaAs в достаточно сильных электрических полях. В таких полях в этом полупроводнике электроны могут рассеиваться из Γ -долины в L- и X-долины.

Электрон-электронное рассеяние (e-e-рассеяние)

При рассмотрении электрон-электронных столкновений обычно ограничиваются случаем парных столкновений, поскольку тройные и столкновения большего числа электронов менее вероятны. Отметим, что в рамках зонной теории взаимодействие электрона с электронами в валентных зонах включено в самосогласованный потенциал и учитывается в законе дисперсии. Поэтому электрон, находящийся в зоне проводимости, может взаимодействовать с другими электронами зоны проводимости, либо с дырками валентной зоны. Из-за однородности кристалла потенциал взаимодействия зависит только от разности координат электронов. Поскольку мы будем рассматривать парные столкновения, волновая функция начального и конечного состояния системы зависит от переменных обоих электронов и имеет вид детерминанта Слэтера. Однако, если учесть что имеются две возможности для величины полного спина (ноль и единица) волновую функцию системы можно записать в виде:

$$(4.33) \quad \Psi_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \mp \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2))/\sqrt{2}$$

где верхний знак (-) соответствует спину 1, а нижний (+) – спину 0, индексы у волновых функций обозначают совокупность квантовых чисел, характеризующих состояние электрона (в простейшем случае это волновой вектор).

Матричный элемент рассеяния имеет вид:

$$(4.34) \quad \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Psi_{1,2'}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_{1'}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{2'}^*(\mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \mp \\ \mp \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_{2'}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{1'}^*(\mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2)$$

Первое слагаемое в (4.34) называется прямым взаимодействием, а второе – обменным. Как будет показано в дальнейшем, основной вклад в e-e рассеяние дают процессы с малым изменением импульса. Поэтому при интегрировании (4.34) по элементарной ячейке потенциал и огибающие можно считать постоянными, а интеграл от быстро осциллирующих частей положить равным единице.

Тогда матричный элемент перехода можно записать в виде:

$$(4.35) \quad M_{k_1, k_2 \rightarrow k_1', k_2'} = \frac{1}{L^3} \delta_{k_1+k_2, k_1'+k_2'} (U_{k_1-k_1'} - U_{k_2-k_1'})$$

где U_q - фурье-компонента потенциала $U(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) U_q$. Выражение (4.35)

можно получить из (4.34), если перейти к интегрированию по переменным $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ и $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, а вместо волновых функций использовать функции $L^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$.

Из (4.35) видно, что при е-е столкновениях суммарный импульс сохраняется. Кроме того выполняется следующее соотношение для вероятностей: $W_{12 \rightarrow 1'2'} = W_{1'2' \rightarrow 12}$.

Без учета экранирования кулоновского потенциала

$$(4.36) \quad U_q = \frac{4\pi e^2}{\kappa(\omega) q^2},$$

где $\kappa(\omega)$ - диэлектрическая проницаемость на частоте ω , $\hbar\omega = |\varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_1')|$. При учете экранирования:

$$(4.37) \quad U_q = \frac{4\pi e^2}{\kappa(\omega)} \frac{\lambda^2}{(1 + q^2 \lambda^2)}$$

где λ - длина экранирования. Если носителей мало и экранирование несущественно, то U_q имеет особенность при $q \rightarrow 0$. Поэтому матричный элемент прямого взаимодействия имеет особенность при $k_1 \rightarrow k_1'$, а обменного - при $k_2 \rightarrow k_1'$. Первая особенность соответствует малоугловому рассеянию, а вторая - перестановке частиц.

Если пробный электрон рассеивается на ансамбле электронов с функцией распределения $f(\mathbf{p})$, то вероятность рассеяния из k в k' равна:

$$(4.38) \quad W_{k \rightarrow k'} = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} W_{k, \mathbf{p} \rightarrow k', \mathbf{p}'} f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')]]$$

При вычислении этой вероятности особенность от обменного вклада исчезает при интегрировании по $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$, тогда как особенность от прямого вклада не затрагивается. Поэтому при слабом экранировании обменное слагаемое можно не учитывать. В этом случае естественно положить $\omega = 0$.

При рассеянии на больцмановском газе $W_{k \rightarrow k'}$ электрона с изотропным и квадратичным законом дисперсии можно найти в аналитическом виде (обменное слагаемое опущено):

$$(4.39) \quad W_{k \rightarrow k'} = \frac{1}{L^3} \frac{m e^4}{\hbar^2 \kappa^2} (2\pi m T)^{-1/2} \frac{n}{q^5} \exp \left[-\frac{\varepsilon(k')}{T} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2mT} \right]$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, $k_{\perp}$ - проекция $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ на плоскость, перпендикулярную $\mathbf{q}$. $W_{k \rightarrow k'}$ имеет сингулярность, которая приводит к расходимости обратного времени рассеяния

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_{k'} W_{k \rightarrow k'} = \sum_q W_{k \rightarrow k+q}$$

на малых q как

$$\int dq \frac{q^2}{q^5} \sim q^{-2}$$

Расходимость означает, что основную роль играют акты рассеяния на малые углы ϑ , когда изменение импульса и энергии при рассеянии мало. Поэтому $(\Delta k)_\perp = k \sin \vartheta \approx k \vartheta \approx q$, $\Delta k_\parallel = q \sin \vartheta / 2 \approx q^2 / k$, $\Delta \varepsilon = v \Delta k_\parallel \approx \varepsilon \vartheta^2$

Символы $\perp$ и $\parallel$ означают проекции относительно первоначального направления импульса. Потери импульса при малых углах пропорциональны q^2 , поэтому обратное время релаксации импульса расходится медленнее чем τ^{-1} :

$$\int dq \frac{q^2}{q^5} q^2 \sim \ln q$$

Обычно считают, что существует минимальный угол рассеяния $\vartheta_{\min}$ и соответствующая ему передача импульса $k \vartheta_{\min}$. Максимальная передача импульса $q_{\max} \sim k$.

$$\int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q} \equiv |\ln \vartheta_{\min}| = \Lambda$$

Величина Λ называется кулоновским логарифмом. Для экранированного потенциала $\vartheta_{\min} \approx 1/(k\lambda)$, так как сингулярность обрезается на $q \sim 1/\lambda$.

Выражения для времен релаксации импульса и энергии имеют следующий вид [1]:

$$(4.40) \quad \frac{1}{\tau_1(\varepsilon)} = \frac{2\mu\left(\frac{\varepsilon}{T}\right)}{\tau_{ee}}, \quad \frac{1}{\tau_{ee}} = \Lambda \sqrt{2\pi} \frac{ne^4}{\kappa^2 m^{1/2}} \varepsilon^{-3/2},$$

$$\text{где } \mu(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dx' \sqrt{x'} \exp(-x') = \begin{cases} \frac{4}{3} \sqrt{\pi} x^{3/2}, & x \ll 1 \\ 1, & x \gg 1 \end{cases}$$

$$(4.41) \quad Q(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \varepsilon^*}{\bar{\tau}(\varepsilon)} = 2 \frac{\varepsilon}{\tau_{ee}} \left[\mu\left(\frac{\varepsilon}{T}\right) - \mu'\left(\frac{\varepsilon}{T}\right) \right], \quad \varepsilon^* \approx 0.98T$$

Рассеяние на заряженных примесях

Рассеяние на простых ионизованных примесях упруго, поскольку масса примесного атома много больше массы электрона. Рассеяние на нейтральных примесях может быть неупругим (энергия забирается носителем заряда, находящимся на примеси для изменения его состояния). Мы здесь будем рассматривать только упругое рассеяние на заряженных при-

месях. Отметим, что часто этот механизм является основным для релаксации импульса при низких температурах в полупроводниках.

При описании рассеяния на примесях мы будем пренебрегать явлениями интерференции. Фактически это означает, что между примесными рассеяниями электрон должен рассеяться либо на фононе, либо на другом электроне. При низких температурах явлениями интерференции пренебрегать нельзя и наблюдаются явления, связанные с интерференцией при рассеянии на примесях. Обычно для обозначения таких явлений используются термины «слабая локализация» и «квантовые поправки к проводимости». В конце данного раздела мы кратко качественно обсудим, к чему приводит такая интерференция.

При описании рассеяния на заряженных примесях часто пользуются понятием сечения рассеяния. Рассмотрим кристалл, в котором имеется только одна примесь. Если через кристалл протекает поток электронов с плотностью J (число частиц, проходящих в единицу времени через единицу площади). Обозначим число частиц dN , рассеиваемых в единицу времени в телесный угол $d\Omega$. Введем отношение:

$$(4.42) \quad d\sigma = \frac{dN}{J}.$$

Дифференциальным сечением называется отношение:

$$(4.43) \quad \sigma(\vartheta) = \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

Для электронов с изотропным законом дисперсии сечение рассеяния зависит только от угла рассеяния и энергии рассеиваемого электрона.

Существует простая связь между вероятностью рассеяния электрона с изотропным и квадратичным законом дисперсии (что и будет предполагаться в этом разделе) в кристалле с концентрацией примесей N и дифференциальным сечением:

$$(4.44) \quad W_{k \rightarrow k'} = \frac{N}{L^3} \frac{(2\pi\hbar)^3}{m^2} \sigma(\vartheta) \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k'))$$

Для доказательства (4.44) рассмотрим идеальный случай, когда в кристалле имеется одна примесь, а все электроны имеют одинаковые импульсы. Тогда $J = n\hbar k / m = nv$. Число частиц рассеянных в телесный угол $d\Omega$ можно выразить через дифференциальное сечение рассеяния:

$$(4.45) \quad \sigma(\vartheta) n \frac{\hbar k}{m} d\Omega$$

Полное число рассеянных электронов равно полному числу электронов в кристалле, умноженному на частоту рассеяния электрона:

$$(4.46) \quad nL^3 \sum \omega_{k \rightarrow k'} = nL^6 \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{k'^2 dk' d\Omega}{(2\pi)^3} |T|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k'^2)\right)$$

где T – матричный элемент перехода, $\omega_{k \rightarrow k'}$ вероятность рассеяния на одной примеси. Интегрируя (4.46) по k' и используя (4.45) находим:

$$(4.47) \quad \frac{2\pi}{\hbar} |T|^2 = \frac{(2\pi\hbar)^3}{L^6} \frac{\sigma(\vartheta)}{m^2}$$

Для получения вероятности рассеяния в кристалле, где имеется много примесей необходимо вероятность рассеяния на одной примеси умножить на полное число примесей в кристалле NL^3 , после чего получается выражение (4.44).

Полное сечение рассеяния определяется выражением

$$(4.48) \quad \sigma_0 = \int d\Omega \sigma(\vartheta) = 2\pi \int \sigma(\vartheta) \sin(\vartheta) d\vartheta.$$

Транспортное сечение рассеяния

$$(4.49) \quad \sigma_1 = \int d\Omega \sigma(\vartheta) (1 - \cos(\vartheta))$$

Если не учитывать экранирование, то при рассеянии на ионизованных примесях можно положить энергию взаимодействия $U(r) = Ze^2 / \kappa r$, где Ze – заряд примеси. Дифференциальное сечение рассеяния электрона со скоростью v дается известной формулой Резерфорда:

$$(4.49) \quad \sigma(\vartheta) = (\rho_0 / 2)^2 \sin^{-4}(\vartheta / 2), \quad \rho_0 = \frac{Ze^2}{\kappa m v^2}$$

Для такого дифференциального сечения расходятся и σ_0 и σ_1 при малых углах. Чтобы получить конечное значение потенциала, $U(r)$ следует обрезать при больших r . Это означает, что вычисление сечений должно учитывать совокупность рассеивающих центров. Простейшим является предположение, что максимальный прицельный параметр $\rho_{\max} = \rho_0 \cotg(\vartheta_{\min} / 2)$ равен половине расстояния между примесями $N^{-1/3}$. При таком предположении:

$$(4.50) \quad \frac{1}{\tau_1(\varepsilon)} = \Lambda' \frac{\pi}{\sqrt{2m}} \frac{NZ^2 e^4 \varepsilon^{-3/2}}{\kappa^2}, \quad \Lambda' = \ln\left(\frac{4}{\vartheta_{\min}^2}\right)$$

Более последовательным является учет экранирования, свободными носителями. Тогда

$U(r) = \frac{Ze^2}{\kappa r} \exp(-r / \lambda)$, где λ – радиус экранирования. Тогда в борновском приближении:

$$(4.51) \quad \sigma(\vartheta) = (\rho_0 / 2)^2 \left(\sin^2(\vartheta / 2) + \xi^{-2} \right)^{-2}, \quad \xi = 2k\lambda$$

Получающееся транспортное время определяется (4.50) с заменой

$$\Lambda' \rightarrow \Lambda = \ln(1 + \xi^2) - \frac{\xi^2}{1 + \xi^2}$$

Формулу (4.50) с Λ называют формулой Брукса-Херринга. Можно показать, что область применимости этой формулы $\xi \gg 1$, поэтому $\Lambda \approx 2 \ln \xi - 1$ и поэтому $\tau_1 \sim \epsilon^{3/2}$. Подробности вывода этой формулы и соответствующие ссылки можно найти в книге [1].

Отметим, что учет интерференционных эффектов при рассеянии на примесях приводит к аномально большой вероятности рассеяния назад в довольно узком интервале углов $\vartheta \approx \pi$. Подробности можно посмотреть в книге [3].

В заключение этого раздела приведем таблицу из книги [4] в которой явно показана зависимость времен релаксации от энергии электрона.

	ДА _р	ДА _с	ПА _р	ПА _с	ДО	ПО	Заряж.примеси
$\frac{1}{\tau_1}$	$\epsilon^{1/2}$	ϵ	$\epsilon^{-1/2}$	ϵ^0	$\epsilon^{1/2}$	$\epsilon^{-1/2}$	$\epsilon^{-3/2}$
$\frac{1}{\bar{\tau}}$	$\epsilon^{1/2}$	$\epsilon^{1/2}$	$\epsilon^{-1/2}$	$\epsilon^{-1/2}$	$\epsilon^{-1/2}$	$\epsilon^{-3/2}$	-

Индекс р для рассеяния на акустических фононах означает, что числа заполнения этих фотонов велики $N_q \approx \hbar \omega_q / T \gg 1$. В этом случае рассеяние называется рассеянием на равно распределенных фононах. Индекс с означает, что числа заполнения фотонов равны нулю и возможно рассеяние только за счет спонтанного испускания фононов. Отметим, что выражения, приведенные для рассеяния на оптических фононах справедливы только тогда, когда рассеяние квазиупруго, т.е. для электронов с энергиями много большими энергии оптического фонона.

[1] В.Ф.Гантмахер, И.Б.Левинсон Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М. Наука

[2] О.Маделунг Теория твердого тела. М. Наука 1980.

[3] В.Ф.Гантмахер Электроны в неупорядоченных средах М.: Физматлит, 2003

[4] Ю.К.Пожела Плазма и токовые неустойчивости в полупроводниках.

Раздел 5. Линейные процессы переноса в полупроводниках

Для нахождения электропроводности, коэффициентов диффузии и других кинетических коэффициентов в полупроводниках обычно решают кинетическое уравнение Больцмана для функции распределения $f(\mathbf{p}, \mathbf{r})$. Мы будем подразумевать под функцией распределения плотность вероятности электрона находится в точке $\mathbf{r}$ с импульсом $\mathbf{p}$. Уравнение Больцмана можно записать в виде:

$$(5.1) \quad \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$$

где первый член $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F$ соответствует изменению функции распределения $f(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ вследствие действия внешних сил $\mathbf{F}$, обусловленных электрическими, магнитными и температурными полями, а член $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$ - вследствие столкновений. Концентрации n и плотность тока $\mathbf{j}$ можно следующим образом выразить через f :

$$(5.2) \quad n(\mathbf{r}) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p f(\mathbf{p}, \mathbf{r}), \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \mathbf{v}$$

Уравнение Больцмана представляет собой уравнение непрерывности в шестимерном фазовом пространстве. Слагаемое, связанное с действием сил в (5.1) имеет вид:

$$(5.3) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_F = \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f + \mathbf{F} \nabla_{\mathbf{p}} f$$

где $\mathbf{F} \nabla_{\mathbf{p}} f$ характеризует изменение f вследствие ускорения электронов силой $\mathbf{F}$ (дивергенция потока в пространстве импульсов), а $\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f$ соответствует изменению f за счет прихода и ухода электронов в координатном пространстве (дивергенция потока в координатном пространстве). В равновесии, когда нет никаких потоков функция распределения равна функции распределения Ферми-Дирака:

$$(5.4) \quad f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) + U(\mathbf{r}) - F}{T}\right)}$$

где $U(\mathbf{r})$ - потенциальная энергия, $\varepsilon(\mathbf{p})$ - кинетическая энергия. Наличие в (5.3) слагаемого с пространственной производной означает нелокальность в пространстве координат по отношению к электрическому полю. При определенных условиях этой нелокальностью можно пренебречь. Рассмотрим условия, когда задача локальна.

Локальная аппроксимация означает, что координатная и временная зависимости кинетических характеристик системы (плотность тока) входят только через мгновенное и локальное значение той или иной макроскопической величины (поле, концентрация). При наличии неравновесной во времени и пространстве неоднородности, вызванной действием электрического поля, предположение о локальности оправдывается, если такие величины как концентрация частиц, напряженность электрического поля и т.д. мало изменяются за время свободного пробега и на длине свободного пробега. Если рассматривать зависимость плотности дрейфового тока от электрического поля, то в этом случае необходимо сравнивать длину неоднородности электрического поля l_0 с длиной рассеяния импульса. Кроме того, для того чтобы воздействие поля на систему можно было рассматривать в линейном приближении необходимо, чтобы поле слабо влияло на среднюю кинетическую энергию электронов. Для этого необходимо, чтобы длина l_E , на которой электрон набирает энергию порядка T была много меньше длины на которой происходит релаксация энергии. При выполнении этих условий функция распределения электронов в данной точке $\mathbf{r}$ определяется полем в этой точке, а её отклонение от равновесной пропорционально величине поля. Далее в этом разделе мы будем рассматривать именно такой случай. При выполнении указанных условий в кинетическом уравнении Больцмана можно пренебречь пространственными производными.

Интеграл столкновений в общем случае имеет вид:

$$(5.5) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p' \{ W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})] - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')] \}$$

здесь $W(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ вероятность рассеяния электрона из $\mathbf{p}'$ в $\mathbf{p}$. Как будет показано при рассмотрении принципа детального равновесия, при квазиупругом рассеянии $W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ так что

$$(5.6) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p' \{ W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) [f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})] \}$$

Как видно из (5.5) и (5.6) кинетическое уравнение является интегро-дифференциальным уравнением и его решение в общем случае является довольно сложной задачей. В настоящее время хорошо разработаны численные методы решения этого уравнения. Аналитическое решение уравнения Больцмана можно найти в редких случаях таких, например, когда электрон с квадратичным и изотропным законом дисперсии рассеивается на деформационном потенциале акустических фононов. Для квазиупругого рассеяния уравнение Больцмана можно свести к дифференциальному виду. Запишем неравновесную функцию распределения в виде:

$$(5.7) \quad f = f_0 + f_1, \quad f_1 \ll f_0$$

При квазиупругом рассеянии столкновительный член можно записать в виде:

$$(5.8) \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = - \frac{f_1(\mathbf{p})}{\tau_1(p)}$$

где $\tau_1(p)$ - время релаксации импульса:

$$(5.9) \quad \frac{1}{\tau_1(p)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int d^3 p' W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \{1 - \cos(\vartheta)\},$$

где ϑ - угол между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$. Для доказательства (5.8) заметим, что в изотропной модели $f_1(\mathbf{p}) = \mathbf{p} \xi g(\varepsilon)$, где вектор ξ зависит только от внешних сил (см. (5.12)). Для квазиупругого рассеяния $W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = W(p, \cos \vartheta)$. Без нарушения общности ось z можно направить вдоль импульса $\mathbf{p}$. Тогда

$$(5.10) \quad \begin{aligned} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p' \{W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) [f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})]\} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p' \{W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) [f_1(\mathbf{p}') - f_1(\mathbf{p})]\} = \\ &= g(\varepsilon) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \xi \int d^3 p' \{W(p, \cos \vartheta) [\mathbf{p}' - \mathbf{p}]\} = -g(\varepsilon) \frac{\mathbf{p}}{\tau_1(p)} \xi = - \frac{f_1(\mathbf{p})}{\tau_1(p)} \end{aligned}$$

При выводе (5.10) использовалось выражение (4.2) и выражение для времени релаксации импульса при квазиупругом рассеянии, приведенное в разделе 4 после выражения (4.2).

В этом приближении, которое часто называют приближением времени релаксации, кинетическое уравнение имеет вид:

$$(5.11) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{f - f_0}{\tau_1(p)}$$

Рассмотрим, случай воздействия на систему однородного, изменяющегося во времени электрического поля $E(t) = E \exp(-i\omega t)$. В этом случае для электронов $\mathbf{F}(t) = -e\mathbf{E}(t)$ и

$$(5.12) \quad f_1(\mathbf{p}) = \frac{\tau_1(\mathbf{p}) e \mathbf{E}(t)}{1 + i\omega \tau_1(\mathbf{p})} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\tau_1(\mathbf{p}) e \mathbf{E}(t) \mathbf{v}}{1 + i\omega \tau_1(\mathbf{p})} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Используя (5.12) и (5.2) находим выражение для проводимости:

$$(5.13) \quad \sigma(\omega) = \frac{e^2 n}{m} \left\langle \frac{\tau_1(p)}{1 - i\omega \tau_1(p)} \right\rangle,$$

где скобки означают следующее усреднение:

$$(5.14) \quad \langle g \rangle = - \frac{2}{3} \frac{\int g \varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d^3 p}{\int f_0 d^3 p},$$

В полупроводниках часто проводимость представляют в виде $\sigma = e\mu n$, где величина μ называется подвижностью. Подвижность измеряется экспериментально и является важной

характеристикой полупроводника. Интересно проанализировать зависимость подвижности от температуры в невырожденных полупроводниках для постоянного во времени электрического поля. Для невырожденных полупроводников $f_0 = \exp((F - \varepsilon)/T)$. Используя (5.14) можно показать, что для случая степенной зависимости времени релаксации импульса от энергии $\tau_1(\varepsilon) \sim \varepsilon^\alpha$ $\mu \sim T^\alpha$ (величины α приведены в таблице в конце раздела 4). Это обстоятельство позволяет с помощью измерений зависимости подвижности от температуры устанавливать основные механизмы рассеяния в определенных температурных интервалах.

Найдем теперь ток в случае, когда кроме электрического поля имеется еще и магнитное. Рассмотрим случай, когда поля не зависят от времени и являются однородными. В этом случае $\mathbf{F}(t) = -e\mathbf{E}(t) - e[\mathbf{v}\mathbf{H}]/c$. Нетрудно видеть, что вклад от магнитного поля в первом порядке теории возмущений равен нулю. Поэтому удобно воздействие электрического поля на функцию распределения учитывать по теории возмущений, а магнитного – точно. В этом случае уравнение для f_1 имеет вид:

$$(5.15) \quad -e\mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}] \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f_1}{\tau_1}$$

При получении (5.15) было учтено, что $\frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}] \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}] \mathbf{p} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = 0$. Решение (5.15) удобно искать в виде: $f_1 = \mathbf{v}\Psi \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$, где вектор Ψ является функцией от энергии. Из (5.15) получается следующее уравнение для Ψ :

$$(5.16) \quad -e\mathbf{E} - \frac{e}{cm} [\mathbf{H}\Psi] = -\frac{\Psi}{\tau_1}$$

Умножая (5.16) на $\mathbf{H}$ векторно и скалярно можно найти выражение для вектора Ψ , используя которое можно написать следующее выражение для f_1 :

$$(5.17) \quad f_1 = \frac{\tau_1 \mathbf{v} \left\{ e\mathbf{E} - \frac{e^2 \tau_1}{cm} [\mathbf{E}\mathbf{H}] + \frac{e^3 \tau_1^2}{(cm)^2} \mathbf{H}(\mathbf{E}\mathbf{H}) \right\}}{1 + \omega_c^2 \tau_1^2} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon},$$

где $\omega_c = \frac{eH}{mc}$ - циклотронная частота. Если ось z направить вдоль магнитного поля тогда

$j_i = \sigma_{ij} E_j$, тензор проводимости имеет вид:

$$(5.18) \quad \sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \sigma_{xx} &= \sigma_{yy} = \frac{e^2 n}{m} \left\langle \frac{\tau_1}{1 + \omega_c^2 \tau_1^2} \right\rangle \\ \sigma_{xy} &= -\sigma_{yx} = -\frac{e^2 n}{m} \left\langle \frac{\omega_c \tau_1^2}{1 + \omega_c^2 \tau_1^2} \right\rangle, \\ \sigma_{zz} &= \frac{e^2 n}{m} \langle \tau_1 \rangle \end{aligned}$$

Отметим, что направление тока не совпадает с направлением электрического поля (за исключением случая, когда электрическое и магнитное поля направлены в одну сторону). Причина этого – сила Лоренца.

Диффузионно-дрейфовое приближение. Соотношение Эйнштейна

При наличии градиентов концентрации и электрического поля плотность тока электронов записывается в виде:

$$(5.19) \quad \mathbf{j}_n = e\mu_n n \mathbf{E} + eD_n \nabla n,$$

где D_n называется коэффициентом диффузии электронов, а проводимость электронов представлена в виде $\sigma_n = e\mu_n n$, n – концентрация электронов. Величина μ_n называется подвижностью электронов. Аналогичное выражение для плотности тока дырок имеет вид:

$$(5.20) \quad \mathbf{j}_p = e\mu_p p \mathbf{E} - eD_p \nabla p$$

где μ_p , D_p – подвижность и коэффициент диффузии дырок.

Слагаемое пропорциональное градиенту концентрации называется диффузионной частью плотности тока, а слагаемое пропорциональное электрическому полю – дрейфовой частью плотности тока. Часто для обозначения этих частей используются термины дрейфовый и диффузионный ток. Отметим, что диффузионное слагаемое пропорционально градиенту концентрации лишь в том случае, когда градиент мал. По сути дела (5.19) и (5.20) представляют собой первые члены разложения плотности тока по электрическому полю и градиенту концентрации.

Коэффициенты диффузии можно найти, решая кинетическое уравнение Больцмана, аналогично тому, как это было сделано для вычисления проводимости. Отметим, что и диффузия и проводимость обусловлены столкновениями электронов. Оказывается можно найти связь между этими величинами из общих соображений. Для этого рассмотрим электроны в неоднородно легированном полупроводнике, в котором в равновесии ток отсутствует, но имеются и электрическое поле и градиент концентрации, такие, что дрейфовый и диффузионный токи равны по абсолютной величине и противоположны по направлению. Предположим, что в полупроводнике работает статистика Максвелла-Больцмана. Для

этой статистики $n(r) = n_0 \exp[(F + e\varphi(r))/T]$. Поэтому $\nabla n = -enE/T$. Подставляя это в (5.19) и приравнявая плотность тока нулю, находим:

$$(5.21) \quad \mu_n = \frac{eD_n}{T}.$$

Соотношение (5.21) называется соотношением Эйнштейна для случая статистики Максвелла-Больцмана. Обобщим (5.21) на случай произвольной статистики. Для этого заметим, что в равновесии концентрация электронов зависит от координаты через переменную $\xi(\mathbf{r}) = (F + e\varphi(\mathbf{r}))/T$. В этом случае

$$(5.22) \quad \nabla n = -\frac{eE}{T} \frac{\partial n}{\partial \xi}$$

Подставляя (5.22) в (5.19) и приравнявая плотность тока нулю, находим:

$$(5.23) \quad \mu_n = \frac{eD_n}{T} \frac{\partial \ln(n)}{\partial \xi}$$

Отметим, что соотношения Эйнштейна (5.21) и (5.23) справедливы для систем находящихся вблизи состояния равновесия, когда внешнее воздействие на них можно рассматривать как малое возмущение.

Раздел 6. Неравновесные носители в полупроводниках

В полупроводниках, в отличие от металлов, под влиянием внешних воздействий (освещения, электрического тока в неоднородных структурах и др.) концентрация электронов и дырок могут изменяться на много порядков. Это приводит к ряду физических явлений, которые лежат в основе действия многих полупроводниковых приборов. Носители заряда, появившиеся в результате внешних воздействий на полупроводник, часто называют неравновесными носителями. Прежде чем приступить к описанию появления и исчезновения этих носителей в полупроводниках, а также их движения, рассмотрим принцип детального равновесия. Этот принцип гласит, что в равновесии для любой пары состояний справедливо следующее утверждение: поток электронов из первого состояния во второе равен потоку электронов из второго состояния в первое. Отметим, что этот принцип справедлив для подавляющего большинства известных физических систем, но не для всех. Для систем, которые мы будем рассматривать, он справедлив. Этот принцип позволяет установить соотношения между вероятностями перехода $W_{1 \rightarrow 2}$ и $W_{2 \rightarrow 1}$. Действительно согласно принципу детального равновесия:

$$(6.1) \quad W_{1 \rightarrow 2} f_0(\varepsilon_1)[1 - f_0(\varepsilon_2)] = W_{2 \rightarrow 1} f_0(\varepsilon_2)[1 - f_0(\varepsilon_1)]$$

где $f_0(\varepsilon)$ - равновесная вероятность заполнения состояния с энергией ε . Если состояния 1 и 2 принадлежат непрерывному спектру, то $f_0(\varepsilon)$ - функция распределения Ферми-Дирака. Отметим, что если $\varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $W_{2 \rightarrow 1} = W_{1 \rightarrow 2}$, поскольку вероятность заполнения состояний в термодинамическом равновесии определяется только их энергией. В том случае, если работает статистика Максвелла-Больцмана $f_0(\varepsilon_{1,2}) \ll 1$ и из (6.1) находим простую связь между $W_{1 \rightarrow 2}$ и $W_{2 \rightarrow 1}$:

$$(6.2) \quad W_{2 \rightarrow 1} = W_{1 \rightarrow 2} \exp\left(\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{T}\right).$$

Время жизни неравновесных носителей

Рассмотрим однородный полупроводник достаточно большого объема, такой чтобы влиянием поверхности на его свойства можно пренебречь. Пусть под воздействием внешнего воздействия в единице объема в единицу времени возникает g_n электронов проводимости и g_p дырок в валентной зоне. Обозначим через R_n темп исчезновения электронов из зоны проводимости, а через R_p - дырок. Если в полупроводнике нет тока, а генерация однородна по объему, то изменение во времени концентрации неравновесных электронов δn и дырок δp определяется уравнениями:

$$(6.3) \quad \frac{d\delta n}{dt} = g_n - R_n, \quad \frac{d\delta p}{dt} = g_p - R_p.$$

Отметим, что $g_{n,p}$ обозначают генерацию, обусловленную только внешним воздействием, и не включают «тепловые» переходы. Последние учитываются в величинах $R_{n,p}$, которые представляют собой разности между темпом рекомбинации и темпом обратной тепловой генерации:

$$(6.4) \quad R_n = r_n - g_{nT}, \quad R_p = r_p - g_{pT}.$$

Для количественного описания кинетики неравновесных носителей применяется понятие среднего времени жизни неравновесных электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне, которые определяются следующими выражениями:

$$(6.4 \text{ a}) \quad R_n = \frac{n - n_0}{\tau_n}, \quad R_p = \frac{p - p_0}{\tau_p}.$$

Из физического смысла ясно, что $r_n \sim n$ и $r_p \sim p$. Тогда из (6.4) получаем: $g_{nT} = n_0 / \tau_n$, $g_{pT} = p_0 / \tau_p$. Таким образом, времена жизни определяют темп тепловой генерации. В общем случае, времена жизни зависят от концентрации неравновесных носителей. Например, при межзонной рекомбинации в собственном полупроводнике (или в том случае, когда концентрация неравновесных дырок много больше концентрации равновесных) $1/\tau_n \sim \delta p$. Если же в полупроводнике концентрация равновесных дырок много больше концентрации неравновесных дырок, то τ_n можно считать независимым от δp . В том случае, когда времена жизни можно считать независимыми от концентрации неравновесных носителей решения уравнений (6.3) легко найти для любой зависимости генерации от времени. Например, если

$$(6.5) \quad g_n(t) = \begin{cases} g_n, & 0 < t < t_1 \\ 0, & t < 0, \quad t > t_1 \end{cases},$$

то решение имеет вид:

$$(6.6) \quad \delta n(t) = \begin{cases} g_n \tau_n (1 - \exp(-t/\tau_n)), & 0 < t < t_1 \\ g_n \tau_n (1 - \exp(-t_1/\tau_n)) \exp(-[t - t_1]/\tau_n) \theta(t - t_1), & t > t_1 \end{cases}$$

На рис. 6.1 изображены эти зависимости.

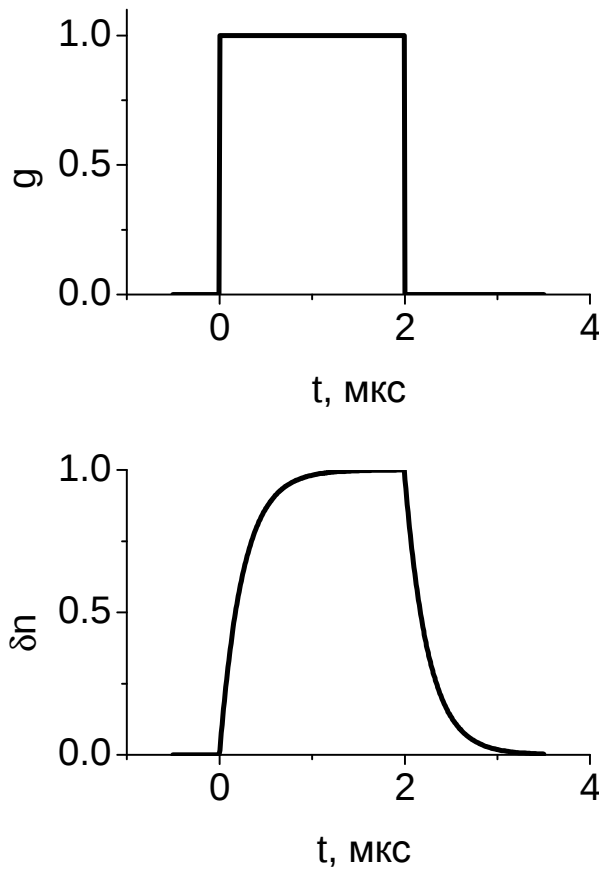


Рис.6.1

Уравнение непрерывности

При наличии потоков электронов и дырок в полное изменение концентрации неравновесных носителей дает вклад слагаемое пропорциональное $\text{div} \mathbf{j}_{n,p}$, которые представляют разность втекающих и вытекающих потоков частиц в данный элемент пространства. Уравнения непрерывности для электронов и дырок с учетом генерации и рекомбинации имеют вид:

$$(6.7) \quad \frac{\partial n}{\partial t} - \frac{\text{div} \mathbf{j}_n}{e} = g_n - \frac{\delta n}{\tau_n}, \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\text{div} \mathbf{j}_p}{e} = g_p - \frac{\delta p}{\tau_p},$$

где

$$(6.8) \quad \mathbf{j}_n = e\mu_n n \mathbf{E} + eD_n \nabla n, \quad \mathbf{j}_p = e\mu_p p \mathbf{E} - eD_p \nabla p.$$

Плотность заряда: $\rho = e(p + p_t - n - n_t)$, p_t , n_t - концентрации дырок и электронов, находящихся на локальных центрах. Если добавить к (6.7), (6.8) уравнение Максвелла:

$$(6.9) \quad \text{div} \mathbf{E} = \frac{4\pi e}{\kappa} (p + p_t - n - n_t),$$

то получится полная система уравнений, определяющая n и p . Отметим, что для полной плотности заряда ρ справедливо обычное уравнение непрерывности:

$$(6.10) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p) = 0,$$

поскольку выполняется закон сохранения заряда. Отсюда следует что

$$(6.11) \quad -\frac{\partial(p_t - n_t)}{\partial t} = g_p - \frac{\delta p}{\tau_p} - g_n + \frac{\delta n}{\tau_n}.$$

Изменение концентрации электронов и дырок n и p за счет токов характеризуется временами максвелловской релаксации $\tau_M = \kappa / 4\pi\sigma$ (σ - полная проводимость), а за счет генерации и рекомбинации - временами $\tau_{n,p}$. Обычно $\tau_M \ll \tau_{n,p}$ в объеме полупроводника. Поскольку время максвелловской релаксации определяет время установления зарядовой нейтральности соотношение такое соотношение времен означает, что $\delta p \approx 0$, т.е. выполняется условие квазинейтральности (имеется ввиду однородный полупроводник). Отметим, что уравнение непрерывности (6.10) можно записать в виде:

$$(6.12) \quad \text{div}\left(\mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p + \frac{\kappa}{4\pi} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\right) = 0.$$

Третье слагаемое в (6.12) есть ток смещения, поэтому условие квазинейтральности выполняется, если током смещения можно пренебречь по сравнению с конвекционным током. В том случае, если $\delta n_t, \delta p_t \ll \delta n, \delta p$ и генерация неравновесных носителей происходит за счет переходов зона-зона ($g_n = g_p$) из условия $\delta n \approx \delta p$ следует $\tau_n = \tau_p$.

Фотопроводимость

Простейший способ создания неравновесных носителей состоит в освещении полупроводника. Если энергия кванта больше ширины запрещенной зоны, то неравновесные электроны и дырки образуются за счет перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости при поглощении фотона. При этом изменяется число носителей тока и изменяется проводимость полупроводника. Изменение проводимости полупроводника вследствие воздействия на него света называется фотопроводимостью. При наличии примеси в полупроводнике фотопроводимость может возникать и при энергии фотона меньшей ширины запрещенной зоны за счет электронов или дырок с примесей (примесная фотопроводимость). При поглощении света электрон и дырка рождаются с определенной кинетической энергией, из-за превышения энергии фотона ширины запрещенной зоны. За время релаксации энергии носители термализуются. Отметим, что в большинстве полупроводников время термализации носителей много меньше времен жизни неравновесных носителей (за

исключением низких температур $T < 20\text{K}$), поэтому прежде чем рекомбинировать носители термализуются. По этой причине обычно подвижность неравновесных носителей слабо отличается от подвижности равновесных носителей. Тогда изменение проводимости:

$$(6.13) \quad \delta\sigma = e(\mu_n \delta n + \mu_p \delta p),$$

$$(6.14) \quad \frac{d\delta\sigma}{dt} = e(\mu_n + \mu_p)g - \frac{\delta\sigma}{\tau_{pc}}, \quad \frac{1}{\tau_{pc}} = \left(\frac{\mu_p \delta p + \mu_n \delta n}{\mu_p \delta p / \tau_p + \mu_n \delta n / \tau_n} \right)^{-1},$$

τ_{pc} - время релаксации фотопроводимости.

Для наблюдения фотолюминесценции обычно используется «вертушка» - металлический диск с одним или несколькими отверстиями, насаженный на вал электромотора. «Вертушка» используется для создания переменной интенсивности света на полупроводнике, поскольку свет от источника света может попасть на образец, только через отверстие в «вертушке» (см. рис.6.2). На освещаемый полупроводник подается постоянное напряжение через резистор. Напряжение на резисторе через усилитель подается на осциллограф. Типичная наблюдаемая зависимость фотопроводимости от времени показана на рис. 6.3.

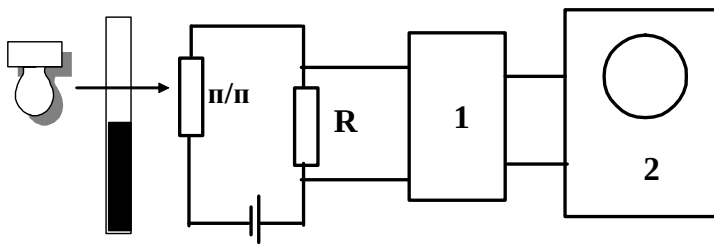


Рис. 6.2

Схема наблюдения фотопроводимости, п/п - полупроводник, 1 –усилитель, 2- осциллограф

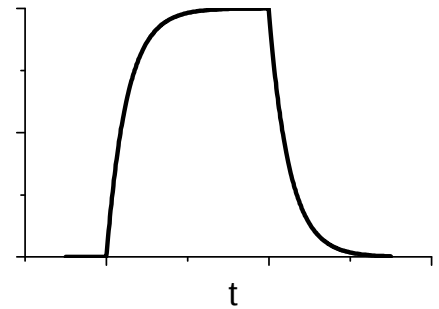


Рис.6.3

Типичный сигнал фотопроводимости.

Квазиуровни Ферми

В термодинамически неравновесном состоянии уже не существует единого уровня Ферми и $np \neq n_i^2$. Однако, следуя Шокли, можно обобщить соотношения статистики и на неравновесные состояния, если вместо уровня Ферми ввести формально новые величины – квазиуровни Ферми. Это можно сделать, когда времена термализации носителей внутри зоны много меньше времен рекомбинации. Тогда распределения электронов в зонах можно представить в виде распределения Ферми-Дирака, но с разными уровнями Ферми для валентной зоны и зоны проводимости. Например, для электронов в зоне проводимости:

$$(6.15) \quad f_n = \left(1 + \exp \left(\frac{\varepsilon - F_n}{T} \right) \right)^{-1}$$

и для дырок:

$$(6.16) \quad f_p = \left(1 + \exp \left(\frac{F_v - \varepsilon}{T} \right) \right)^{-1}.$$

Таким образом, появление неравновесных носителей можно описать как расщепление уровня Ферми на два квазиуровня. Отметим, что если $F_n - F_v > E_g$, то вероятность заполнения электронами дна зоны проводимости больше вероятности заполнения потолка валентной зоны. В этом случае говорят об инверсной заселенности зон. Как будет показано в следующем разделе для усиления света полупроводником (отрицательного поглощения) необходимо выполнение условия инверсной населенности зон.

Амбиполярная диффузия и амбиполярный дрейф

Рассмотрим как диффундируют неравновесные носители. Если поверхность полупроводника освещается светом, который сильно поглощается, то в тонком поверхностном слое возникает повышенная концентрация электронов и дырок. Эти неравновесные носители будут диффундировать вглубь полупроводника. Если $D_n > D_p$, то электроны будут опережать дырки. В результате возникнет электрическое поле, которое будет ускорять движение дырок и замедлять движение электронов. В стационарной ситуации потоки электронов и дырок равны, в противном случае происходит накопление заряда на границах полупроводника.

$$(6.17) \quad \mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p = e\mu_n n \mathbf{E} + eD_n \nabla n + e\mu_p p \mathbf{E} - eD_p \nabla p = 0$$

Из условия квазинейтральности получается равенство градиентов концентраций $\nabla n = \nabla p$.

Из этого условия можно найти величину электрического поля:

$$(6.18) \quad \mathbf{E} = \frac{D_p - D_n}{\mu_n n + \mu_p p} \nabla p$$

Используя это выражение, получаем выражение для дырочного тока в виде тока диффузии:

$$(6.19) \quad \mathbf{j} = -eD \nabla p, \quad D = \frac{D_p \mu_n n + D_n \mu_p p}{\mu_n n + \mu_p p} = \frac{D_n D_p (n + p)}{p D_p + n D_n},$$

где при получении последнего равенства (6.19) использовалось соотношение Эйнштейна. Величина D называется коэффициентом амбиполярной диффузии. Из (6.19) нетрудно видеть, что амбиполярный коэффициент диффузии определяется неосновными носителями

($D \approx D_p$ при $p \ll n$). Причина этого состоит в том, что квазинейтральность обеспечиваются основные носители и поэтому они подстраиваются под движение неосновных носителей.

Для того чтобы проиллюстрировать это заключение предположим, что полупроводник имеет электронную проводимость и концентрация неравновесных дырок в области генерации много больше концентрации равновесных дырок, но много меньше равновесной концентрации электронов. В этом случае для вычисления электрического тока можно воспользоваться теорией возмущений, рассматривая δp как малый параметр. Тогда дрейфовым слагаемым в выражении для плотности тока дырок можно пренебречь, поскольку оно имеет больший порядок малости по отношению к диффузионному слагаемому. Действительно, диффузионное слагаемое имеет порядок величины $\sim \delta p$, а дрейфовое слагаемое $\sim \delta p^2$, поскольку электрическое поле $\sim \delta p$. Поэтому в выражении для плотности тока дырок остается только одно диффузионное слагаемое. В плотности тока электронов дрейфовым слагаемым пренебрегать нельзя. Но в качестве концентрации электронов в этом слагаемом следует брать концентрацию равновесных электронов, поскольку это слагаемое должно иметь порядок $\sim \delta n \approx \delta p$.

Найдем теперь распределение дырок по координате. Пусть полупроводник занимает полупространство $x > 0$, и вся его поверхность равномерно освещается. Тогда концентрация электронов и дырок зависит от одной координаты x . Уравнение непрерывности вне области генерации дырок имеет вид:

$$(6.20) \quad -D \frac{d^2 \delta p}{dx^2} = -\delta p / \tau_p,$$

Его решение, удовлетворяющее граничному условию $\delta p(\infty) = 0$, имеет вид:

$$(6.21) \quad \delta p(x) = \delta p(0) \exp(-x / L_p), \quad L_p = \sqrt{D \tau_p},$$

Величина L_p называется длиной диффузии неосновных носителей.

Рассмотрим теперь движение пакета неравновесных носителей во внешнем электрическом поле. Будем считать полупроводник однородным и $\delta p \approx \delta n$, $\tau_n = \tau_p = \tau$. Возникает вопрос в какую сторону будет двигаться пакет неравновесных носителей? Поскольку квазинейтральность обеспечивается основными носителями, пакет движется в сторону движения неосновных носителей в данном электрическом поле. При этом основные носители будут двигаться в сторону противоположную движению пакета. Эта ситуация для основных носителей аналогична движению волны против течения реки.

Чтобы убедиться в правильности сделанного утверждения, упростим задачу, пренебрегая диффузией, генерацией и рекомбинацией (они не влияют на направление распространения пакета неравновесных носителей), и рассмотрим ситуацию, когда все величины зависят от одной координаты x . В этом случае уравнения принимают простой вид:

$$(6.22) \quad j_n = e\mu_n nE \quad j_p = e\mu_p pE$$

$$(6.23) \quad \begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} &= -\mu_p p \frac{\partial E}{\partial x} - \mu_p E \frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= \mu_n n \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_n E \frac{\partial n}{\partial x} \end{aligned}$$

Исключая из (6.23) слагаемое с производной от электрического поля и используя условие квазинейтральности, находим:

$$(6.25) \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\mu_n \mu_p (n - p)}{\mu_n n + \mu_p p} E \frac{\partial p}{\partial x} = 0.$$

Из (6.25) видно, что множитель, стоящий перед $\partial p / \partial x$ является скоростью с которой перемещается пакет, поскольку решение уравнения (6.25) имеет вид $p = p(x - vt)$, где v - скорость

$$(6.26) \quad v = \frac{\mu_n \mu_p (n - p)}{\mu_n n + \mu_p p} E$$

Из (6.26) видно, что при $n \gg p$ скорость равна скорости дрейфа дырок $v = \mu_p E$, а при $n \ll p$ $v = -\mu_n E$ скорости дрейфа электронов, что подтверждает сделанный ранее качественный вывод о направлении движения. Скорость v называется амбиполярной скоростью дрейфа.

В общем случае скорость амбиполярного дрейфа вычисляется аналогично:

$$(6.27) \quad \begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} &= g - \mu_p p \operatorname{div} E - \mu_p E \nabla p + D_p \Delta p - \delta p / \tau \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= g + \mu_n n \operatorname{div} E + \mu_n E \nabla n - D_n \Delta n - \delta n / \tau \end{aligned}$$

Исключая из (6.27) слагаемые пропорциональные $\operatorname{div} E$ находим уравнение движения для δp :

$$(6.28) \quad \frac{\partial \delta p}{\partial t} = g - v \nabla \delta p + D \Delta \delta p - \frac{\delta p}{\tau}$$

Длина дрейфа

Рассмотрим, как изменяется длина проникновения неравновесных носителей под действием электрического поля. Для этого предположим, что нитевидный образец полупроводни-

ка n-типа, ориентированный вдоль оси x, освещается светом в области $x < 0$. В этом случае уравнение (6.28) имеет вид:

$$(6.29) \quad 0 = g\theta(-x) - \mu_p E \frac{d\delta p}{dx} + D_p \frac{d^2 \delta p}{dx^2} - \frac{\delta p}{\tau}$$

Его решения должны удовлетворять граничным условиям:

$$(6.30) \quad \begin{aligned} \delta p &= g\tau, & x &\rightarrow -\infty \\ \delta p &\rightarrow 0, & x &\rightarrow \infty \end{aligned}$$

Уравнение (6.29) можно представить в виде:

$$(6.31) \quad \frac{d^2 \delta p}{dx^2} - \frac{2}{\lambda} \frac{d\delta p}{dx} - \frac{\delta p}{L_p^2} = \frac{g}{D_p}, \quad \lambda = \frac{2D_p}{\mu_p E}$$

Можно найти решения уравнения (6.29) при $x < 0$ и $x > 0$ и сшить их при $x = 0$. Условия сшивки (непрерывность δp и $d\delta p/dx$) можно получить интегрируя (6.29) в окрестности нуля. При $x > 0$

$$(6.32) \quad \delta p = c_1 \exp(k_1 x) + c_2 \exp(k_2 x)$$

а при $x < 0$

$$(6.33) \quad \delta p = g\tau + c_3 \exp(k_1 x) + c_4 \exp(k_2 x)$$

где

$$(6.33) \quad k_{1,2} = \frac{1}{\lambda} \pm \sqrt{\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{L_p^2}} = \frac{1}{\lambda} \left(1 \pm \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{L_p} \right)^2} \right)$$

Рассмотрим случай $E > 0$, что соответствует затягиванию полем неравновесных носителей в неосвещенную область. В этом случае при $x > 0$ $\delta p = c_2 \exp(-x/l)$,

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{\lambda} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{L_p} \right)^2} - 1 \right),$$

Если электрическое поле слабое, так что $\lambda/L_p \gg 1$, то $l \approx L_p$. Если поле сильное и

$\lambda/L_p \ll 1$, то $l \approx \frac{2L_p^2}{\lambda} = \mu_p E \tau$ - длина дрейфа.

Если $E < 0$, то

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{|\lambda|} \left(1 + \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{L_p} \right)^2} \right)$$

Глубина проникновения неравновесных дырок в область $x > 0$ в этом случае меньше, чем в предыдущем, так как электрическое поле препятствует проникновению неравновесных носителей.

7. Оптические свойства полупроводников

К основным физическим явлениям в полупроводниках с участием света относятся четыре группы явлений: поглощение света, испускание света, рассеяние света и нелинейные явления. Основное внимание в этом разделе будет уделено поглощению света в полупроводниках, менее подробно будут рассмотрены вопросы, связанные с процессами испускания света и совсем краткие сведения будут приведены по вопросам рассеяния света в полупроводниках. Нелинейные явления не будут обсуждаться. Следует отметить, что оптика полупроводников очень обширный раздел физики полупроводников, по которому существует большое количество книг (некоторые из них приведены в списке рекомендованной литературы). Из современных книг необходимо отметить книгу Питера Ю и Мануэля Кардоны [1], в которой на высоком уровне рассмотрены основные оптические явления в полупроводниках.

Механизмы поглощения света в полупроводниках

В полупроводниках имеются следующие четыре основных механизма поглощения света:

1. Поглощение на свободных носителях заряда. Для обозначения этого вида поглощения света иногда используется термин «друдевское» поглощение. Этот механизм поглощения связан с движением электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне. Это движение из-за рассеяния носителей заряда приводит к ненулевой действительной части проводимости, которая и ответственна за поглощение.
2. Межзонное (фундаментальное) поглощение света. В этом случае при поглощении фотона электрон переходит из валентной зоны в зону проводимости.
3. Примесное поглощение света. При примесном поглощении начальное или конечное (или оба из них) состояние электрона в процессе поглощения света является связанным на примеси (доноре или акцепторе).
4. Решеточное поглощение света. В этом случае энергия света переходит в энергию колебаний решетки.

Кроме того, свет может при определенных условиях поглощаться за счет взаимодействия с такими элементарными возбуждениями как плазмоны, магноны и др.

Иногда в отдельный класс поглощения света выделяют процессы поглощения света в присутствии сильного магнитного поля (магнетопоглощение).

Поглощение на свободных носителях

В качестве характеристики поглощения света обычно используется коэффициент поглощения света α , который имеет размерность обратной длины. Изменение интенсивности

светового потока I на длине dx равно $-\alpha I dx$. Предполагается, что свет распространяется вдоль направления x . Поэтому зависимость интенсивности света от координаты в поглощающей среде удовлетворяет уравнению:

$$(7.1) \quad \frac{dI}{dx} = -\alpha I$$

и экспоненциально спадает с ростом координаты $I(x) = I_0 \exp(-\alpha x)$. Поскольку величина светового потока пропорциональна квадрату амплитуды электрического (магнитного) поля, то зависимость амплитуды электрического поля от координаты имеет вид:

$$E(x) = E_0 \exp\left(-\frac{\alpha}{2} x\right).$$

Из решения уравнения Максвелла в среде получается зависимость электрического поля от координаты в виде $E(x) = E_0 \exp(iqx)$, где q – волновой вектор волны в среде распространения волны. Сравнивая два выражения для электрического поля, находим, что

$$(7.2) \quad \alpha = 2 \operatorname{Im}(q)$$

При распространении поперечных электромагнитных волн в среде имеется следующая связь между волновым вектором и частотой:

$$(7.3) \quad \omega = cq / \sqrt{\kappa(\omega)}$$

где c – скорость света, $\kappa(\omega)$ – диэлектрическая проницаемость на частоте ω . Из (7.2) и (7.3) можно найти связь коэффициента затухания и мнимой части показателя преломления

$$n(\omega) = \operatorname{Re} \sqrt{\kappa(\omega)} :$$

$$(7.4) \quad \alpha = 2 \frac{\omega}{c} \operatorname{Im}(n(\omega))$$

Для зависимости электрического поля от времени $E(t) = E \exp(-i\omega t)$ диэлектрическую проницаемость можно представить в виде:

$$(7.5) \quad \kappa(\omega) = 1 + i \frac{4\pi\sigma_{\Sigma}(\omega)}{\omega}$$

где $\sigma_{\Sigma}(\omega)$ суммарная проводимость полупроводника, в которую дают вклад как движения электронов (внутризонные и межзонные и переходы с участием примесных состояний) так и движения ионов решетки. Отметим, что в суммарную проводимость дают вклад все электроны, а не только находящиеся в зоне проводимости и валентной зоне. Из (6.4) видно, что поглощение определяется действительной частью проводимости.

Вклад в суммарную проводимость от внутризонного движения могут давать только электроны частично заполненных зон – валентной зоны и зоны проводимости. Частотная зависимость проводимости была найдена в разделе 5 (см. формулу (5.13)):

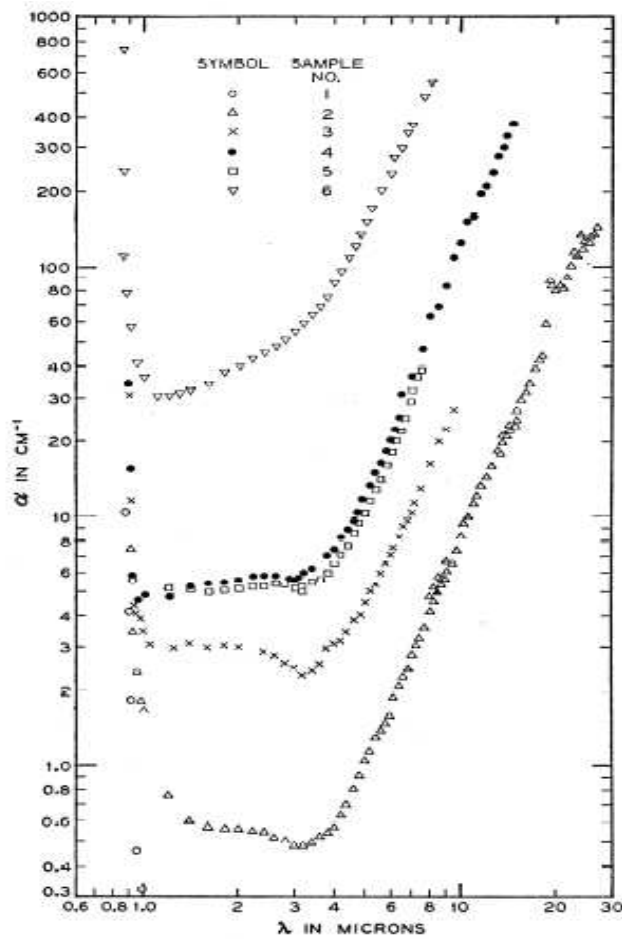


Рис. 7.1 Зависимость коэффициента поглощения на свободных носителях от длины волны.

$$(7.6) \quad \sigma_D(\omega) = \frac{e^2 n}{m} \left\langle \frac{\tau_1}{1 - i\omega\tau_1} \right\rangle, \quad \text{Re}(\sigma_D(\omega)) = \frac{e^2 n}{m} \left\langle \frac{\tau_1}{1 + \omega^2 \tau_1^2} \right\rangle$$

На больших частотах, когда $\omega\tau_1 \gg 1$

$$(7.7) \quad \text{Re}(\sigma_D(\omega)) \approx \frac{e^2 n}{m\omega^2} \left\langle \frac{1}{\tau_1} \right\rangle \ll \sigma_0 = \frac{e^2 n}{m} \langle \tau_1 \rangle$$

Поглощение на свободных носителях может быть основным механизмом поглощения света, в частотных областях, где нет межзонного поглощения и сильного поглощения на фоновых (в полярных полупроводниках на частотах близких к частоте оптического фонона) и если концентрация носителей достаточно велика. На достаточно больших частотах

$$\frac{4\pi \text{Re} \sigma_D(\omega)}{\omega} \ll 1 - \frac{4\pi \text{Im} \sigma_\Sigma(\omega)}{\omega} = \text{Re}(\kappa(\omega))$$

В этом случае

$$(7.8) \quad \alpha \approx \frac{4\pi}{c} \frac{\text{Re}(\sigma_D(\omega))}{\sqrt{\text{Re}(\kappa(\omega))}} \sim \frac{1}{\omega^2}$$

На рис. 7.1 приведены измеренные зависимости коэффициента поглощения света на свободных носителях от энергии фотона для GaAs. Из рисунка видно, что при достаточно

больших частотах коэффициент поглощения обратно пропорционален квадрату частоты, что и следует из выражения (7.8).

Каким образом происходит поглощение фотона в рассматриваемом случае? Законы сохранения энергии импульса запрещают внутризонное поглощение фотона свободным электроном. Для того чтобы выполнить законы сохранения энергии- импульса необходимо участие в процессе третьей частицы. Этой третьей частицей может быть фонон, примесь или другой электрон. Таким образом, поглощение фотона в этом случае обязательно сопровождается рассеянием электрона. Поэтому коэффициент поглощения в этом механизме зависит от времени релаксации импульса. С точки зрения квантовой механики поглощения фотона в этом случае является процессом второго порядка малости и для его вычисления необходимо использовать теорию возмущений второго порядка с учетом взаимодействия электрона, как с электромагнитным полем, так и с фононом или примесным центром.

Межзонное поглощение света

Вычислим вероятность электронного перехода под действием света из валентной зоны в зону проводимости. Для этого необходимо найти оператор взаимодействия электрона с электромагнитным полем. Для нахождения этого оператора напомним гамильтониан электрона в приближении Хартри в присутствии электромагнитного поля, но без учета спина электрона:

$$(7.9) \quad H = \frac{\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2}{2m_0} - e\varphi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})$$

где векторный и скалярный потенциалы $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ и $\varphi(\mathbf{r})$ обусловлены электромагнитной волной, $U(\mathbf{r})$ – самосогласованный потенциал электрона в кристалле. Очевидно, что в этом случае гамильтониан взаимодействия имеет вид:

$$(7.10) \quad H_{\text{int}} = \frac{e}{2m_0 c} (\mathbf{p}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{p}) + \frac{1}{2m_0} \left(\frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\varphi(\mathbf{r})$$

Отметим, что третье слагаемое квадратично по величине электромагнитного поля и описывает нелинейные явления. Для описания линейных явлений в поглощении света, когда пренебрегается процессами двухфотонного поглощения этим слагаемым можно пренебречь. Часто для электромагнитной волны выбирается калибровка $\varphi = 0$, $\text{div}\mathbf{A} = 0$.

В этом случае оператор взаимодействия с электромагнитным полем можно записать в виде:

$$(7.11) \quad H_{\text{int}} = \frac{e}{c} \mathbf{A} \frac{\mathbf{p}}{m_0} = \frac{e}{c} \mathbf{A} \mathbf{v},$$

где $\mathbf{v}$ - оператор скорости электрона. Отметим, что скорость равна $\mathbf{v} = (\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c)/m_0$, поэтому последнее равенство (7.11) выполняется с точностью до линейных по $\mathbf{A}$ членов. При учете спина электрона оператор взаимодействия электрона со слабым электромагнитным полем волны в присутствии сильного постоянного магнитного поля принимает вид:

$$(7.12) \quad H_{\text{int}} = \frac{e}{c} \mathbf{A} \mathbf{v} + \frac{g}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H},$$

где $\mathbf{H}$ – магнитное поле волны, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ - магнетон Бора, g - фактор Ланде (для его обозначения часто используется термин «g»- фактор). Для свободного электрона $g = 2$. Оператор скорости в присутствии спин-орбитального взаимодействия имеет вид:

$$(7.13) \quad \mathbf{v} = \frac{\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_0}{m_0} + \frac{\hbar[\boldsymbol{\sigma} \nabla U]}{4m_0^2 c^2},$$

$\mathbf{A}_0$ – векторный потенциал, создаваемый постоянным магнитным полем. Далее будет рассматриваться межзонное поглощение в отсутствии постоянного магнитного поля.

Отметим, что существует связь между матричными элементами оператора скорости и оператора радиус-вектора. Действительно, из квантовой механики известно, что

$$(7.14) \quad \mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar} [H \mathbf{r}]$$

Поэтому

$$(7.15) \quad \mathbf{v}_{fi} = \frac{i}{\hbar} (\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i) \mathbf{r}_{fi}$$

Если энергия фотона равна разности энергий электронных уровней, т.е. $\hbar\omega = \pm(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)$, где знак плюс соответствует процессу поглощения фотона, а знак минус – процессу испускания фотона, то матричный элемент гамильтониана (7.12) можно представить в виде

$$(7.16) \quad H_{fi}^{\text{int}} = e \mathbf{E} \mathbf{r}_{fi}$$

Выражение (7.16) иногда называют дипольным приближением для описания взаимодействия электромагнитного поля с электроном. Им особенно удобно пользоваться при рассмотрении взаимодействия электрона с низкочастотным электромагнитным полем, когда в использовании (7.11) могут появиться проблемы из-за того, что векторный потенциал стремится к бесконечности при стремлении частоты к нулю при фиксированной величине электрического поля в калибровке, где электростатический потенциал равен нулю.

Вероятность перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости в единицу времени может быть найдена с помощью теории возмущений, которая приводит к «золотому» правилу квантовой механики:

$$(7.17) \quad W_{cv}(\mathbf{k}_c, \mathbf{k}_v) = \frac{2\pi}{\hbar} |(H_{\text{int}})_{cv}|^2 [f_v(\mathbf{k}_v) - f_c(\mathbf{k}_c)] \delta(\varepsilon_c(\mathbf{k}_c) - \hbar\omega - \varepsilon_v(\mathbf{k}_v))$$

где $\mathbf{k}_{c,v}$, $f_{c,v}(\mathbf{k}_{c,v})$ и $\varepsilon_{c,v}(\mathbf{k}_{c,v})$ - волновые векторы, функции распределения и энергии электрона в зоне проводимости и валентной, ω - циклическая частота световой волны. Выражение для мощности, которую полупроводник поглощает под воздействием света, можно представить в виде:

$$(7.18) \quad P = 2 \sum_{k_c, k_v} W_{cv}(k_c, k_v) \hbar\omega$$

Вычислим теперь матричный элемент оператора возмущения. Для этого выберем волновые функции, нормированные на единицу

$$(7.19) \quad \psi_{cv}(\mathbf{k}_{c,v}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_{cv}\mathbf{r}) u_{cv}(\mathbf{k}_{cv}, \mathbf{r}) / \sqrt{V}$$

Матричный элемент оператора $\mathbf{pA}$, где $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r} - i\omega t)$ (здесь и далее будем пренебрегать влиянием спин орбитального взаимодействия на матричный элемент межзонного перехода)

$$(7.20) \quad \begin{aligned} & \langle \psi_c(\mathbf{k}_c, \mathbf{r}) | \mathbf{pA}(\mathbf{r}, t) | \psi_v(\mathbf{k}_v, \mathbf{r}) \rangle = \\ & = -i\hbar \frac{\exp(-i\omega t)}{V} \int d^3r \exp(-i\mathbf{k}_c\mathbf{r} + i\mathbf{q}\mathbf{r}) u_c^*(\mathbf{k}_c, \mathbf{r}) \mathbf{A}_0 \frac{d}{d\mathbf{r}} (\exp(i\mathbf{k}_v\mathbf{r}) u_{cv}(\mathbf{k}_v, \mathbf{r})) \end{aligned}$$

При вычислении интеграла (7.20) следует иметь в виду, что быстро осциллирующие части волновых функций, принадлежащих разным зонам, ортогональны при одних и тех же импульсах. Это обстоятельство позволяет в (7.20) ограничиться только дифференцированием быстро осциллирующей части ψ_v . Поэтому матричный элемент оператора можно представить в виде:

$$(7.21) \quad \begin{aligned} & \langle \psi_c(\mathbf{k}_c, \mathbf{r}) | \mathbf{pA}(\mathbf{r}, t) | \psi_v(\mathbf{k}_v, \mathbf{r}) \rangle = \\ & = -i\hbar \frac{\exp(-i\omega t)}{V} \int d^3r \exp(-i\mathbf{k}_c\mathbf{r} + i\mathbf{q}\mathbf{r} + \mathbf{k}_v\mathbf{r}) u_c^*(\mathbf{k}_c, \mathbf{r}) \mathbf{A}_0 \frac{d}{d\mathbf{r}} (u_{cv}(\mathbf{k}_v, \mathbf{r})) = \\ & = \exp(-i\omega t) \delta_{\mathbf{k}_c, \mathbf{k}_v + \mathbf{q}} \mathbf{A}_0 \mathbf{p}_{cv}(k_c) \end{aligned}$$

где

$$(7.22) \quad \mathbf{p}_{cv}(k) = \frac{-i\hbar}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r u_c^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{d}{d\mathbf{r}} u_v(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

Ω - объем элементарной ячейки. Интегрирование в (7.21) выполнялось следующим образом. Весь объем разбивался на элементарные ячейки. При интегрировании по элементар-

ной ячейке считалось, что экспонента постоянна и поэтому она выносилась за знак интеграла, а потом производилось суммирование по всем элементарным ячейкам.

Из (7.21) видно, что при поглощении фотона выполняется закон сохранения квазиимпульса, что является следствием трансляционной инвариантности системы. Если энергия фотона превышает ширину запрещенной зоны на величину большую $E_g^2 n^2 (m_c + m_v) / 2m_c m_v c^2$ (n - показатель преломления кристалла), то волновой вектор фотона существенно меньше волновых векторов электрона в начальном и конечном состоянии, и им можно пренебречь. Тогда закон сохранения квазиимпульса принимает простой вид $\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_v$. Поэтому такие переходы электронов часто называют вертикальными. С учетом этого обстоятельства выражение (7.18) для поглощаемой мощности можно переписать в виде:

$$(7.23) \quad \begin{aligned} P &= 2 \sum_{\mathbf{k}_c, \mathbf{k}_v} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e\mathbf{A}_0 \mathbf{p}_{cv}}{cm_0} \right|^2 \hbar \omega \delta_{\mathbf{k}_c, \mathbf{k}_v} [f_v(\mathbf{k}_v) - f_c(\mathbf{k}_c)] \delta(\varepsilon_c(\mathbf{k}_c) - \hbar \omega - \varepsilon_v(\mathbf{k}_v)) = \\ &= \frac{4\pi V e^2}{(2\pi)^3 \omega} \int d^3 k \left| \frac{\mathbf{E}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 [f_v(\mathbf{k}) - f_c(\mathbf{k})] \delta(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \hbar \omega - \varepsilon_v(\mathbf{k})) \end{aligned}$$

При получении (7.23) использовалось соотношение между амплитудами $\mathbf{E}_0 = -i\omega \mathbf{A}_0 / c$.

Из (6.22) видно, что поглощаемая мощность пропорциональна объему полупроводника.

Изменение интенсивности света, распространяющегося вдоль оси x , при прохождении слоя толщиной dx равно $dI = -S p dx$, где $p = P/V$ - мощность поглощаемая единицей объема, S - площадь слоя. Интенсивность падающего потока равна:

$$(7.24) \quad I = \frac{S c n |\mathbf{E}_0|^2}{2\pi}$$

Используя (7.23), (7.24), а также, что согласно (7.1) $\alpha = -\frac{dI}{I dx}$ находим выражение для ко-

эффициента межзонного (фундаментального) поглощения света:

$$(7.25) \quad \alpha = \frac{e^2}{\pi c n \omega} \int d^3 k \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 [f_v(\mathbf{k}) - f_c(\mathbf{k})] \delta(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \hbar \omega - \varepsilon_v(\mathbf{k}))$$

где $\mathbf{e}_0$ - единичный вектор поляризации излучения.

Характерным масштабом зависимости матричного элемента оператора импульса $\mathbf{p}_{cv}$ от волнового вектора является размер зоны Бриллюэна.

При исследовании поглощения вблизи края в прямозонных полупроводниках, когда энергия фотона немного превышает величину запрещенной зоны, можно разложить матричный элемент оператора импульса в ряд по отклонению величины импульса от $\mathbf{k}_0$, где $\mathbf{k}_0$

волновой вектор, соответствующий дну зоны проводимости и потолку валентной зоны. В этом случае

$$(7.26) \quad p_{cv}^i(\mathbf{k}) \approx p_{cv}^i(\mathbf{k}_0) + \left. \frac{\partial p_{cv}^i(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} (k_j - k_j^0)$$

В случае, когда $\mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k}_0) \neq 0$ электронный переход из валентной зоны в зону проводимости называют разрешенным, в противном случае – запрещенным.

Рассмотрим зависимость от частоты в прямозонном полупроводнике с разрешенным переходом, предполагая для простоты закон дисперсии электронов и дырок вблизи краев зон изотропным, т.е. $\varepsilon_{c,v}(k) = E_{c,v} \pm \hbar^2 k^2 / 2m_{c,v}$. Будем также полагать, что минимум зоны проводимости располагается в Γ -точке, и что все состояния валентной зоны заполнены, а состояния зоны проводимости не заняты электронами. В этом случае

$$(7.27) \quad \begin{aligned} \alpha(\omega) &= \frac{e^2}{2\pi c n \omega} \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}(0)}{m_0} \right|^2 \int d^3 k \delta \left(E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \hbar \omega \right) = \\ &= \frac{2(2m^*)^{3/2} e^2}{c n \hbar^3 \omega} \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}(0)}{m_0} \right|^2 \sqrt{\hbar \omega - E_g} \theta(\hbar \omega - E_g) \end{aligned}$$

где $m^* = m_c m_v / (m_c + m_v)$ – эффективная масса комбинированной плотности состояний, $\theta(x)$ – функция Хевисайда (тэта-функция) $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$. Комбинированной плотностью состояний называют величину:

$$(7.28) \quad G(\hbar \omega) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3 k \delta(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \hbar \omega - \varepsilon_v(\mathbf{k})) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}}(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}))|}$$

где последний интеграл берется по поверхности $\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}) = \hbar \omega$. Для разрешенных переходов коэффициент поглощения пропорционален комбинированной плотности состояний. В точках, где $|\nabla_{\mathbf{k}}(\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}))| = 0$ имеются особенности комбинированной плотности состояний, эти особенности называются особенностями Ван Хова, а точки, где они появляются, называются критическими точками. В окрестности критической $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ точки справедливо следующее разложение

$$\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}) = \varepsilon_c(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_v(\mathbf{k}_0) + \alpha_1(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)_1^2 + \alpha_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)_2^2 + \alpha_3(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)_3^2$$

Оси 1,2,3 выбраны так, чтобы диагонализировать квадратичную форму. Имеется четыре сорта критических точек: когда все коэффициенты α_i положительны, когда два из них положительны, когда один положителен и когда все отрицательны. Зависимости комбинированной плотности состояний вблизи критических точек имеют вид:

$$\alpha_i > 0$$

$$\alpha_i < 0$$

$$G(E) = \begin{cases} 0 & E < E_0 \\ \sqrt{E - E_0} & E > E_0 \end{cases}, \quad G(E) = \begin{cases} 0 & E > E_0 \\ \sqrt{E_0 - E} & E < E_0 \end{cases}$$

$$\alpha_{1,2} > 0, \quad \alpha_3 < 0$$

$$\alpha_{1,2} < 0, \quad \alpha_3 > 0$$

$$G(E) = \begin{cases} C & E > E_0 \\ C - \sqrt{E_0 - E} & E < E_0 \end{cases}, \quad G(E) = \begin{cases} C & E < E_0 \\ C - \sqrt{E - E_0} & E > E_0 \end{cases}$$

В критических точках имеются особенности в зависимости коэффициента поглощения от частоты, даже если переход совершается в состояния, расположенные в глубине зоны проводимости.

В случае запрещенного перехода, зависимость коэффициента поглощения дается выражением:

$$(7.29) \quad \alpha(\omega) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon\hbar\omega m_0^2} \int d^3k (A_1 k_x^2 + A_2 k_y^2 + A_3 k_z^2) \delta\left(E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \hbar\omega\right) =$$

$$= \frac{(2m^*)^{5/2} e^2}{\epsilon\hbar^5 \omega m_0^2} (A_1 + A_2 + A_3) (\hbar\omega - E_g)^{3/2} \theta(\hbar\omega - E_g)$$

где $A_i = \left| \mathbf{e}_0 \frac{\partial \mathbf{p}_{cv}}{\partial k_i} \right|^2$. При получении (7.29) было учтено, что вклад в интеграл слагаемых ви-

да $k_i k_j$ где $i \neq j$ равен нулю.

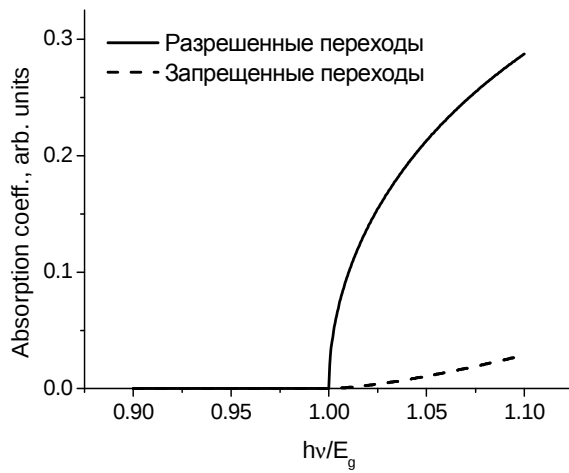


Рис. 7.2. Зависимости коэффициента поглощения от энергии фотона в полупроводнике с разрешенными и запрещенными межзонными электронными переходами.

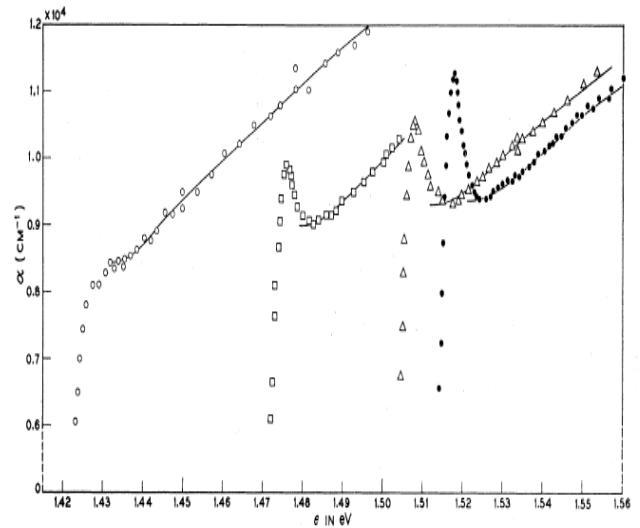


Рис. 7.3. Измеренная зависимость коэффициента поглощения света в GaAs от энергии фотонов при четырех температурах. Черные кружки соответствуют $T=21\text{ K}$, треугольники – $T=90\text{ K}$, квадраты – $T=184\text{ K}$, светлые кружки – $T=294\text{ K}$. Рисунок взят из работы M.D.Sturge Phys. Rev. v.127, 768 (1962)

На рис. 7.2 показаны зависимости от частоты коэффициентов поглощения для разрешенных и запрещенных переходов. На рис. 7.3 приведены экспериментально измеренные за-

зависимости коэффициента поглощения для GaAs от частоты, измеренные при разных температурах. В GaAs межзонный оптический переход является разрешенным. Из сравнения рис. 7.2 и 7.3 видно, что (7.27) хорошо описывает наблюдаемую зависимость в области энергий фотона, больших ширины запрещенной зоны E_g . При энергиях фотонов близких и меньших E_g наблюдаемый коэффициент поглощения отличается от зависимости (7.27). И это отличие увеличивается с ростом температуры. Причина этого состоит в том, что при выводе (7.27) не были учтены процессы рассеяния, которые приводят к конечности времени жизни носителей, и следовательно, к неопределенности их энергии порядка $\hbar/\tau$.

Экситонные эффекты в поглощении света

В зависимости коэффициента поглощения от частоты в чистых полупроводниках, при низких температурах наблюдаются один или несколько пиков при энергиях немного меньших ширины запрещенной зоны (см. рис. 7.3.). Наиболее ярко это явление наблюдается в окиси меди Cu_2O (см. рис. 7.4), где видна целая серия пиков. В GaAs в поглощении обычно наблюдается только один пик. Объяснение этому явлению впервые было дано Е.Ф.Гроссом в 1951 г. (см. Е.Ф.Гросс и Н.А.Каррыев, Доклады АН СССР **84**, 261, (1952).). Причина этого явления состоит в кулоновском взаимодействии электрона и дырки, рожденных фотоном. Это взаимодействие приводит к образованию связанного состояния электрона и дырки – экситону. Экситон является аналогом позитрония: атома состоящего из электрона и позитрона. Энергия, которую необходимо затратить на образование экситона несколько меньше ширины запрещенной зоны. Действительно, энергия покоящегося экситона, находящегося в основном состоянии, меньше суммы энергий покоящихся электрона и дырки на энергию ионизации. Однако, экситон рождается с импульсом равным импульсу фотона. Соответствующая кинетическая энергия экситона равна $E_g \frac{E_g n^2}{2(m_c + |m_v|)c^2}$. Эта величина, как правило, много меньше энергии ионизации экситона, поэтому энергия, необходимая для рождения экситона меньше ширины запрещенной зоны примерно на энергию ионизации.

В Ge, Si и полупроводниках A_3B_5 характерное расстояние между электроном и дыркой в связанном состоянии экситона много больше постоянной решетки, поэтому такие экситоны называются экситонами большого радиуса или экситонами Ванье-Мотта. В молекулярных кристаллах и полярных диэлектриках размер экситона сравним с постоянной решетки. Такие экситоны называются экситонами малого радиуса или экситонами Френкеля. Зависимость энергии кулоновского взаимодействия электрона и дырки от рас-

стояния между ними в экситонах большого радиуса имеет тот же вид, что и кулоновское взаимодействие между электроном и заряженным донором. Поэтому и спектр покоящегося экситона в простейшем случае изотропного и квадратичного закона дисперсии электронов и дырок аналогичен спектру атома водорода:

$$(7.30) \quad E_n = E_g - \frac{e^4 m^*}{2\hbar^2 \kappa^2 n^2}$$

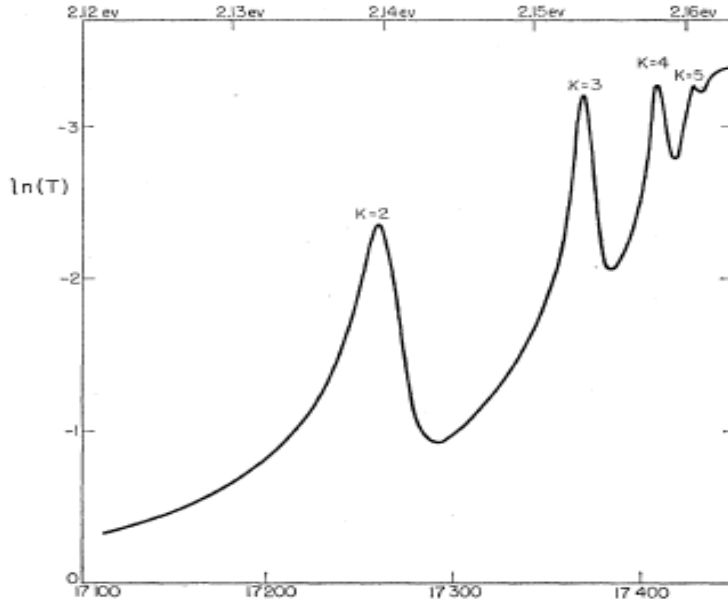


Рис. 7.4 Зависимость логарифма пропускания света, от обратной длины волны (в обратных см). Пики соответствуют максимумам поглощения. В CuO_2 межзонные переходы являются запрещенными, поэтому переходы видны только в р- состоянии экситона. Рисунок взят из работы P.W.Baumeister Phys.Rev. v.121, 359 (1961)

Для вычисления матричного элемента оператора взаимодействия электрона со светом теперь следует использовать не блоховские волновые функции (7.19) в начальном и конечном состоянии электрона, а волновые функции электрона в экситоне для конечного состояния и волновую функцию дырки в качестве начального состояния. Отметим, что кулоновское взаимодействие изменяет волновые функции и в непрерывном спектре. Для корректного учета этого обстоятельства в качестве волновых функций начального и конечного состояния следует брать волновые функции с учетом этого обстоятельства. В простейшем случае водородоподобного экситона для огибающих можно использовать волновые функции непрерывного спектра электрона, движущегося в кулоновском спектре (см. например Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц Квантовая механика. Нерелятивистская теория.). Этот учет приводит к тому, что коэффициент поглощения испытывает конечный скачок при $\hbar\omega = E_g$ (см. рис. 7.5).

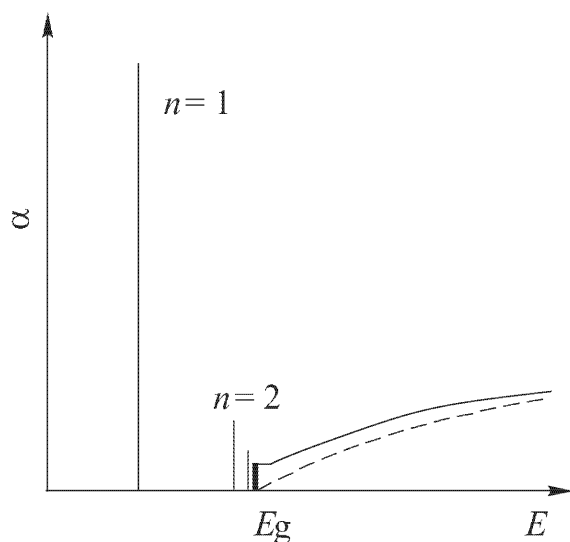


Рис. 7.5 Спектры поглощения близи края запрещенной зоны с учетом экситонных эффектов (сплошная линия) и без учета этих эффектов (пунктир). Рисунок взят из книги [1].

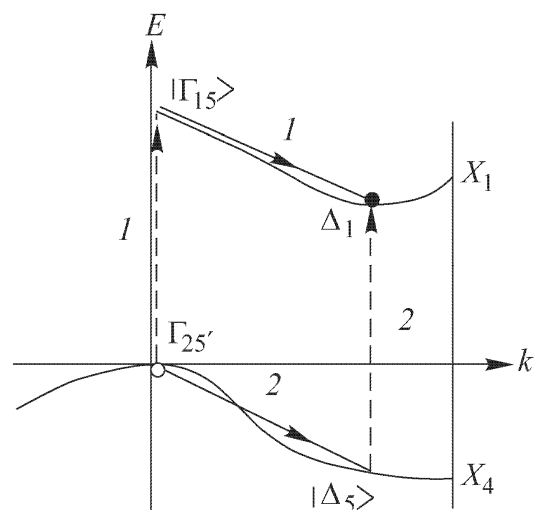


Рис. 7.6. Схема поглощения света в Si. Переходы с участием фотонов обозначены пунктирными стрелками. Переходы с участием фононов обозначены сплошными стрелками. Рисунок взят из книги [1].

Кроме того, для корректного расчета поглощения света экситонами необходимо учесть конечное время жизни экситона, которое определяет ширину линии поглощения экситона. Следует отметить важную роль рассеяния носителей заряда в поглощении света. Строго говоря, поглощение света возможно, только если имеется рассеяние. Действительно, если бы электрон и дырка оставались в состояниях, в которых они оказались после поглощения фотона, то через некоторое время они прорекомбинировали и испустили точно такой же фотон, который бы поглощен ранее. Процессы рассеяния для электрона и дырки, находящихся в экситоне, менее вероятны, чем для свободных носителей. Если вероятность рассеяния много меньше, чем вероятность излучательной рекомбинации, то фотон много раз будет поглощен и испущен экситоном, прежде чем быть окончательно поглощенным. В этом случае существует связанное состояние экситона и фотона – экситонный поляритон. Подробнее о его свойствах можно прочитать в [1].

Поглощение света в непрямозонных полупроводниках

Для того чтобы выполнить закон сохранения импульса при поглощении света в непрямозонных полупроводниках необходимо участие третьей частицы. Обычно это либо междолинный фонон, импульс которого равен разности импульсов потолка валентной зоны и дна зоны проводимости, либо примесь, при столкновении с которой электрон может отдать избыточный импульс. Таким образом, в отличие от прямозонных полупроводников,

процесс поглощения света в непрямозонных полупроводниках должен сопровождаться рассеянием, т.е. является процессом второго порядка малости. По этой причине коэффициент межзонного поглощения света для непрямых переходов значительно меньше, чем для прямых переходов. Для нахождения вероятности поглощения фотона при непрямом переходе необходимо воспользоваться теорией возмущений с точностью до второго порядка. Рассмотрим поглощение света с участием междолинных фононов, которые являются доминирующими при межзонном поглощении света в слаболегированных германии и кремнии. Обозначим оператор взаимодействия с междолинным фононом в зоне проводимости V_c , а в валентной зоне $-V_v$. Тогда $V_c = V_c^+ + V_c^-$, $V_v = V_v^+ + V_v^-$, где верхний индекс $+$ обозначает часть оператора взаимодействия, соответствующую процессу испускания фонона, а знак $-$ соответствует процессу поглощения фонона.

Рассмотрим для определенности поглощение света в кремнии. Процесс второго порядка идет с участием промежуточного состояния (см. Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц Квантовая механика). Закон сохранения энергии выполняется только для начального и конечного состояний и не выполняется для переходов в промежуточные состояния. Очевидно, что с испусканием фонона возможны два типа процессов. В первом из них дырка испускает междолинный фонон и переходит из начального состояния в Γ - долине в промежуточное состояние в дельта- долине валентной зоны из которого при помощи поглощения фотона переходит в дельта- долину зоны проводимости. Во втором процессе электрон из Γ - долины валентной зоны поглощая фотон переходит в промежуточное состояние Γ -долины зоны проводимости, из которого с помощью испускания оптического фонона попадает в конечное состояние дельта-долины зоны проводимости. Эти переходы схематически показаны на рис. 7.6.

Мощность, поглощаемая в результате этих процессов можно записать в виде:

(7.31)

$$P_c^+ = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{kc, kv} \left(\frac{eE}{m_0 \omega} \right)^2 \left| \frac{\langle \psi_v(k_v) | p | \Phi_c(k_v) \rangle \langle \Phi_c(k_v) | V_c | \psi_c(k_c) \rangle}{\varepsilon_v(k_v) - \varepsilon_c(k_v)} \right|^2 \hbar \omega \delta(\varepsilon_v(k_v) + \hbar \omega - \varepsilon_c(k_c) - \hbar \omega_0)$$

$$P_v^+ = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{kc, kv} \left(\frac{eE}{m_0 \omega} \right)^2 \left| \frac{\langle \psi_v(k_v) | V_v | \Phi_v(k_c) \rangle \langle \Phi_c(k_c) | p | \psi_c(k_c) \rangle}{\varepsilon_v(k_v) - \varepsilon_v(k_v) - \hbar \omega_0} \right|^2 \hbar \omega \delta(\varepsilon_v(k_v) + \hbar \omega - \varepsilon_c(k_c) - \hbar \omega_0)$$

где через $\Phi_{c,v}$ обозначена волновая функция промежуточного состояния, $\hbar \omega_0$ - энергия междолинного фонона. Вблизи края поглощения матричные элементы операторов вместе с знаменателем можно считать слабо зависящими от частоты. Переходя от интегрирования по k к интегрированию по энергиям можно показать, что вблизи края поглощения

$$(7.32) \quad P_{c,v}^+ \propto \int G_c(\varepsilon_c) G_v(\varepsilon_v) d\varepsilon_c d\varepsilon_v \delta(\varepsilon_v + \hbar\omega - \varepsilon_c - \hbar\omega_0)$$

где $G_{c,v}$ - плотности состояний в зонах. Полагая

$$(7.33) \quad G_c(\varepsilon_c) \propto (\varepsilon_c - E_c)^{1/2} \Theta(\varepsilon_c - E_c), \quad G_v(\varepsilon_v) \propto (E_v - \varepsilon_v)^{1/2} \Theta(E_v - \varepsilon_v)$$

Находим

$$(7.34) \quad P_{c,v}^+ \propto \int_{E_c}^{E_v + \hbar\omega - \hbar\omega_0} (E_v + \hbar\omega - \varepsilon_c - \hbar\omega_0)^{1/2} (\varepsilon_c - E_c)^{1/2} d\varepsilon_c =$$

$$= (\hbar\omega - E_g - \hbar\omega_0)^2 \theta(\hbar\omega - E_g - \hbar\omega_0) \int_0^1 \sqrt{x(1-x)} dx$$

В аналогичном выражении для процессов с поглощением фонона необходимо сменить знак у энергии фонона. Поэтому вблизи края поглощения с участием фонона коэффициент поглощения является суммой:

$$(7.35) \quad \alpha(\omega) = A^+ (\hbar\omega - E_g - \hbar\omega_0)^2 (\hbar\omega - E_g - \hbar\omega_0) + A^- (\hbar\omega - E_g + \hbar\omega_0)^2 (\hbar\omega - E_g + \hbar\omega_0)$$

где коэффициенты $A^\pm$ зависят от числа междолинных фононов ($A^\pm \propto n \pm 1/2 + 1/2$). Поэтому на зависимости коэффициента поглощения от частоты имеется характерный излом (см. рис 7.7).

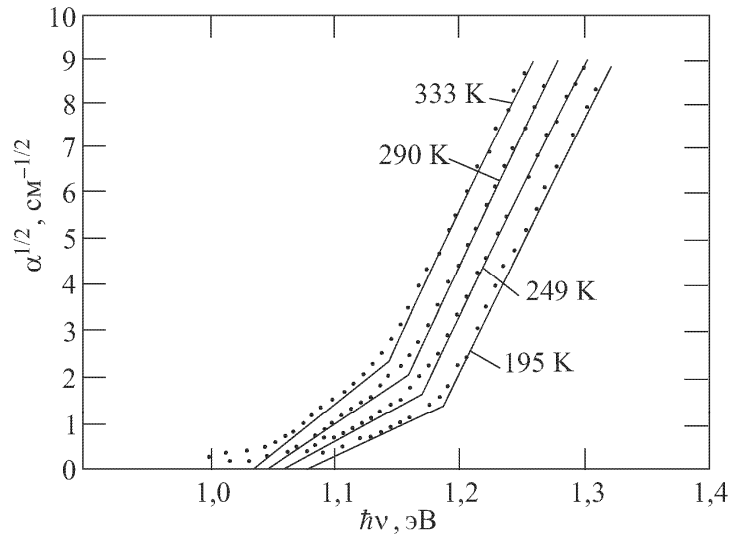


Рис. 7.7 Зависимость коэффициента межзонного поглощения света в кремнии от энергии фотона при разных температурах.

Эффект Бурштейна-Мосса

В сильно легированных полупроводниках уровень Ферми располагается в области разрешенных значений энергии. В этом случае заселенность электронами зоны проводимости в полупроводнике n-типа или дырками потока валентной зоны в полупроводнике p-типа приводит к коротковолновому сдвигу края межзонного поглощения света. Для наглядно-

сти разрешенные переходы при поглощении света в вырожденных полупроводниках показаны на рис. 7.8. Из рисунка видно, что в полупроводнике n-типа переходы вблизи края зоны запрещены, поскольку соответствующие состояния в зоне проводимости заполнены электронами. В полупроводнике p-типа такие переходы не возможны, поскольку состояния вблизи потолка валентной зоны не заполнены.

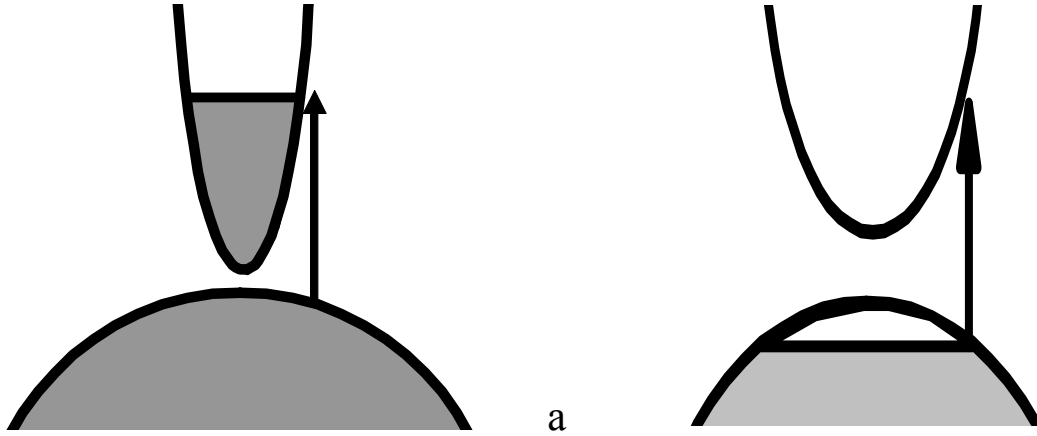


Рис.7.8 Схема межзонных оптических переходов в полупроводниках n-типа (а) и p-типа (б).

Используя (7.25) нетрудно получить выражение для коэффициента межзонного поглощения света в прямозонном полупроводнике с разрешенными переходами с учетом заполнения состояний:

$$(7.36) \quad \alpha(\omega) = \frac{2(2m^*)^{3/2} e^2}{cn\hbar^3 \omega} \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}(0)}{m_0} \right|^2 \sqrt{\hbar\omega - E_g} \theta(\hbar\omega - E_g) \left\{ \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{-F + E_v - (\hbar\omega - E_g)m^*/m_v}{T}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{-F + E_c + (\hbar\omega - E_g)m^*/m_c}{T}\right)} \right\}$$

Из (7.36) видно, что при низких температурах край поглощения располагается при

$$\hbar\omega = E_g + (F - E_c) \left(1 + \frac{m_c}{m_v} \right)$$

в полупроводнике n-типа и при

$$\hbar\omega = E_g + (E_v - F) \left(1 + \frac{m_v}{m_c} \right)$$

в полупроводнике p-типа.

На рис 7.9 показана зависимость (7.36) для $F - E_c = 20$ мэВ для трех температур (полагалось, что $m^* = m_c$).

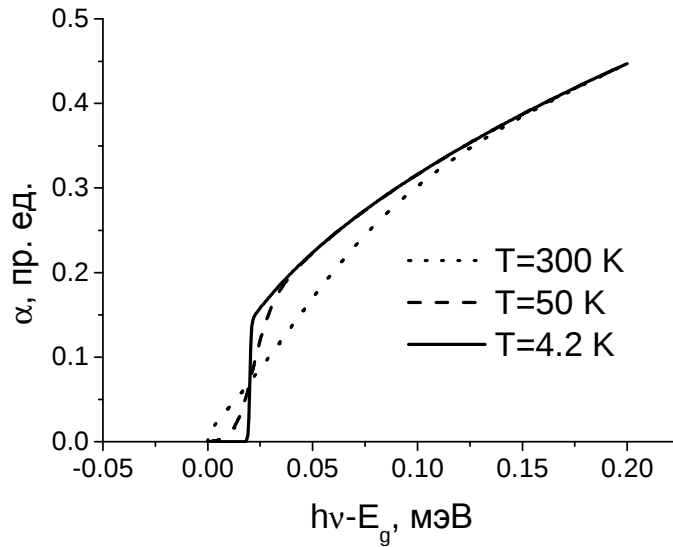


Рис. 7.9 Зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона в сильно легированном полупроводнике.

Эффект Франца-Келдыша

Рассмотрим теперь влияние внешнего электрического поля на межзонное поглощение света в полупроводниках. В обычных полупроводниках квантование электронного спектра в электрическом поле не наблюдается из-за большой ширины зон, из-за которой электрон рассеивается раньше, чем испытывает брэгговское отражение. Поэтому спектр электронов в присутствии электрического поля можно считать сплошным. Если построить зависимость положения дна зоны проводимости и потолка валентной зоны от координаты, то становится очевидно, что в электронном спектре отсутствует щель в присутствии электрического поля. Поэтому в присутствии электрического поля отсутствует порог поглощения света. Для расчета зависимости коэффициента поглощения от частоты в этом случае в формулах (7.20), (7.21) необходимо брать огибающую не плоскую волну, а огибающую в электрическом поле.

Рассмотрим простейший случай, когда потолок валентной зоны и дно зоны проводимости невырождены, а электрическое поле направлено вдоль оси x . Для простоты будем полагать что кристалл имеет зону Бриллюэна в виде куба. Тогда нормированные на 1 волновые функции имеют вид (см. раздел 2):

(7.37a)

$$\psi_c(r, k_y, k_z, n) = \frac{\sqrt{a}}{2\pi S} \exp(ik_y y + ik_z z) \int_{з.б.} dk_x \exp(ik_x x + \frac{i}{F} \int_0^{k_x} [\mathcal{E}_c(k'_x, k_y, k_z) - E_n(k_y, k_z)] dk'_x),$$

(7.37b)

$$\psi_v(r, k_y, k_z, m) = \frac{\sqrt{a}}{2\pi S} \exp(ik_y y + ik_z z) \int_{з.б.} dk_x \exp(ik_x x + \frac{i}{F} \int_0^{k_x} [\varepsilon_v(k'_x, k_y, k_z) - E_m(k_y, k_z)] dk),$$

Поглощаемая мощность в образце под воздействием света:

$$P(\omega) = \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{k_y, k_z, n, m} e^2 \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 E_0^2 \frac{\hbar}{\omega} \delta(\hbar\omega + E_m(k_y, k_z) - E_n(k_y, k_z)) \times \\ \left| \frac{a}{(2\pi)^2} \int dx dk_1 dk_2 \exp \left\{ ix(k_1 - k_2) + \frac{i}{F} \int_0^{k_1} dk_3 [\varepsilon_c(k_3, k_y, k_z) - E_n(k_y, k_z)] - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{i}{F} \int_0^{k_2} dk_3 [\varepsilon_v(k_3, k_y, k_z) - E_m(k_y, k_z)] \right\} \right|^2$$

Выполняя интегрирование по x и k_2 находим:

$$(7.38) \quad P(\omega) = \frac{4\pi a^2}{\hbar (2\pi)^2} \sum_{k_y, k_z, n, m} e^2 \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 E_0^2 \frac{\hbar}{\omega} \delta(\hbar\omega + E_m(k_y, k_z) - E_n(k_y, k_z)) \times \\ \times \left| \int dk_1 \exp \left\{ \frac{i}{F} \int_0^{k_1} dk_3 [\varepsilon_c(k_3, k_y, k_z) - \varepsilon_v(k_3, k_y, k_z) - E_n(k_y, k_z) + E_m(k_y, k_z)] \right\} \right|^2$$

Основной вклад в интеграл (7.38) дают области вблизи $k=0$. В этом случае (см. раздел 2)

$$\varepsilon_c(\mathbf{k}) \approx E_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_c}, \quad \varepsilon_v(\mathbf{k}) \approx E_v - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_v}, \\ E_n(k_y, k_z) \approx \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2m_c} + E_{cn} + \langle \varepsilon_c \rangle = \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2m_c} + \varepsilon_n, \\ E_m(k_y, k_z) \approx \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2m_v} + E_{mv} + \langle \varepsilon_v \rangle = \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2m_v} + \varepsilon_m$$

Кроме того по этой же причине пределы интегрирования по k можно распространить от $-\infty$ до ∞ .

Подставляя эти выражения в (7.38) и выполняя суммирование по k_y, k_z находим:

(7.39)

$$P(\omega) = \frac{2Sm^* a^2}{\omega \hbar^2} e^2 \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 E_0^2 \sum_{n, m} \theta(\hbar\omega - \varepsilon_n + \varepsilon_m) \left| \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left\{ \frac{i}{F} \left(\frac{\hbar^2 k^3}{6m^*} + (E_g - \varepsilon_n + \varepsilon_m)k \right) \right\} \right|^2 = \\ = \frac{2Sm^* a^2}{\omega \hbar^2} e^2 \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 E_0^2 \sum_{n, m} \theta(\hbar\omega - \varepsilon_n + \varepsilon_m) \left| 2\pi \left(\frac{2Fm^*}{\hbar^2} \right)^{1/3} Ai \left(\frac{(E_g - \varepsilon_n + \varepsilon_m)}{F} \left(\frac{2m^* F}{\hbar^2} \right)^{1/3} \right) \right|^2$$

где $Ai(x)$ - функция Эйри:

$$(7.40) \quad \text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dt \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt\right)$$

Из (7.39) видно, что слагаемые в сумме зависят только от разности $n-m$, но не зависят от суммы $n+m$, поэтому введем новые индексы $l = n - m$ и $K = (n + m)/2$. Отметим, что в кристалле длиной L_x находится ровно L_x/a состояний $\varepsilon_{n,m}$, поэтому суммирование по K дает множитель L_x/a . Поэтому поглощаемая мощность пропорциональна объему кристалла $V = L_x S$. Удобно перейти от суммирования по l к интегрированию по $\varepsilon = \varepsilon_n - \varepsilon_m$

($\sum_l = \frac{1}{Fa} \int d\varepsilon$). Теперь выражение для мощности можно переписать в виде:

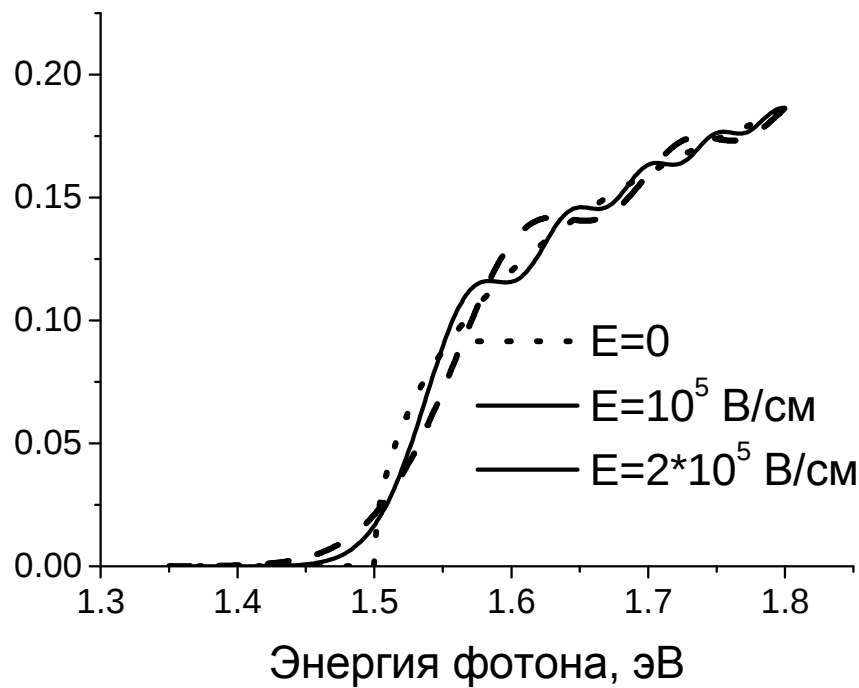


Рис. 7.10

$$(7.40) \quad P(\omega) = \frac{2SL_x m^* (2\pi)^2 \left(\frac{2Fm^*}{\hbar^2}\right)^{2/3}}{\omega \hbar^2 F} e^2 \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 E_0^2 \int_{-\infty}^{\hbar\omega} d\varepsilon \text{Ai}^2\left(\frac{(E_g - \varepsilon) \left(\frac{2m^* F}{\hbar^2}\right)^{1/3}}{F}\right) =$$

$$= \frac{2SL_x m^* (2\pi)^2 \left(\frac{2Fm^*}{\hbar^2}\right)^{1/3}}{\omega \hbar^2} e^2 \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 E^2 [\text{Ai}'^2(x_0) - x_0 \text{Ai}^2(x_0)]$$

где $x_0 = (E_g - \hbar\omega) \left(\frac{2m^*}{\hbar^2 F^2}\right)^{1/3}$. При получении (7.40) было использовано следующее свойство функции Эйри:

во функции Эйри:

$$\int_x^\infty Ai^2(t)dt = -x Ai^2(x) + Ai'^2(x), \quad Ai'(x) = \frac{dAi(x)}{dx}$$

Используя (7.40) и (7.24) находим выражение для коэффициента поглощения:

$$(7.41) \quad \alpha(\omega) = \frac{4\pi}{cn} \frac{m^*}{\hbar^2 \omega} \left(\frac{2Fm^*}{\hbar^2} \right)^{1/3} e^2 \left| \frac{\mathbf{e}_0 \mathbf{p}_{cv}}{m_0} \right|^2 [x_0 Ai^2(x_0) - Ai'^2(x_0)]$$

На рис. 7.10 показана зависимость безразмерной функции

$$\frac{e^2}{\hbar^2 \omega} \left(\frac{2Fm^*}{\hbar^2} \right)^{1/3} [x_0 Ai^2(x_0) - Ai'^2(x_0)]$$

которая содержит зависимость от частоты и электрического поля коэффициента поглощения, рассчитанная для трех значений электрического поля в полупроводнике с $E_g = 1.5$ эВ, $m^* = 0.067m_0$.

Примесное поглощение

Примесным поглощением принято называть поглощение света, когда начальное или конечное (или и то и другое) состояние электрона локализовано на примеси. Очевидно, что имеется два энергетических интервала для такого поглощения. В первом энергетическом интервале энергия фотона порядка ширины запрещенной зоны. Примерами таких переходов являются переходы электронов под действием света с акцепторов в зону проводимости или из валентной зоны на донорные уровни. Во втором энергетическом интервале энергия фотона порядка энергии ионизации примеси, что намного меньше ширины запрещенной зоны и обычно соответствует дальнему инфракрасному диапазону. Примерами таких переходов служат переходы электронов под действием света между уровнями донора или акцептора или ионизация доноров или акцепторов.

На рис. 7.11 приведена зависимость коэффициента поглощения света вблизи края фундаментального поглощения, измеренная в GaAs, легированном цинком, измеренная при $T=21K$ в работе M.D.Sturge Phys.Rev. v.127, 768 (1962).

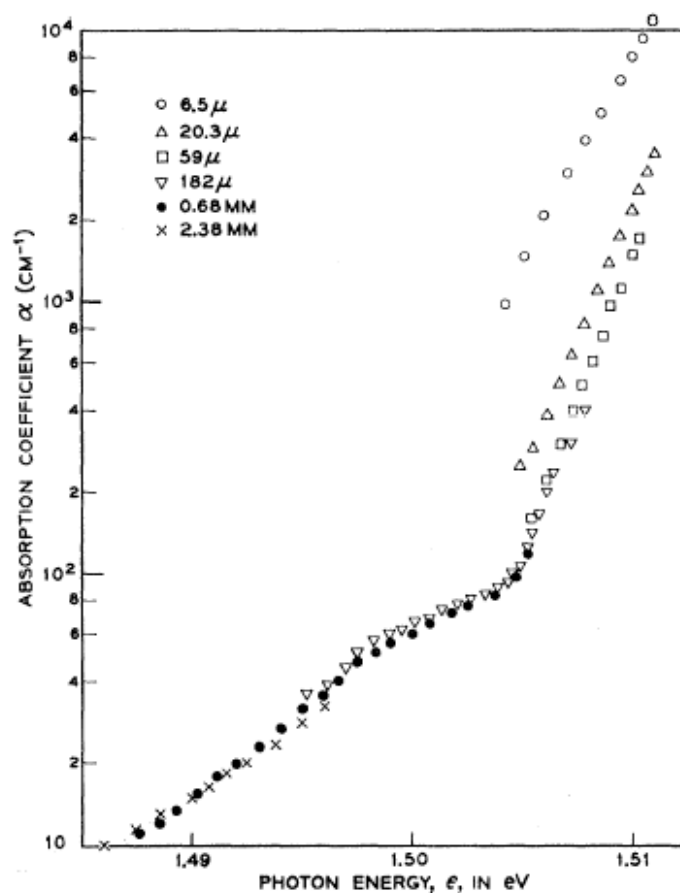


Рис.7.11 Зависимость коэффициента поглощения в GaAs, легированном цинком для образцов разной толщины при $T=21$ К.

Из рисунка хорошо видно присутствие длинноволнового «плеча» на спектре коэффициента поглощения. Отметим, что такие переходы чувствительны к заполнению примесных состояний и соответствующая добавка к коэффициенту поглощения зависит от температуры. В слабо компенсированных полупроводниках эта добавка сильно уменьшается при понижении температуры, поскольку доноры заполняются электронами, а акцепторы - дырками.

Примесное поглощение, соответствующее ионизации примесей или переходам с основного на возбужденное состояние примеси проявляется при низких температурах, когда носители заряда (электроны и дырки) находятся на примесях. Переходам между локализованными примесными состояниями в спектрах поглощения соответствуют узкие линии поглощения, а процессу ионизации – полоса поглощения. На рис. 7.12 приведены спектры фототермической ионизации кремния, легированного фосфором, измеренной в работе С. Jaggannath, et al. Phys.Rev B v.23, 2082 (1981). При наблюдении фототермической ионизации измеряется фотопроводимость образца. За счет того, что температура образца конечна, то изменение проводимости происходит даже при переходе электронов в возбужденные состояния примеси, поскольку с них электрон за счет термического возбуждения может оказаться в зоне проводимости.

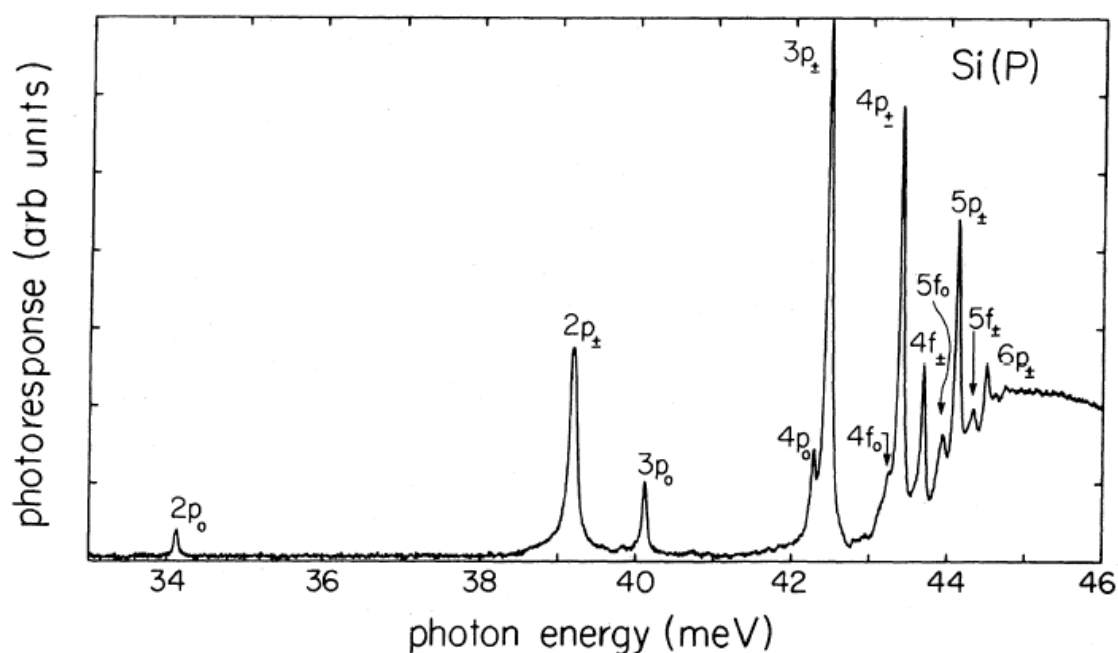


Рис. 7.12. Спектр фото термической ионизации кремния легированного бором, измеренный при $T=4.2$ К. Концентрация доноров $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

Обозначения над пиками на рис. 7.12 обозначает конечное состояние, в которое переходит электрон. Первая цифра соответствует главному квантовому числу состояния. Из-за анизотропии масс p-состояния донора в кремнии имеют разные энергии для проекций момента на ось вращения эллипсоида постоянной энергии равных 0 (состояние p_0) или $\pm \hbar$ (состояния $p_{\pm}$). Из рисунка хорошо видны переходы между дискретными уровнями и переходы в зону проводимости.

Кроме рассмотренных случаев примесного поглощения возможны переходы между состояниями акцептора и донора, в том случае, если донор и акцептор находятся недалеко друг от друга (в пределах боровского радиуса). Такому поглощению соответствуют узкие линии в спектрах коэффициента поглощения с энергиями порядка ширины запрещенной зоны. Эти спектры можно найти в книге [1].

Решеточное поглощение

В полярных кристаллах под действием электрического поля электромагнитной волны атомы разных подрешеток двигаются в противоположных направлениях – возбуждаются оптические колебания. Этот процесс можно рассматривать как рождение фононов за счет поглощения фотонов. В таком процессе должен выполняться закон сохранения энергии-импульса. Поскольку импульс фонона очень мал, по сравнению с размерами зоны Бриллюэна, то при поглощении одного фотона может родиться только поперечный длинноволновый оптический фонон. Для длинноволновых оптических фононов зависимостью

частоты от волнового вектора можно пренебречь. Движение атомов подрешеток описывается следующими уравнениями (для простоты мы рассматриваем одномерную решетку):

$$(7.42) \quad \begin{aligned} m_1 \ddot{r}_n &= qE(t) + k(R_n + R_{n-1} - 2r_n) \\ m_2 \ddot{R}_n &= -qE(t) + k(r_n + r_{n+1} - 2R_n) \end{aligned}$$

где q – эффективный заряд атома подрешетки массой m_1 , k – жесткость связи между атомами. Пренебрегая величиной волнового вектора фонона можно считать, что зависимость смещения атомов от элементарной ячейки n отсутствует. Кроме того, поскольку суммарная сила со стороны внешнего поля, действующая на элементарную ячейку равна нулю, то $m_1 r_n + m_2 R_n = 0$. Вводя переменную $r = r_n - R_n$ и учитывая затухание оптических колебаний решетки из (7.42) получаем:

$$(7.43) \quad \ddot{r} = \frac{qE}{\bar{M}} - \omega_T^2 r - \gamma \dot{r}$$

где $\bar{M} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, $\omega_T^2 = 2k / \bar{M}$, γ – коэффициент, описывающий затухание. Если полагать, что $E(t) = E \exp(-i\omega t)$, то находим:

$$(7.44) \quad r(t) = \frac{qE}{\bar{M}} \frac{\exp(-i\omega t)}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

Нетрудно понять, что для кубического кристалла уравнения (7.43), (7.44) также справедливы, поскольку в них линейный отклик не зависит от направления поля. Плотность тока, связанная с движением атомов равна:

$$(7.45) \quad j(t) = N(q\dot{r}_n - q\dot{R}_n) = Nq\dot{r} = -i\omega \frac{Nq^2 E \exp(-i\omega t)}{\bar{M}(\omega_T^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)},$$

где N – концентрация элементарных ячеек в кристалле. Из (7.45) находим проводимость:

$$(7.46) \quad \sigma(\omega) = -i\omega \frac{Nq^2}{\bar{M}(\omega_T^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)}$$

и диэлектрическую проницаемость:

$$(7.47) \quad \kappa(\omega) = \kappa_\infty - \frac{4\pi\sigma(\omega)}{i\omega} = \kappa_\infty + \frac{4\pi Nq^2}{\bar{M}(\omega_T^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} = \kappa_\infty + \frac{(\kappa_0 - \kappa_\infty)\omega_T^2}{(\omega_T^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)},$$

где введены следующие обозначения κ_0 , и κ_∞ – диэлектрические проницаемости при $\omega = 0$ и при $\omega \gg \omega_T$, но $\hbar\omega \ll E_g$, причем $\kappa_0 > \kappa_\infty$. Отметим, что величины κ_0 , и κ_∞ можно найти экспериментально и их значения приведены в справочниках.

Закон дисперсии продольных мод находится из условия $\varepsilon(\omega) = 0$. Используя (7.47) находим:

$$(7.48) \quad \omega_L = -i\frac{\gamma}{2} + \sqrt{\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty} \omega_T^2 - \frac{\gamma^2}{4}}$$

При $\gamma \rightarrow 0$ из (7.48) получается соотношение Закса-Лиддейна-Теллера:

$$\frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} = \frac{\kappa_0}{\kappa_\infty}$$

Причина, по которой частота продольных колебаний больше частоты поперечных оптических колебаний состоит в возникновении макроскопических электрических полей при распространении продольных колебаний.

Дисперсия поперечных волн находится из условия $\omega = cq / \sqrt{\epsilon(\omega)}$. Пренебрегая затуханием, находим:

$$(7.49) \quad q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\kappa_\infty + \frac{(\kappa_0 - \kappa_\infty)}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_T^2}}} \quad \text{или} \quad q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\kappa_\infty} \sqrt{\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}}$$

Зависимость $\omega(q)$ для поперечных колебаний изображена на рис. 7.13. Из рисунка хорошо видно, что волна не распространяется в интервале частот $\omega_T < \omega < \omega_L$. В этом частотном интервале кристалл отражает излучение почти полностью (неполное отражение связано с отличием от нуля γ). Этот частотный интервал называют областью остаточных лучей. Отметим, что поперечная электромагнитная волна, распространяющаяся в кристалле возбуждает поперечные оптические колебания решетки, поэтому изменяется закон дисперсии фотонов. Такие распространяющиеся колебания называются фононными поляритонами. Как и в случае с экситонным поляритоном распространяющаяся электромагнитная волна сопровождается возбуждениями собственных колебаний кристалла в данном случае фононов. Поэтому такую волну иногда называют фононным поляритоном.

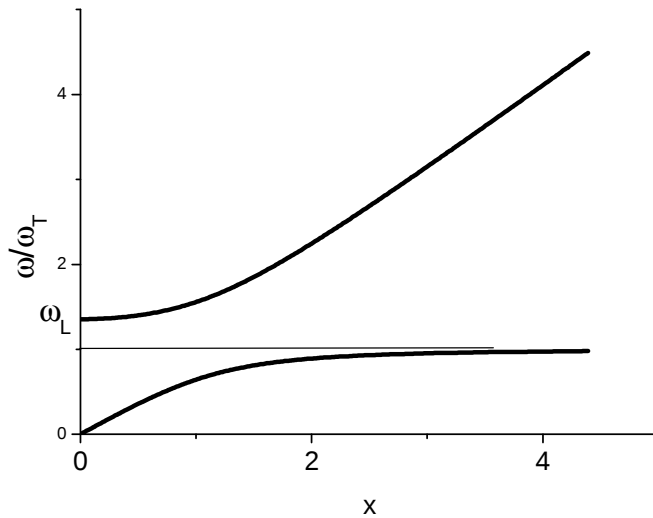


Рис. 7.13 Зависимость частоты поперечных волн от безразмерного волнового вектора $x = qc / \sqrt{\kappa_\infty} \omega_T$.

Зависимость коэффициента отражения кристалла от частоты можно найти, если воспользоваться известной формулой для коэффициента отражения света от полубесконечной среды, падающего из вакуума по нормали к среде:

$$(7.50) \quad R = \frac{(\operatorname{Re}(\sqrt{\kappa}) - 1)^2 + (\operatorname{Im}(\sqrt{\kappa}))^2}{(\operatorname{Re}(\sqrt{\kappa}) + 1)^2 + (\operatorname{Im}(\sqrt{\kappa}))^2}$$

На рис. 7.14 приведено сравнение спектров отражения вычисленных по (7.50) с использованием (7.47) для нескольких полупроводников. Рисунок взят из книги [1], там же можно найти параметры для (7.47) этих полупроводников.

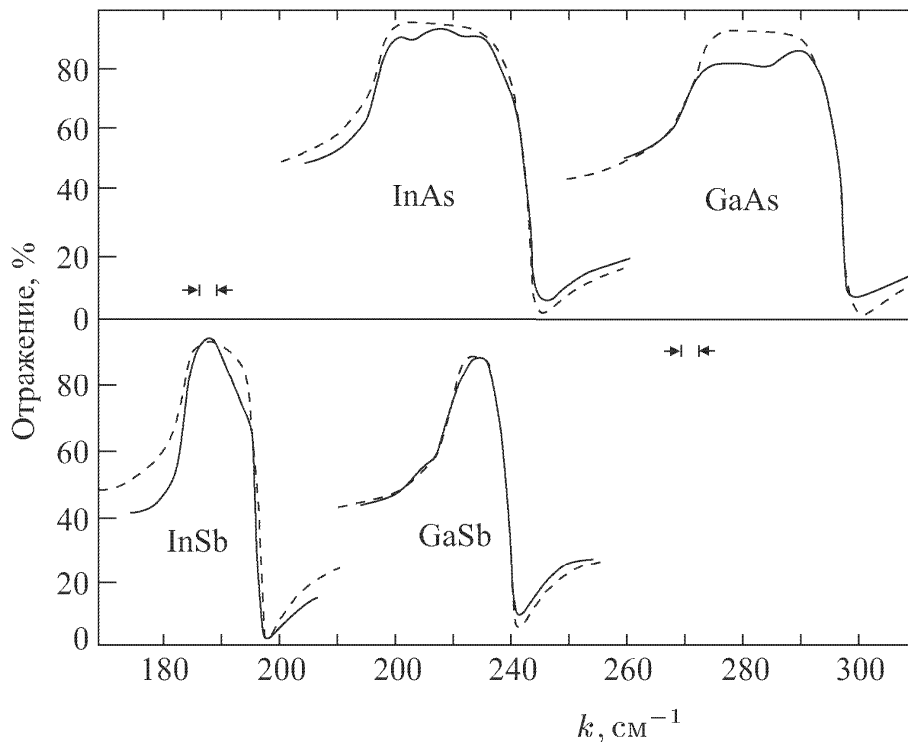


Рис. 7.14. Сравнение экспериментальных спектров отражения (сплошные линии) с рассчитанными по (7.50) (штриховые линии).

Сделаем важное замечание, касающееся поглощения света фонами. Коэффициент поглощения определяется величиной γ , которая может рассматриваться как обратное время жизни оптического фона. Какова природа появления этой величины? Обычно это ангармонические эффекты в колебаниях кристалла, которые приводят к распаду оптического фона на два акустических.

В неполярных полупроводниках таких как Si и Ge однофононое поглощение в результате которого поглощается фотон и образуется фотон, запрещено. В таких материалах наблюдается многофононное поглощение. Его величина на несколько порядков меньше однофононного поглощения. Спектры многофононного поглощения для германия и кремния приведены на рис. 7.15 и 7.16. Буквы над пиками обозначают типы рождающихся фоно-

нов. Аналогичное многофононное поглощение имеет место и в полярных полупроводниках. Соответствующие спектры можно найти в книгах [2], [3]

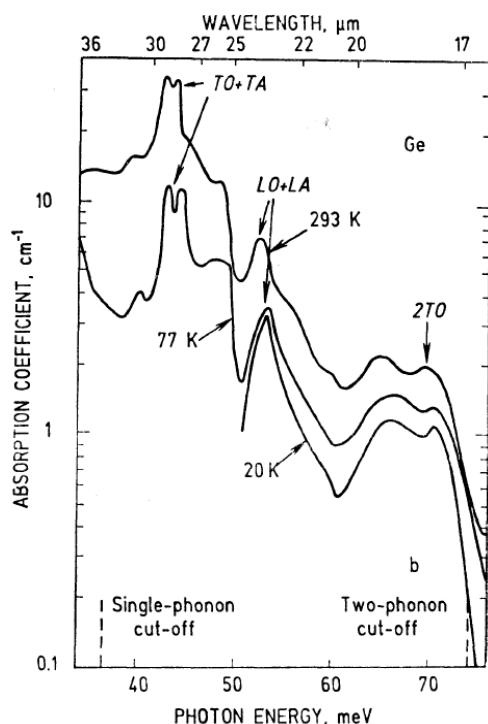


Рис. 7.15 Спектр фононного поглощения в германии (из работы [4])

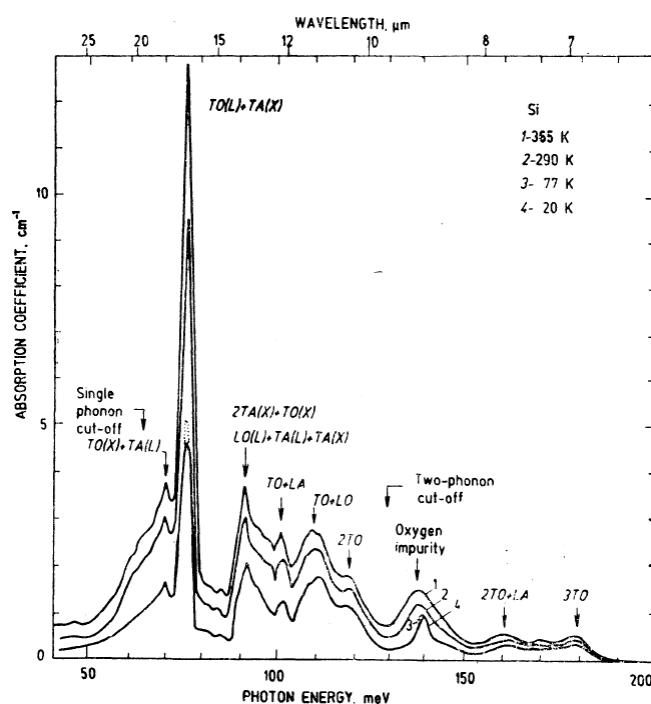


Рис. 7.15 Спектр фононного поглощения в кремнии (из работы [5])

Испускание света полупроводниками

Испускание света полупроводниками часто называют люминесценцией. Межзонная люминесценция может возникнуть под действием мощного внешнего освещения полупроводника, в этом случае её называют фотолюминесценцией, под действием инжекции неосновных носителей в результате протекания тока (электролюминесценция) или под действием электронного пучка (катодолюминесценция). Поскольку время релаксации энергии электрона внутри зоны много меньше времени рекомбинации, то неравновесные носители скапливаются около краев зон. Поэтому спектр межзонной люминесценции представляет собой узкую линию в области энергий, соответствующих ширине запрещенной зоны. Ширина этой линии увеличивается с ростом температуры из-за температурного размытия функции распределения неравновесных носителей. При низких температурах в достаточно чистых полупроводниках наблюдается экситонная люминесценция. Ширина линии экситонной люминесценции определяется не температурным распределением носителей, а временем жизни экситона, которое уменьшается с ростом температуры. Экситоны взаимодействуют с дефектами. За счет этого взаимодействия понижается энергия экситона, когда экситон располагается около дефекта (примеси). Такие экситоны часто называются связанными экситонами. Линия люминесценции связанных экситонов сдви-

нута (обычно на величины порядка или меньше 1 мэВ) в область меньших энергий по сравнению с линией свободного экситона. В непрямозонных полупроводниках, таких как Ge и Si экситоны живут достаточно долго для того чтобы образовывать молекулы при достаточно сильном возбуждении (бизекситоны) или даже конденсироваться в капли электронно-дырочной жидкости. Эти образования также имеют линии излучения, отличные от линий излучения свободного и связанного экситона. Отметим, что в чистых Ge и Si при низких температурах наблюдаются линии люминесценции от экситонов при энергиях меньших ширины энергии образования экситона минус энергии междолинных фононов, которые обеспечивают закон сохранения импульса при непрямозонной рекомбинации.

- [1] Питер Ю, Мануэль Кардона Основы физики полупроводников. М. Физматлит 2002
 [2] A.Dargys, J.Kundrotas Handbook on Physical properties of Ge, Si, GaAs and InP. Vilnius 1994.
 [3] Оптические свойства полупроводников (полупроводниковые соединения типа $A^{III}B^V$) гпод ред. Р.Уиллардсона и А. Бира М. Мир 1970.
 [4] S.J.Fray, F.A.Johnson, J.E.Quarrington, N.Williams Proc. Phys. Soc. v.85, 153 (1965)
 [5] F.A.Johnson Proc. Phys. Soc. v.73, 265 (1959).

Задача: Найти спектр экситонного поглощения.

Решение

Вычислим коэффициент поглощения света на переходах в связанные состояния экситона. Прежде всего, рассмотрим волновую функцию экситона. Она зависит от двух переменных: координаты электрона и дырки. Кроме того, имеется интеграл движения: суммарный импульс экситона.

Разложим волновую функцию экситона по функциям Ванье:

$$(7.51) \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h} C(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) a_e(\mathbf{r}_e - \mathbf{R}_e) a_v(\mathbf{r}_h - \mathbf{R}_h)$$

Пользуясь методами изложенными в разделе 2 для движения электрона в слабых полях в кристалле получаем уравнение для огибающей C :

$$(7.52) (H_e(R_e) + H_h(R_h) + V(R_e - R_h))C(R_e, R_h) = EC(R_e, R_h)$$

В простейшем случае приближения эффективной массы

$$(7.53) H_{e,h}(R_{e,h}) = -\hbar^2 \Delta_{R_{e,h}} / 2m_{e,h}$$

В этом случае решение имеет вид:

$$(7.54) C(R_e, R_h, \mathbf{k}) = \frac{\exp(i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho})}{\sqrt{N}} a^{3/2} \varphi(r)$$

где $\boldsymbol{\rho} = \frac{m\mathbf{R}_e + m_h\mathbf{R}_h}{m_e + m_h}$, $r = \mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h$, φ - функция, описывающая связанное состояние. Волновая функция (7.34) нормирована на единицу при суммировании по $\boldsymbol{\rho}$ и интегрировании по r .

Далее нам потребуется разложение волновой функции (7.51) не по функциям Ванье, а по функциям Блоха. Для этого воспользуемся соотношением (2.2), тогда соотношение (7.51) можно переписать в виде:

$$(7.55) \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h} C(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) a_c(\mathbf{r}_e - \mathbf{R}_e) a_v(\mathbf{r}_h - \mathbf{R}_h) = \sum_{k_e, k_h} \Phi(k_e, k_h) \psi_c(k_e, r_e) \psi_h(k_h, r_h)$$

где

$$(7.56) \Phi(k_e, k_h) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h} C(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h, k) \exp(-ik_e R_e - ik_h R_h)$$

Учитывая, что $R_e = \rho + r \frac{m_h}{m_e + m_h}$, $R_h = \rho - r \frac{m_e}{m_e + m_h}$, и используя (7.34) находим:

$$(7.57) \begin{aligned} \Phi(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h} C(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h, k) \exp(-i\mathbf{k}_e \mathbf{R}_e - i\mathbf{k}_h \mathbf{R}_h) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\rho, r} \frac{\exp(i\mathbf{k}\rho)}{\sqrt{N}} a^{3/2} \varphi(r) \exp(-i\mathbf{k}_e \rho - i\mathbf{k}_h \rho) \exp\left(-i\mathbf{k}_e \mathbf{r} \frac{m_h}{m_h + m_e} + i\mathbf{k}_h \mathbf{r} \frac{m_e}{m_h + m_e}\right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h} a^{3/2} \varphi(r) \exp\left(-i\mathbf{k}_e \mathbf{r} \frac{m_h}{m_h + m_e} + i\mathbf{k}_h \mathbf{r} \frac{m_e}{m_h + m_e}\right) \end{aligned}$$

Из (7.57) видно, что в разложении (7.55) $k_e + k_h = k$. Отметим, что $\mathbf{r}$ в последней сумме пробегает все эквивалентные узлы решетки.

Для нахождения коэффициента поглощения света экситонами необходимо вычислить поглощаемую мощность.

Матричный элемент оператора взаимодействия электрона с плоской электромагнитной волной (7.11) на блоховских волновых функциях равен: $\frac{ep_{cv} E_0 \delta_{k_c, k_v + q}}{i\omega m_0}$, где E_0 – амплитуда

электрического поля волны. Оператор поглощения фотона удобно представить в виде:

$$(7.58) H_{\text{int}} = \sum_{kckv} \frac{ep_{cv} E_0 \delta_{k_c, k_v + q}}{i\omega m_0} b_{k_c}^+ a_{kv}$$

где a_k оператор уничтожения электрона в валентной зоне, а b_k^+ – оператор рождения электрона в зоне проводимости.

Волновую функцию начального состояния, когда экситон отсутствует можно представить в виде:

$$(7.59) |i\rangle = \prod_k a_k^+ |0\rangle,$$

где волновая функция $|0\rangle$ описывает пустую валентную зону. Волновая функция системы с экситоном имеет вид:

$$(7.60) |f\rangle = \sum_{k_e, k_h} \Phi(k_e, k_h) b_{k_e}^+ a_{-k_h} |i\rangle$$

Тогда матричный элемент взаимодействия $\langle f | H_{\text{int}} | i \rangle$ можно представить в виде:

$$(7.61) \begin{aligned} \langle f | H_{\text{int}} | i \rangle &= \sum_{k_e, k_h, k_c, k_v} \Phi^*(k_e, k_h) \langle i | b_{k_e} a_{-k_h}^+ \frac{ep_{cv} E_0 \delta_{k_c, k_v + q}}{i\omega m_0} b_{k_c}^+ a_{kv} | i \rangle = \\ &= \sum_{k_c, k_v} \Phi^*(k_c, -k_v) \frac{ep_{cv} E_0 \delta_{k_c, k_v + q}}{i\omega m_0} = \frac{eE_0}{i\omega m_0} \sum_{kv} \Phi^*(k_v + q, -k_v) p_{cv}(k_v) \end{aligned}$$

Используя (7.37) для Φ находим:

$$(7.62) \langle f | H_{\text{int}} | i \rangle = \frac{eE_0}{i\omega m_0} \sum_{kv} \Phi^*(k_v + q, -k_v) p_{cv}(k_v) = \frac{ep_{cv}(0) E_0 N}{i\omega m_0 \sqrt{N}} \delta_{k, q} \varphi(0)$$

где последнее равенство в (7.42) справедливо для разрешенных переходов

Поглощаемая мощность:

$$(7.63) \quad P = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k N \left(\frac{e |p_{cv}| E_0}{\omega m_0} \right)^2 a^3 \varphi^2(0) \delta_{k,q} \hbar \omega \delta(\hbar \omega - E_e) = \frac{2\pi e^2 V E_0^2}{\omega} \left| \frac{p_{cv} \xi}{m_0} \right|^2 \varphi^2(0) \delta(\hbar \omega - E_e)$$

Из (7.43) можно получить выражение для коэффициента поглощения, если воспользоваться выражением (7.24) для падающего потока излучения:

$$(7.64) \quad \alpha = \frac{P}{I dz} = \frac{(2\pi)^2 e^2}{cn} \frac{1}{\omega} \left| \frac{p_{cv} \xi}{m_0} \right|^2 \varphi^2(0) \delta(\hbar \omega - E_e)$$

Если учесть размытие спектра экситонов тогда $\delta(\hbar \omega - E_1) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(\hbar \omega - E_1)^2 + \gamma^2}$, где γ

описывает уширение спектра экситонов, основной причиной которого является взаимодействие с фононами и примесями, то выражение для коэффициента поглощения принимает вид:

$$(7.65) \quad \alpha(\omega) = \frac{4\pi e^2}{cn} \frac{1}{\omega} \left| \frac{p_{cv} \xi}{m_0} \right|^2 \varphi^2(0) \frac{\gamma}{(\hbar \omega - E_1)^2 + \gamma^2}$$

Отметим, что $\varphi(0) \neq 0$ только для S состояний экситона, кроме того для n_e уровня

$$(7.66) \quad \varphi^2(0) = \frac{1}{\pi a_B^3 n_e^3}$$

8. Оптические свойства низкоразмерных систем

Гетеропереходы

Рассмотрим контакт двух полупроводников. Дно зоны проводимости и потолок валентной зоны в этих полупроводниках имеют разные энергии и разные ширины запрещенной зоны. Такие соединения двух различных полупроводников называются гетеропереходами. Существует три вида гетеропереходов. Гетеропереходом первого рода называется гетеропереход в котором запрещенная зона более узкозонного полупроводника полностью находится внутри запрещенной зоны широкозонного полупроводника. На рис. 8.1а приведена зонная структура гетероперехода. В качестве примера гетероперехода первого рода можно привести гетеропереход $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, который в настоящее время является наиболее изученным. Гетеропереходом второго рода называется гетеропереход в котором запрещенные зоны полупроводников перекрываются частично. В качестве гетероперехода второго рода можно привести гетеропереход GaAs/GaP , зонная структура которого изображена на рис. 8.1 б. В гетеропереходах третьего рода запрещенные зоны не перекрываются. Примером такого перехода служит гетеропереход InAs/GaSb , зонная структура которого изображена на рис. 8.1 в.

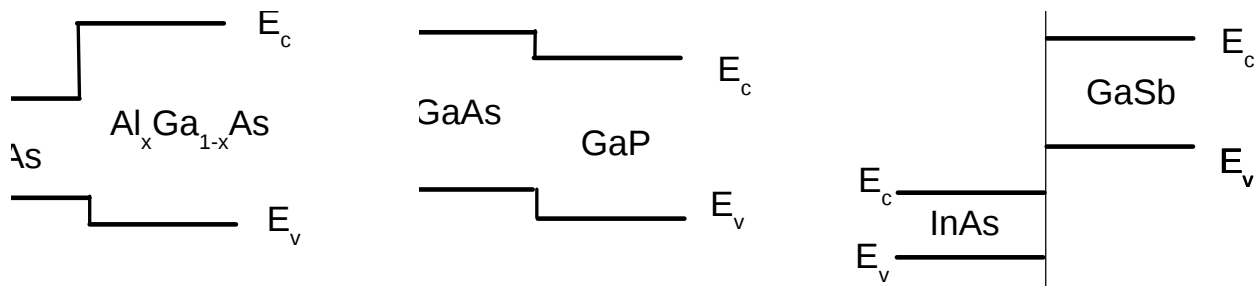


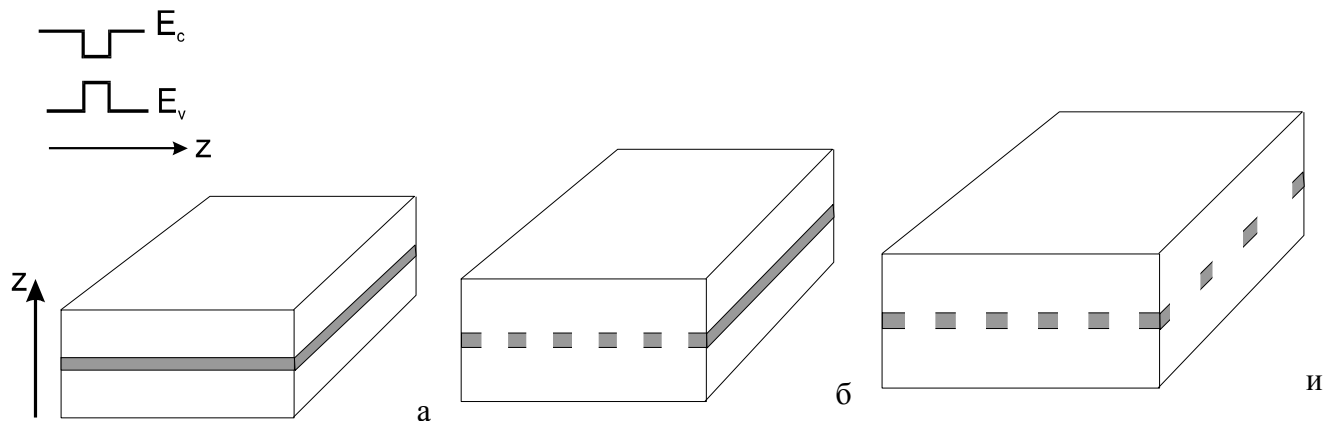
Рис. 8.1. Зонные диаграммы гетеропереходов $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (а), GaAs/GaP (б) и InAs/GaSb (в).

Как правило, постоянные решетки у разных полупроводников заметно различаются. Существует лишь небольшое количество пар полупроводников, в которых постоянные решетки близки. Постоянные решетки близки у GaAs и у твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ для любой доли алюминия в нем, имеют близкие постоянные решетки GaAs и Ge , InP и $\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}$, InAs и GaSb . В том случае если постоянные решеток полупроводников заметно отличаются (от нескольких десятых долей процентов и более), а толщины обоих полупроводников достаточно велики (больше критической толщины, см. ниже) то на гетеропереходе возникают дислокации – двумерные дефекты решетки. Если один из полупроводников имеет толщину меньшую критической толщины, то дислокации не возникают, а постоянная решетки в плоскости роста тонкого полупроводника совпадает с по-

стоянной решетки толстого полупроводника, т.е. тонкий полупроводник упруго деформируется. Происходит это потому, что упругая энергия пропорциональна объему деформированного материала, и если она меньше энергии образования дислокаций, то они не возникают. При критической толщине упругая энергия становится равной энергии образования дислокаций. Следует отметить, что критическая толщина зависит от разницы постоянных решетки и упругих модулей деформированного материала.

Квантовые ямы, квантовые провода и квантовые точки

Рассмотрим тонкий слой узкозонного полупроводника, который заключен внутри широкозонного полупроводника. Пусть полупроводники образуют гетеропереход первого рода. Тогда узкозонный полупроводник образует тонкую потенциальную яму, как для электронов, так и для дырок. Из квантовой механики известно, что в узких квантовых ямах энергия, соответствующая движению электрона в направлении гетерограниц квантуется. Для того чтобы наблюдать это квантование необходимо, чтобы энергия квантования превосходила тепловую энергию и ширину размытия спектра за счет столкновений. Обычно это происходит, когда ширина тонкого слоя полупроводника меньше 300 Å. Тонкий слой полупроводника, в котором наблюдаются явления размерного квантования, называется квантовой ямой (quantum well). Отметим, что в плоскости квантовой ямы сохраняется трансляционная инвариантность, а, следовательно, сохраняются две компоненты волнового вектора, лежащие в этой плоскости.



Структуры с квантовой ямой (а), с квантовыми проволоками (б) и с квантовыми точками (в). Узкозонный полупроводник закрашен серым цветом.

В простейшем случае, когда движение электрона независимо во всех трех направлениях (т.е. гамильтониан есть сумма гамильтонианов, описывающих движение электронов в различных направлениях) спектр электронов представляет собой сумму энергии свободного движения вдоль квантовой ямы и энергии размерного квантования. Например,

в случае квадратичного и изотропного закона дисперсии электрона закон дисперсии электрона в квантовой яме с нормалью вдоль оси z имеет вид:

$$(8.1) \quad \varepsilon_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n(0) + \frac{\hbar^2}{2m_n} (k_x^2 + k_y^2),$$

где m_n - эффективная масса электрона, n – номер уровня размерного квантования (обычно наименьшее значение выбирается равным единице). Совокупность электронных состояний с фиксированным n называют подзоной размерного квантования. Поскольку электроны в квантовой яме могут свободно двигаться в двух направлениях, то для их обозначения часто используется термин «двумерный электронный газ» или 2D-газ. Плотность состояний, соответствующая (8.1), с учетом спинового вырождения имеет вид лестницы с одинаковой высотой ступеней:

$$(8.2) \quad G(\varepsilon) = \frac{m_n}{\pi \hbar^2} \sum_{n=1} \theta(\varepsilon - \varepsilon_n)$$

На рис. 8.3 изображена зависимость (8.2) для зоны проводимости квантовой ямы шириной 100Å в гетероструктуре $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$. В этой структуре имеется две подзоны размерного квантования в зоне проводимости квантовой ямы.

Значительно сложнее устроен спектр квантовой ямы в валентной зоне. Дело в том, что отражение от гетерограницы приводит к взаимодействию подзон легких и тяжелых дырок. Это приводит к тому, что тяжелая (легкая) дырка при отражении может стать с некоторой вероятностью легкой (тяжелой), если это не запрещено законами сохранения энергии-импульса. Исключение составляют нормально падающие дырки на плоскость (001), где такое замешивание мало и часто им пренебрегают. Это замешивание приводит к непараболичности электронного спектра в валентной зоне. Характерный масштаб непараболичности – расстояние между уровнями размерного квантования. На рис. 8.4 показан спектр электронов в валентной зоне квантовой ямы шириной 100Å в гетероструктуре $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$, выращенной на плоскости (001). Подзоны размерного квантования в валентной зоне принято обозначать двумя буквами hh или lh и цифрой. Например, hh2, что означает вторая подзона зона тяжелых дырок, или lh1, что означает первая подзона легких дырок. Тип подзоны определяется типом состояний, который формирует состояния с нулевым значением волнового вектора электрона вдоль квантовой ямы (т.е. нормально падающими на гетерограницу электронами). Плотность состояний в валентной зоне также имеет вид лестницы, но ступени этой лестницы не плоские из-за зависимости массы электронов от энергии.

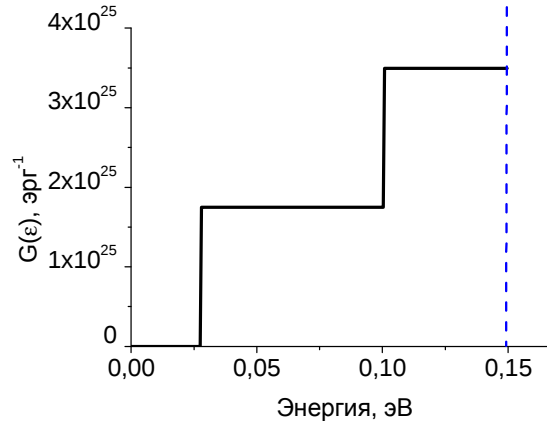


Рис. 8.3. Плотность состояний в зоне проводимости квантовой ямы гетероструктуры $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$. Вертикальной линией показано положение дна зоны проводимости в $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$. Начало отсчета энергии выбрано на дне зоны проводимости объемного GaAs.

Если ограничить движение электронов еще в одном направлении, как это показано на рис. 8.2б, то электрон может свободно двигаться только в одном направлении. В этом направлении сохраняется трансляционная инвариантность и поэтому сохраняется волновой вектор. Для изотропного и квадратичного закона дисперсии в объеме полупроводника закон дисперсии в квантовой проволоке из этого материала имеет вид:

$$(8.3) \quad \varepsilon_{n,m}(k_{\parallel}) = \varepsilon_{n,m}(0) + \frac{\hbar^2}{2m_n} k_{\parallel}^2$$

где $k_{\parallel}$ - компонента волнового вектора вдоль квантовой проволоки, n, m - квантовые числа, соответствующие квантованию движения в двух направлениях. Плотность состояний, соответствующая закону дисперсии (8.3), имеет вид:

$$(8.4) \quad G(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m_m}{2}} \sum_{m,n} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \varepsilon_{n,m}(0)}} \theta(\varepsilon - \varepsilon_{n,m}(0))$$

Из (8.4) хорошо видны корневые особенности плотности состояний, которые характерны для одномерных систем. В реальных системах плотность состояний не обращается в бесконечность благодаря неопределенности энергии электрона за счет столкновений. Столкновения электронов приводят к тому, что физический смысл имеет плотность состояний, усредненная по интервалу неопределенности энергии. Кроме того, если исследуется плотность в массиве квантовых проволок, то за счет разброса параметров отдельных проволок появляется дополнительный фактор, сглаживающий особенности в плотности состояний.

Электроны в квантовых проволоках иногда называют одномерным электронным газом или 1D-газом.

Если движение ограничено во всех направлениях, то такие объекты называются квантовыми точками (см. рис. 8.2в). Спектр квантовых точек дискретный. В том случае, когда имеется массив квантовых точек, плотность состояний непрерывная функция от энергии из-за разброса отдельных квантовых точек. При исследовании спектра одной квантовой точки наблюдаются узкие линии, ширина которых определяется частотой столкновений. В современной физике полупроводников наиболее часто исследуются массивы квантовых точек, которые образуются сами при определенных режимах роста гетероструктур, в которых постоянная решетки узкозонного полупроводника заметно больше. Типичным примером является рост InAs на GaAs. Постоянная решетки InAs 6.058 Å, а GaAs -5.85 Å. При росте слоя InAs толщиной более двух-трех монослоев энергетически выгодно расти не сплошному слою (за счет упругой энергии), а отдельным квантовым точкам, размер которых порядка ста ангстрем (он зависит от режимов роста структуры). При этом материал точек неоднородной деформирован, деформирован также и арсенид галлия в непосредственной близости квантовой точки. Механизм роста указанного типа впервые был исследован Странски и Крастановым, поэтому его называют механизмом роста Странски и Крастанова.

Следует отметить, что квантовые ямы нашли широкое применение в современных полупроводниковых приборах: лазерах, транзисторах, модуляторах света и др.. Квантовые точки используются в полупроводниковых лазерах. Квантовые проволоки пока не нашли свое применение в полупроводниковых приборах несмотря на то, что в них наблюдался ряд интересных физических явлений, таких как квантование электрического сопротивления. Вероятной причиной отсутствия реальных приборов на квантовых проволоках является недостаточно хорошо разработанная технология их изготовления.

Межзонное поглощение света в квантовой яме. Правила отбора для межзонных оптических переходов

Межзонным поглощением света в квантоворазмерных структурах (так принято называть совокупность квантовых ям, проволок и квантовых точек) принято называть электронные переходы из валентной зоны в зону проводимости. Переходы между подзонами (уровнями) размерного квантования, принадлежащими одной зоне, например, валентной, называются межподзонами (межуровневыми) переходами.

Рассмотрим межзонные переходы в прямозонной квантовой яме под действием света. Волновая функция электрона в квантовой яме имеет вид:

$$(8.5) \quad \Psi_n^{c,v}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{r}) = \frac{\exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r})}{\sqrt{S}} \varphi_n(z) \psi^{c,v}(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}),$$

где верхний индекс обозначает зону, S - площадь квантовой ямы, $\varphi_n(z)$ - огибающая, описывающая движение вдоль оси z в n -ой подзоне размерного квантования, $\psi^{c,v}(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})$ - периодическая часть блоховской волновой функции, $\mathbf{k}_0$ - волновой вектор, соответствующий потолку валентной зоны или дну зоны проводимости. Будем полагать, что в отсутствии размерного квантования оптические переходы разрешены. Найдем матричный элемент импульса, который определяет вероятность оптических переходов. Согласно (8.5)

$$(8.6) \quad \langle \Psi_n^c(\mathbf{k}_{\parallel}^c, \mathbf{r}) | \mathbf{p} | \Psi_m^v(\mathbf{k}_{\parallel}^v, \mathbf{r}) \rangle = \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k}_0) \delta_{k_{\parallel}^c, k_{\parallel}^v} \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi_n^c)^* \varphi_m^v dz = \mathbf{p}_{cv}(\mathbf{k}_0) \delta_{k_{\parallel}^c, k_{\parallel}^v} \chi,$$

где величина χ называется интегралом перекрытия. В симметричной квантовой яме огибающие $\varphi_{n,m}(z)$ обладают определенной четностью относительно отражения в плоскости, проходящей через середину квантовой ямы. Все огибающие с нечетным индексом зоны четные функции, а с четным индексом – нечетные функции. Интеграл в (8.6) отличен от нуля только тогда, когда обе функции $\varphi_{n,m}$ имеют одинаковую четность. Таким образом, в симметричных квантовых ямах разрешены межзонные переходы с сохранением четности. Если бы потенциальные ямы для электронов и дырок были бесконечно глубокими, как известно из квантовой механики, огибающая $\varphi_n(z) = \sqrt{2} \sin(\pi n(z - z_0)/d) / \sqrt{d}$, где z_0 – координата одной из гетерограниц квантовой ямы. Эта огибающая зависит только от номера и ширины квантовой ямы. Очевидно, что в этом случае разрешены только переходы с сохранением номера подзоны. В квантовых ямах конечной глубины разрешены переходы с изменением номера подзоны на четное число, но наибольшей вероятностью обладают переходы с сохранением номера подзоны.

Решая задачу о нахождении волновых функций в валентной зоне полупроводников A_3B_5 можно показать, что в квантовых ямах, выращенных на плоскостях (001) (эта плоскость наиболее часто используется для роста гетероструктур) и (111) состояния тяжелых дырок с нулевым импульсом вдоль квантовой ямы обладают проекцией полного момента импульса равен $\pm 3\hbar/2$, а состояния легких дырок - $\pm \hbar/2$. Момент импульса электрона в Γ -долине зоны проводимости при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ равен спину электрона, и поэтому его проекция на нормаль к квантовой яме равна $\pm \hbar/2$. Момент импульса циркулярно-поляризованного фотона, падающего нормально на квантовую яму равен $\pm \hbar$. Используя закон сохранения проекции импульса на нормаль к квантовой яме получаем правила отбора для поглощения

циркулярно поляризованных фотонов, нормально падающих на квантовую яму. Эти правила изображены на рис. 8.5.

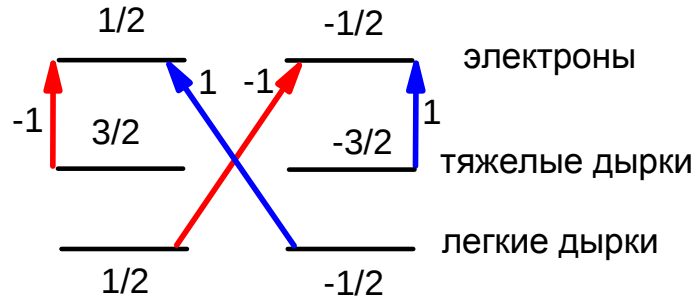


Рис. 8.5 Разрешенные межзонные переходы в квантовой яме при поглощении циркулярно поляризованных фотонов. Проекция момента импульса приведены в единицах $\hbar$.

Подчеркнем две важные особенности обсуждаемых правил отбора оптических переходов. Во-первых, они справедливы на длинноволновом крае перехода, т.е. только для $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$. Во-вторых, края подзон тяжелых и легких дырок в квантовых ямах имеют различные энергии, поэтому, используя циркулярно-поляризованное излучение, в квантовых ямах можно создавать электроны в зоне проводимости с определенной проекцией спина на нормаль к квантовой яме. Например, в результате поглощения фотона с проекцией момента импульса $\hbar$ с энергией, соответствующей переходу из подзоны тяжелых дырок в электронную подзону, электроны, рожденные в электронной зоне, имеют проекцию спина на нормаль к квантовой яме $-\hbar/2$. Таким образом можно создать фотокатод спин-поляризованных электронов.

Коэффициент межзонного поглощения в квантовой яме

Рассмотрим поглощение света квантовой ямой при переходе электрона с первой подзоны тяжелых дырок на первую электронную подзону. Будем полагать, что свет падает по нормали на квантовую яму. Удобно ввести безразмерный коэффициент поглощения света, который равен отношению поглощенной квантовой ямой мощности к интенсивности падающего света.

Поглощаемая квантовой ямой мощность равна:

$$(8.7) \quad P(\omega) = \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{kc, kv} \frac{e^2 E^2}{\omega^2 m_0^2} |\langle \Psi_n^c(\mathbf{k}_c, \mathbf{r}) | \boldsymbol{\eta} \mathbf{p} | \Psi_m^v(\mathbf{k}_v, \mathbf{r}) \rangle|^2 \hbar \omega \delta(\varepsilon_{c1}(\mathbf{k}_c) - \varepsilon_{v1}(\mathbf{k}_v) - \hbar \omega)$$

где $\boldsymbol{\eta}$ - единичный вектор, направленный вдоль вектора электрического поля $\mathbf{E}$. При поглощении (8.7) учтен спин электрона и использовано выражение (7.11) для гамильтониана взаимодействия электрона со светом, а также опущен для краткости знак $\parallel$ у импульса

электрона. Используя (8.6) и (8.7), находим следующее выражение для поглощаемой мощности:

$$(8.8) \quad \begin{aligned} P(\omega) &= \frac{2Se^2E^2}{\omega} \left| \frac{\mathbf{p}_{cv}\boldsymbol{\eta}}{m_0} \right|^2 |\chi|^2 \int_0^\infty \delta\left(\varepsilon_{c1}(0) - \varepsilon_{hh}(0) - \hbar\omega + \frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\right) k dk = \\ &= \frac{2Se^2E^2m^*}{\hbar^2\omega} \left| \frac{\mathbf{p}_{cv}\boldsymbol{\eta}}{m_0} \right|^2 |\chi|^2 \theta(\varepsilon_{c1}(0) - \varepsilon_{hh}(0) - \hbar\omega) \end{aligned}$$

где $m^* = m_c m_{hh} / (m_c + m_{hh})$, m_{hh} - масса тяжелых дырок. Используя выражение для потока света (7.24), получаем выражение для безразмерного коэффициента поглощения:

$$(8.9) \quad \alpha(\omega) = 4\pi \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{m^*}{n\hbar\omega} \left| \frac{\mathbf{p}_{cv}\boldsymbol{\eta}}{m_0} \right|^2 |\chi|^2 \theta(\varepsilon_{c1}(0) - \varepsilon_{hh}(0) - \hbar\omega)$$

Из (8.9) видно, что зависимость от частоты коэффициента поглощения имеет ступенчатый вид, что соответствует двумерной плотности состояний. Оценим теперь величину (8.9) для прямозонных полупроводников A_3B_5 . Для этого предположим, что электрическое поле волны направлено вдоль оси x . Используя модель Кейна [1], можно получить следующее приближенное соотношение для матричного элемента оператора импульса между зоной тяжелых дырок и зоной проводимости в случае, когда ширина запрещенной зоны много больше величины спин-орбитального расщепления:

$$(8.10) \quad \left| \frac{p_{cv}^x}{m_0} \right|^2 \approx \frac{E_g}{4m_c}$$

Учитывая, что $m_c \ll m_{hh}$ и вблизи края поглощения $\hbar\omega \approx E_g$, из (8.9) и (8.10) получаем:

$$(8.11) \quad \alpha \approx \frac{\pi}{n} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) |\chi|^2 \theta(\varepsilon_{c1}(0) - \varepsilon_{hh}(0) - \hbar\omega)$$

Для арсенида галлия показатель преломления вблизи межзонных переходов $n \approx 3.5$, в очень узких квантовых ямах $\chi \sim 1$. Поэтому безразмерный коэффициент поглощения в квантовой яме порядка одного процента. Отметим, что коэффициент поглощения слабо зависит от толщины квантовой ямы (только через интеграл перекрытия) – это следствие независимости комбинированной плотности состояний квантовой ямы от её толщины вблизи края перехода.

Особенности экситонных эффектов в квантовых ямах

Если размер локализации волновой функции электронов в квантовой яме меньше боровского радиуса экситона объемного экситона, то его энергия связи увеличивается, поскольку уменьшается среднее расстояние между электроном и дыркой. В предельном слу-

чае, когда размер локализации волновой функции в квантовой яме много меньше боровского радиуса задача о нахождении энергии ионизации экситона сводится к задаче о двумерном атоме водорода [1]. В этом случае энергия ионизации в четыре раза больше энергии ионизации в трехмерном случае. В реальных квантовых ямах энергия ионизации экситона в квантовой яме редко превышает более чем в три раза энергию ионизации объемного экситона. Из-за большой энергии ионизации экситоны в квантовых ямах наблюдаются даже при комнатной температуре.

Найдем безразмерный коэффициент экситонного поглощения света квантовой ямой. Для этого нам потребуется волновая функция экситона. Для её нахождения необходимо решить уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера для огибающей $C(R_e, R_h)$ в квантовой яме имеет вид:

$$(8.12) \quad (H_e(R_e) + H_h(R_h) + V(R_e - R_h) + V_e(Z_e) + V_h(Z_h))C(R_e, R_h) = EC(R_e, R_h)$$

где R_e, R_h – радиусы вектора электрона и дырки принимающие значения только узлов решетки, $H_e(R_e)$ – оператор кинетической энергии электрона в зоне проводимости, $H_h(R_h)$ – оператор кинетической энергии дырок в валентной зоне, $V_e(Z_e)$ – потенциальная энергия электрона в квантовой яме, $V_h(Z_h)$ – потенциальная энергия дырки в квантовой яме, $V(R_e - R_h)$ – потенциал взаимодействия электрона и дырки в квантовой яме. Будем полагать, что расстояние между уровнями размерного квантования в квантовой яме много больше энергии связи экситона, как в зоне проводимости, так и в валентной зоне. В этом случае можно считать, что движение электрона и дырки вдоль оси z определяется только квантовой ямой и не зависит от взаимодействия электрона и дырки. Поскольку суммарный импульс электрона и дырки вдоль квантовой ямы сохраняется, решение (8.12) можно представить в виде:

$$(8.13) \quad C(R_e, R_h) = \Psi_e(Z_e)\Psi_h(Z_h) \frac{\exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{\rho}_{\parallel})\varphi(\mathbf{r}_{\parallel})}{\sqrt{N_s}}$$

где $\mathbf{\rho}_{\parallel}$ – проекция радиус-вектора центра тяжести электрона и дырки ρ на плоскость квантовой ямы, $\mathbf{\rho} = \frac{m\mathbf{R}_e + m_h\mathbf{R}_h}{m_e + m_h}$, N_s – число узлов решетки в плоскости квантовой ямы,

$r_{\parallel}$ – проекция на плоскость квантовой ямы радиус вектора $r = \mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h$, $\mathbf{k}_{\parallel}$ – суммарный волновой вектор электрона и дырки (волновой вектор экситона) в плоскости квантовой ямы. Функция $\varphi(\mathbf{r}_{\parallel})$ – описывает движение электрона и дырки в системе их центра масс. Будем считать, что волновая функция (8.13) нормирована следующим образом: интегрирование её квадрата по Z_h и Z_e и суммирование по $\mathbf{\rho}_{\parallel}$ и $\mathbf{r}_{\parallel}$ дает единицу. Полная волновая функция получается из (8.13) домножением (8.13) на функции Ванье:

$$(8.14) \quad \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h} C(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) a_c(\mathbf{r}_e - \mathbf{R}_e) a_v(\mathbf{r}_h - \mathbf{R}_h)$$

Для дальнейшего удобно перейти от разложения волновой функции по блоховским функциям, для этого надо подставить в (8.14) разложение функций по функциям Блоха (см. формулу (2.2)).

$$(8.15) \quad \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{k_e, k_h} \Phi(k_e, k_h) \psi_c(k_e, r_e) \psi_h(k_h, r_h)$$

где

$$(8.16) \quad \begin{aligned} \Phi(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h} C(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h, k) \exp(-i\mathbf{k}_e \mathbf{R}_e - i\mathbf{k}_h \mathbf{R}_h) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\rho, r} \frac{\exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \rho_{\parallel})}{\sqrt{N}} \Psi_e(Z_e) \Psi_h(Z_h) \varphi(r_{\parallel}) \exp(-i\mathbf{k}_e \rho - i\mathbf{k}_h \rho) \times \\ &\times \exp\left(-i\mathbf{k}_e \mathbf{r} \frac{m_h}{m_h + m_e} + i\mathbf{k}_h \mathbf{r} \frac{m_e}{m_h + m_e}\right) \end{aligned}$$

Оператор взаимодействия со светом имеет вид $H_{\text{int}} = \frac{epE \exp(iqr)}{m_0 i \omega}$ (см. выражение (???)),

который удобно представить в виде:

$$(8.17) \quad H_{\text{int}} = \sum_{kckv} \frac{ep_{cv} E \delta_{kc, kv+q}}{i \omega m_0} b_{kc}^+ a_{kv}$$

где a_k оператор уничтожения электрона в валентной зоне, а b_k^+ - оператор рождения электрона в зоне проводимости.

Волновую функцию начального состояния, когда экситон отсутствует, а валентная зона полностью заполнена, можно представить в виде:

$$(8.18) \quad |i\rangle = \prod_k a_k^+ |0\rangle,$$

где волновая функция $|0\rangle$ описывает пустую валентную зону. Волновая функция системы с экситоном имеет вид:

$$(8.19) \quad |f\rangle = \sum_{k_e, k_h} \Phi(k_e, k_h) b_{k_e}^+ a_{-k_h} |i\rangle$$

Тогда матричный элемент взаимодействия $\langle f | H_{\text{int}} | i \rangle$ можно представить в виде:

$$(8.20) \quad \begin{aligned} \langle f | H_{\text{int}} | i \rangle &= \sum_{k_e, k_h, k_c, k_v} \Phi^*(k_e, k_h) \langle i | b_{k_e} a_{-k_h}^+ \frac{e \mathbf{E} \mathbf{p}_{cv} \delta_{kc, kv+q}}{i \omega m_0} b_{kc}^+ a_{kv} | i \rangle = \\ &= \sum_{k_c, k_v} \Phi^*(k_c, -k_v) \frac{e \mathbf{E} \mathbf{p}_{cv} \delta_{kc, kv+q}}{i \omega m_0} = \frac{e}{i \omega m_0} \sum_{k_v} \Phi^*(k_v + q, -k_v) \mathbf{E} \mathbf{p}_{cv}(k_v) \end{aligned}$$

Используя выражение (8.16) находим:

$$\begin{aligned}
\langle f | H_{\text{int}} | i \rangle &= \frac{eE}{i\omega m_0} \sum_{k_v} \Phi^*(k_v + q, -k_v) p_{cv}(k_v) = \\
&= \frac{e}{i\omega m_0 N} \sum_{\rho, r, k_v} \left\{ \frac{\exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{\rho}_{\parallel})}{\sqrt{N_s}} \Psi_e(\rho_{\perp} + r_{\perp} \frac{m_h}{m_e + m_h}) \Psi_h(\rho_{\perp} - r_{\perp} \frac{m_e}{m_e + m_h}) a^{3/2} \varphi(r_{\parallel}) \exp(-iq\rho) \times \right. \\
&\times \exp\left(-i(\mathbf{k}_v + q)\mathbf{r} \frac{m_h}{m_h + m_e} - i\mathbf{k}_v \mathbf{r} \frac{m_e}{m_h + m_e}\right) \left. \right\} \mathbf{E} \mathbf{p}_{cv}(k_v)
\end{aligned}$$

Рассмотрим разрешенный переход. В этом случае зависимостью $p_{cv}(k)$ от волнового вектора можно пренебречь ($p_{cv}(k)$ - постоянная). Тогда суммирование по $\mathbf{k}_v$ дает $N \delta_{r,0}$. Выполнив суммирование по r получаем:

$$\begin{aligned}
\langle f | H_{\text{int}} | i \rangle &= \frac{e \mathbf{E} \mathbf{p}_{cv}}{i\omega m_0} \sum_{\rho} \frac{\exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{\rho}_{\parallel})}{\sqrt{N}} \Psi_e(\rho_{\perp}) \Psi_h(\rho_{\perp}) a^{3/2} \varphi(0) \exp(-iq\rho) = \\
(8.21) \quad &= \frac{e \mathbf{E} \mathbf{p}_{cv}}{i\omega m_0 \sqrt{N_s}} \varphi(0) a \sum_{\rho_{\parallel}} \exp(ik_{\parallel} \rho_{\parallel} - iq_{\parallel} \rho_{\parallel}) \times \sum_{\rho_{\perp}} \Psi_e(\rho_{\perp}) \Psi_h(\rho_{\perp}) = \\
&= \frac{e \mathbf{E} \mathbf{p}_{cv}}{i\omega m_0} \sqrt{N_s} a \varphi(0) \delta_{k_{\parallel}, q_{\parallel}} \chi
\end{aligned}$$

где $\chi = \sum_{\rho_{\perp}} \Psi_e(\rho_{\perp}) \Psi_h(\rho_{\perp})$ - интеграл перекрытия. Поглощаемая мощность при нормальном падении (с учетом спина электрона):

$$\begin{aligned}
P &= 2 \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k_{\parallel}} N_s \left(\frac{e |\mathbf{p}_{cv} \cdot \mathbf{E}|}{\omega m_0} \right)^2 a^2 \varphi^2(0) \delta_{k_{\parallel}, q_{\parallel}} \hbar \omega |\chi|^2 \delta(\hbar \omega - E_e) = \\
(8.22) \quad &= \frac{4\pi^2 E^2 S}{\omega} \left| \frac{\mathbf{p}_{cv} \mathbf{\eta}}{m_0} \right|^2 |\chi|^2 \varphi^2(0) \delta(\hbar \omega - E_e)
\end{aligned}$$

Безразмерный коэффициент поглощения равен:

$$(8.23) \quad \alpha = \frac{P}{I} = 2 \frac{(2\pi)^2 e^2}{cn\omega} \left| \frac{\mathbf{p}_{cv} \mathbf{\eta}}{m_0} \right|^2 |\chi|^2 \varphi^2(0) \delta(\hbar \omega - E_e)$$

где E_e - энергия экситона. Если учесть конечность ширины линии тогда следует заменить дельта функцию:

$$\delta(\hbar \omega - E_e) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(\hbar \omega - E_1)^2 + \gamma^2}$$

где $\gamma/2$ - ширина экситонного уровня, возникающая из-за конечного времени жизни. В итоге получается следующее выражение для безразмерного коэффициента поглощения:

$$(8.24) \quad \alpha(\omega) = \frac{8\pi^2}{cn\omega} \left| \frac{\mathbf{p}_{cv} \mathbf{\eta}}{m_0} \right|^2 |\chi|^2 \varphi^2(0) \frac{\gamma}{(\hbar \omega - E_1)^2 + \gamma^2}$$

В максимуме величина поглощения:

$$(8.25) \quad \alpha_{\max}(\omega) = \frac{8\pi e^2}{cn\omega\gamma} \left| \frac{\mathbf{p}_{cv}\boldsymbol{\eta}}{m_0} \right|^2 |\chi|^2 \varphi^2(0)$$

Используя выражение (8.9) для коэффициента поглощения при межзонных переходах в квантовой яме можно найти отношение максимума экситонного поглощения к межзонному поглощению в квантовой яме:

$$(8.26) \quad \frac{\alpha_{\max}}{\alpha_{QW}} = 2 \frac{\hbar^2 |\varphi(0)|^2}{m^*},$$

где через α_{QW} обозначен коэффициент поглощения (8.9). Чтобы соотнести величины межзонного и экситонного поглощения можно провести численную оценку (8.26). Приведенная эффективная масса m^* близка к массе электрона в зоне проводимости m_c . Для основного состояния экситона

$$(8.27) \quad \varphi(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\exp(-\rho/a_B)}{a_B}$$

где a_B - боровский радиус экситона. В качественных квантовых ямах при температуре жидкого гелия ширина линии люминесценции экситона около 1мэВ (что соответствует $\gamma = 2$ мэВ), эффективную массу m^* для оценки можно положить равной 0.1 массы свободного электрона, а боровский радиус равным 100 А. Тогда $\alpha_{\max} / \alpha_{QW} \approx 5$, что неплохо согласуется с наблюдаемыми величинами.

Межподзонное поглощение в квантовых ямах. Деполяризационный сдвиг

Под действием света электроны в квантовой яме могут совершать переходы между подзонами размерного квантования, принадлежащими одной зоне, например зоне проводимости. В этом подразделе будут рассмотрены такие процессы в простейшем случае для переходов между подзонами размерного квантования зоны проводимости с изотропным и квадратичным законом дисперсии. В этом случае движение электрона вдоль квантовой ямы независимо от движения поперек квантовой ямы. Электроны, находящиеся в разных подзонах имеют разный характер движения поперек квантовой ямы. Поэтому переход между подзонами размерного квантования может происходить только под воздействием, которое меняет характер этого движения, т.е. под воздействием электрического поля, направленного вдоль нормали к квантовой яме.

Если движение электрона вдоль и поперек квантовой ямы не являются независимыми, то межподзонные переходы происходят и под воздействием компоненты электрического поля электромагнитной волны, лежащей в плоскости квантовой ямы. Такая си-

туация, например, имеет место в том случае, если поверхность постоянной энергии представляет собой эллипсоид, ни одна из главных осей которого не направлена по нормали к квантовой яме. Аналогичная ситуация имеет место в валентной зоне, например при переходе между подзонами легких и тяжелых дырок.

Рассмотрим, каковы правила отбора в симметричной квантовой яме с изотропным квадратичным законом дисперсии электронов. Их легко найти, если полагать гамильтониан взаимодействия равным $e\mathbf{E}\mathbf{r}$. Если яма симметрична относительно отражения в плоскости, проходящей через её середину, тогда волновые функции относящиеся к четным подзонам являются нечетными, а к нечетным подзонам – четными. В этом случае при вычислении матричного элемента оператора взаимодействия отличными от нуля будут матричные элементы между подзонами разной четности. В несимметричной квантовой яме возможны переходы между подзонами любой четности.

Найдем теперь спектральную зависимость поглощения. Поскольку переходы идут с сохранением квазиимпульса, то в отличие от межзонных переходов энергия перехода не зависит от импульса. Поэтому ширина линии поглощения определяется временами жизни электронов на нижней и верхней подзоне. В полупроводниках эти времена определяются столкновениями. Отметим, что теперь для правильного описания спектра поглощения необходимо учесть процессы рассеяния. Аналогичная задача решается при рассмотрении поглощения света между локализованными состояниями в примесных центрах или поглощения атомов в газе. Для её решения обычно используется уравнение для матрицы плотности:

$$(8.28) \quad \dot{\rho} = \frac{[H, \rho]}{i\hbar} + St$$

где St - оператор интеграла столкновений. Для нахождения поглощения, необходимо вычислить ток в квантовой яме, протекающий под воздействием переменного электрического поля волны. Будем полагать поле равным $E(t) = E \exp(-i\omega t)$, и направленным вдоль оси z , которая является нормалью квантовой ямы. Поляризация единицы поверхности (дипольный момент единицы поверхности) квантовой ямы равна

$$(8.29) \quad D = -eSp(z\rho) = -eSp(z\rho) = -2e \sum_k (z_{11}\rho_{11} + z_{22}\rho_{22} + z_{12}\rho_{21} + z_{21}\rho_{12})$$

Для простоты будем считать яму симметричной и рассматривать переходы между первой и второй подзонами. В этом случае матричные элементы $z_{11} = z_{22} = 0$ и для вычисления поляризации необходимо найти недигональные элементы матрицы плотности. Уравнение для ρ_{21} имеет вид (более подробное обсуждение уравнения для матрицы плотности можно найти в книге К. Блум Теория матрицы плотности и её приложения. Мир, 1983):

$$(8.30) \quad \dot{\rho}_{21} = \frac{(\varepsilon_2(k) - \varepsilon_1(k))}{i\hbar} \rho_{21} + \frac{eE(t)z_{21}(\rho_{11} - \rho_{22})}{i\hbar} - \frac{\rho_{21}}{\tau}$$

где величина τ называется временем релаксации фазы. Обозначим $\varepsilon_2(k) - \varepsilon_1(k) = \omega_{21}$ - эта величина не зависит от k . Диагональные элементы матрицы плотности равны вероятности нахождения частицы в данном состоянии, т.е. являются функциями распределения электронов в соответствующих подзонах $\rho_{ii}(k) = f_i(k)$.

Решение (8.30) будем искать по теории возмущений, полагая электрическое поле слабым. В этом случае ρ_{11} и ρ_{22} равны равновесным функциям распределения электронов в первой и второй подзонах, и решение (8.30) имеет вид:

$$(8.31) \quad \rho_{21}(t) = \frac{eEz_{21}(f_1(k) - f_2(k))}{i\hbar(i(\omega_{21} - \omega) + 1/\tau)} \exp(-i\omega t)$$

Выражение для ρ_{12} получается из (8.31) заменой нижних индексов местами $1 \leftrightarrow 2$, учитывая, что $\omega_{12} = \omega_{21}$.

Средняя по толщине квантовой ямы плотность тока равна производной по времени от средней поляризации единицы объема. Для вычисления средней поляризации единицы объема необходимо (8.29) разделить на толщину квантовой ямы d . После соответствующих вычислений получается следующее выражение для средней плотности тока:

$$(8.32) \quad j = \frac{2e^2 E |z_{12}|^2 \omega_{21} \omega (n_1 - n_2)}{\hbar d (\omega_{21}^2 - \omega^2 - 2i\omega/\tau + 1/\tau^2)}$$

где $n_i = 2 \sum_k f_i(k)$ - концентрация частиц в i -ой подзоне. Из (8.32) можно найти среднюю проводимость, обусловленную межподзонами переходами электронов:

$$(8.33) \quad \sigma(\omega) = \frac{2e^2 |z_{12}|^2 \omega_{21} \omega (n_1 - n_2)}{d\hbar (\omega_{21}^2 - \omega^2 - 2i\omega/\tau + 1/\tau^2)}$$

Действительная часть проводимости описывает спектр поглощения. Из выражения (8.33) видно, что действительная часть проводимости вблизи резонанса ($\omega \approx \omega_{21} \gg 1/\tau$) имеет вид:

$$(8.34) \quad \sigma(\omega) \approx \frac{e^2 |z_{12}|^2 \omega (n_1 - n_2)}{d\hbar (i(\omega_{21} - \omega) + 1/\tau)}$$

а её действительная часть является лоренцевой функцией от частоты. Однако, вычислять поглощение с помощью проводимости (8.33) необходимо принимая во внимание, что величины электрического поля вне ямы и в яме различаются. Причина этого различия состоит в скачке диэлектрической проницаемости на границе квантовой ямы, обусловлен-

ном межзонной проводимостью (8.34). Поэтому поглощение излучения определяется действительной частью эффективной проводимости:

$$(8.35) \quad \operatorname{Re}(\sigma_{\text{eff}}(\omega)) = \operatorname{Re} \sigma(\omega) \left| \frac{E}{E_{\text{out}}} \right|^2 = \operatorname{Re} \sigma(\omega) \left| \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(\omega)} \right|^2$$

где E_{out} - поле вне квантовой ямы, ε_0 - диэлектрическая проницаемость полупроводника, окружающего квантовую яму, $\varepsilon(\omega)$ - диэлектрическая проницаемость квантовой ямы. Для простоты будем полагать, что диэлектрическая проницаемость квантовой ямы отличается от таковой окружающего полупроводника только слагаемым, обусловленным межзональными переходами. В этом случае диэлектрическая проницаемость квантовой ямы с учетом межподзонных переходов электронов равна:

$$(8.36) \quad \varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega}$$

Используя (8.33), (8.35) и (8.36) находим:

$$(8.37) \quad \operatorname{Re} \sigma_{\text{eff}}(\omega) = \frac{e^2 |z_{12}|^2 \omega(n_1 - n_2)}{d\hbar \tau ((\bar{\omega}_{21} - \omega)^2 + 1/\tau^2)}$$

где

$$(8.38) \quad \bar{\omega}_{21} = \omega_{21} + \frac{4\pi e^2 |z_{12}|^2 (n_1 - n_2)}{\varepsilon_0 d\hbar} = \omega_{21} + \Delta$$

Из (8.38) и (8.37) видно, что максимум линии поглощения находится на частоте $\bar{\omega}_{21}$, которая отличается от частоты ω_{21} . Это смещение линии поглощения получило название деполаризационного сдвига. Физическая причина его возникновения состоит в том что при точном резонансе диэлектрическая проницаемость квантовой ямы возрастает и поле плохо в неё проникает. Отметим, что для равновесных систем линия поглощения смещена в область больших частот, а в системах, где имеется инверсия населенностей подзон ($n_1 < n_2$) смещена в область меньших частот. Приведем оценку величины деполаризационного сдвига для GaAs квантовой ямы, толщиной 10 нм с $n_1 - n_2 = 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Полагая $z_{12} \approx 2 \text{ нм}$ находим $\hbar\Delta \approx 5.5 \text{ мэВ}$.

Отметим что при вычислении вклада в проводимость, обусловленного межподзонами электронов, поле в квантовой яме полагалось однородным и постоянным. Это приближение позволило нам получить простое выражение. Более строгое рассмотрение требует учитывать зависимость электронной плотности в квантовой яме от координаты. В этом случае для нахождения поля в квантовой яме необходимо решать уравнение Пуассона. Однако и в этом случае удастся получить аналитическое выражение для величины проводимости и деполаризационного сдвига (см. задачу 8.1).

Модуляторы света на квантовых ямах

На основе квантовых ям созданы модуляторы света, величина пропускания света через которые зависит от приложенного к ним напряжения. Принцип работы оптического модулятора основан на изменении величины экситонного поглощения при приложении к квантовой яме электрического поля вдоль нормали к её поверхности. Причина этого изменения состоит в том, что электрическое поле «прижимает» электроны и дырки к противоположным краям квантовой ямы изменяя коэффициент перекрытия (8.6). Поэтому пик экситонного поглощения с увеличением приложенного электрического поля уменьшается по величине и смещается в длинноволновую область (из-за эффекта Штарка). Изменение поглощения в квантовой яме с ростом электрического поля показано на рис. 8. 6.

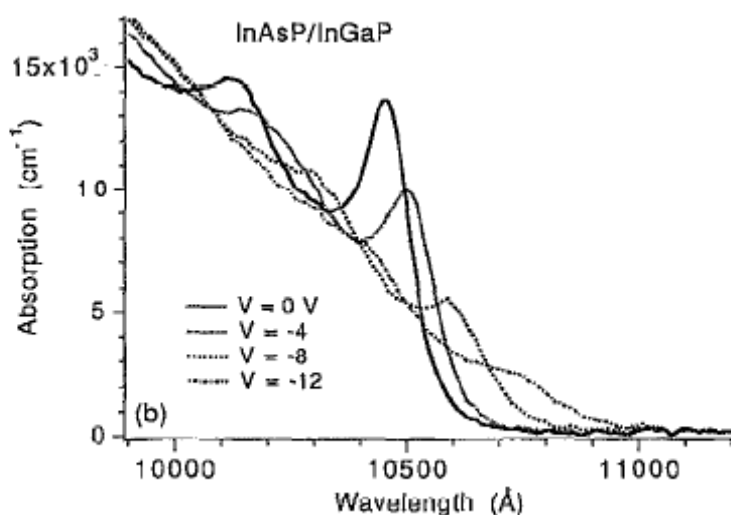


Рис. 8.6. Спектры поглощения света гетероструктуры с квантовыми ямами при нескольких значениях приложенного напряжения из работы T.K.Woodward, T.-H.Chiu, T.Sizer Appl. Phys. Lett. v.60 p. 2846 (1992).

Для того чтобы электрическое поле в квантовых ямах можно было изменять в широких пределах, квантовые ямы встраивают в область пространственного заряда p-n перехода. При приложении к p-n переходу напряжения происходит изменение пропускания света, проходящего через модулятор. Обычно в оптическом модуляторе используется несколько десятков квантовых ям (30-50) для того чтобы обеспечить достаточно большую амплитуду модуляции. Характерная величина модуляции коэффициента пропускания света в модуляторах на квантовых ямах составляет величину 30-50%. Следует отметить, что модуляция света в них осуществляется в довольно узком спектральном диапазоне, соответствующим экситонному поглощению. Часто для создания таких модуляторов используется

GaAs p-n переход, в котором квантовые ямы создаются путем введения туннельно-непрозрачных барьеров из более широкозонного твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Фотоприемники на квантовых ямах

На основе гетероструктур с квантовыми ямами были созданы фотоприемники среднего ИК диапазона (см. обзор [3]). Зонная структура такого приемника под рабочим напряжением изображена на рис. 8.7. Квантовые ямы легированы (типичная концентрация электронов в квантовой яме 10^{12} см^{-2}). Без освещения ток мал, поскольку он обусловлен термоэлектронной эмиссией через высокие туннельно-непрозрачные барьеры, разделяющие квантовые ямы. При освещении электрон, поглощая фотон, переходит либо на выше лежащую подзону размерного квантования, либо в континуум. Обычно параметры квантовой ямы подбираются таким образом, чтобы вторая подзона размерного квантования располагалась близко от края барьера, так чтобы коэффициент туннелирования из неё в континуум был достаточно велик. Электрон, попавший в верхнюю подзону, туннелирует в континуум и дает вклад в ток. Существуют детекторы, в квантовых ямах которых имеется только одна подзона размерного квантования. При поглощении света в таких квантовых ямах электрон попадает непосредственно в континуум.

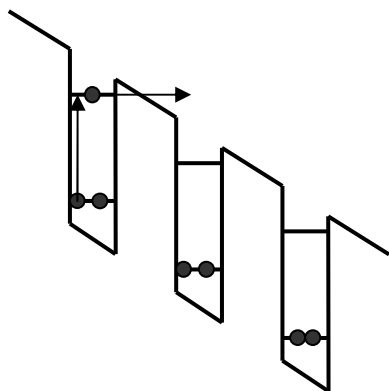


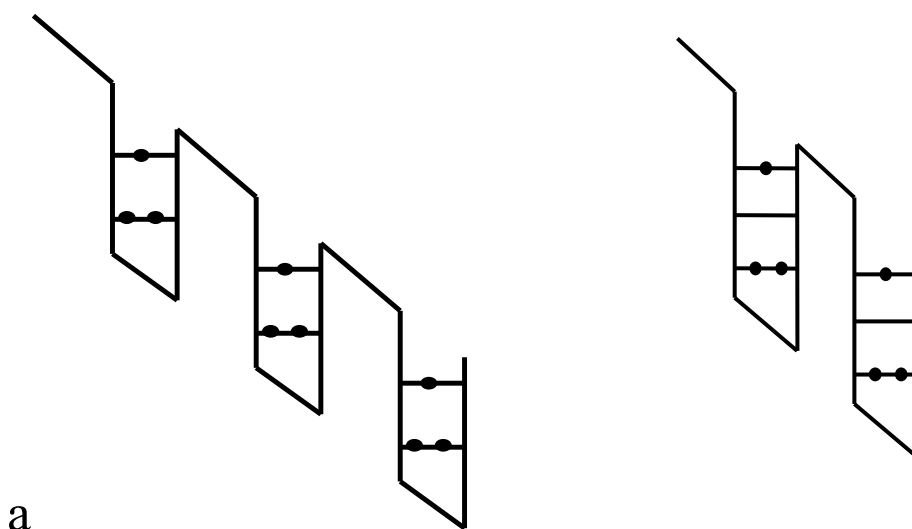
Рис. 8.7.

Следует отметить, что электроны Γ -долины совершают оптические переходы под влиянием компоненты электрического поля нормальной к квантовой яме. Поэтому такие детекторы не могут детектировать свет, падающий по нормали к квантовым ямам. Для того чтобы преодолеть это затруднение на поверхности такого фотоприемника размещают ли-

бо дифракционную решетку либо микролинзы, которые отклоняют часть света от нормали.

Квантово-каскадный лазер

В 1994 году был создан первый квантово-каскадный лазер [4] идея создания которого была высказана в 1971 г. Р.Ф.Казариновым и Р.А.Сурисом [5]. Казаринов и Сурис обратили внимание на то, что при протекании тока через сверхрешетку возможно создание инверсной населенности подзон размерного квантования. Приведем примеры как это может быть сделано. Пусть в каждой из квантовых ям, составляющих сверхрешетку, имеется всего по две подзоны размерного квантования (см. рис.8.8 а). Тогда при приложении достаточно большого электрического поля можно реализовать ситуацию, в которой нижняя подзона размерного квантования какой-либо ямы располагается выше второй подзоны в соседней квантовой яме. Из-за высокой вероятности рассеяния внутри квантовой ямы, на нижней подзоне размерного квантования находится больше электронов, чем на верхней подзоне в той же квантовой яме. Из рис. 8.8 а видно, что нижняя подзона какой-либо квантовой ямы располагается выше второй подзоны, принадлежащей соседней справа квантовой яме. Т.е. имеется инверсная населенность состояний. Электрон с нижней подзоны может испустить фотон и с помощью туннелирования оказаться на верхнем уровне соседней ямы, затем благодаря рассеянию оказаться на нижнем уровне этой ямы. Далее процесс будет повторяться. Таким образом, электрон может перемещаться по сверхрешетке, испуская фотоны. Второй способ наглядно проиллюстрировать на сверхрешетке в квантовых ямах которой имеется три подзоны. При приложении поля можно добиться того чтобы нижняя подзона находилась напротив верхней подзоны соседней квантовой ямы как показано на рис. 8.8 б. в этом случае за счет туннелирования электроны с нижней подзоны будут непосредственно попадать в верхнюю подзону соседней квантовой яме. В этом случае возникает инверсная заселенность верхней и средней подзон.



б

Рис.8.8

Однако в сверхрешетках сложно обеспечить однородное поле, поскольку имеются многочисленные участки отрицательного дифференциального сопротивления и соответствующей им доменной неустойчивости. Чтобы обойти эту трудность создатели квантово-каскадного лазера создали структуру, состоящую из 25 каскадов (повторений). Каждый каскад состоял из двух областей активной области, где происходили излучательные переходы, и пассивную (инжектор), которая служила для отвода электронов с нижних подзон одной активной области и инжекции их на верхние подзоны другой активной области. Зонная структура квантово-каскадного лазера изображена на рис. 8.9.

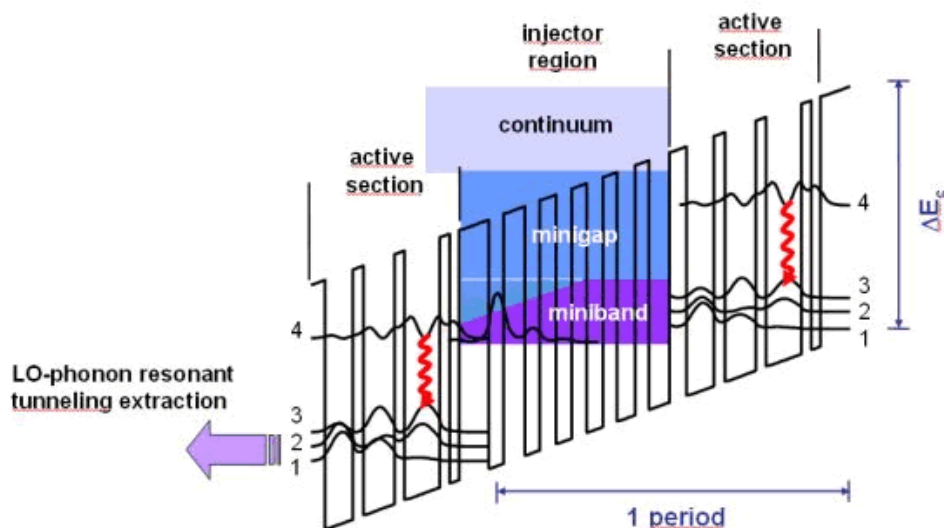


Рис. 8.9. Зонная структура квантово-каскадного лазера (рисунок взят из интернета).

Пассивная область содержит электронные уровни, расположенные таким образом, что электроны с верхних рабочих уровней активной зоны не могут уйти в пассивную область (имеется минищель в спектре -minigap).

Первый каскадный лазер работал до температур около 90 К, генерировал излучение с длиной волны около 4 микрон и мощностью в импульсном режиме около 8 милливатт. Современные квантово-каскадные лазеры в этом диапазоне работают в непрерывном режиме при комнатной температуре с выходной мощностью порядка ватта. Имеется две области длин волн излучения, которое генерируют современные каскадные лазеры: примерно от 3.5 мкм до 25 мкм и примерно от 60 мкм до 120 мкм (терагерцовый диапазон). Лазеры работающие в диапазоне от 3 до 12 мкм могут работать при комнатной температуре. Остальные квантово-каскадные лазеры пока работают только при пониженных температурах. Следует отметить, что типичная квантово-каскадная структура содержит несколько сот квантовых ям и очень сложна в изготовлении, поскольку требуется очень высокая точность толщин и составов слоев.

- [1] Г.Л.Бир, Г.Е.Пикус Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.Наука 1972.
- [2] В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. М. Наука, 1981, задача 4.13
- [3] B.F.Levine. Quantum-well infrared photodetectors. Journ. Appl. Phys. v.78, R1 (1993)
- [4] Faist, Jerome; Federico Capasso, Deborah L. Sivco, Carlo Sirtori, Albert L. Hutchinson, and Alfred Y. Cho. ["Quantum Cascade Laser"](#). *Science* v.264, p.553 (1994)/
- [5] Р.Ф.Казаринов, Р.А.Сурис. О возможности усиления электромагнитных волн в полупроводнике со сверхрешеткой. ФТП, т.5, с. 797 (1971)

Задача 8.1. Найти выражения для тока и поглощаемой мощности при межподзонных переходах не используя предположение о постоянной амплитуде поля в квантовой яме.

Решение

Пусть $V(z)\exp(-i\omega t)$ потенциал, создаваемый в КЯ внешним полем. Полагая внешнее поле слабым, для нахождения неравновесной добавки к матрице плотности можно воспользоваться теорией возмущений. Очевидно, что неравновесная добавка $\sim \exp(-i\omega t)$. В первом порядке теории возмущений отличны от нуля только недиагональные компоненты:

$$(1) -i\omega\rho_{21} = \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\rho_{21} + \frac{iV_{21}}{\hbar}(\rho_{11} - \rho_{22}) - \rho_{21}/\tau$$

Из (1) находим:

$$(2) \rho_{21} = -\frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)},$$

где уже выполнено интегрирование по импульсам (матрица плотности диагональна по импульсу). ρ_{12} не имеет резонансного знаменателя, поэтому она по величине много меньше чем ρ_{21} недалеко от резонанса и ей можно пренебречь.

Неравновесная плотность электронов равна:

$$(3) \tilde{n} = \tilde{\rho}(z, z) = \langle z | 2 \rangle \rho_{21} \exp(-i\omega t) \langle 1 | z \rangle = -\psi_2(z)\psi_1^*(z) \exp(-i\omega t) \frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)}$$

Электрический потенциал удовлетворяет уравнению:

$$(4) \Delta\varphi = 4\pi en / \kappa$$

или в нашем случае

$$(5) \frac{d^2}{dz^2} \varphi = -\frac{4\pi e}{\kappa} \psi_2(z)\psi_1^*(z) \exp(-i\omega t) \frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)}$$

с граничными условиями $\varphi(0) = 0$, $\varphi'(0) = -E \exp(-i\omega t)$. Дифференцируя (5) один раз находим:

$$(6) \frac{d}{dz} \varphi = -E - \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^z dz' \psi_2(z')\psi_1^*(z')$$

При выводе (6) опущена зависимость от времени и предполагалось, что волновые функции равны нулю вне ямы. Интегрируя это уравнение еще раз, находим:

$$(7) \begin{aligned} \varphi(z) &= -Ez - \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^z dz' \int_0^{z'} dz'' \psi_2(z'')\psi_1^*(z'') = \\ &= -Ez - \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^z dz' (z - z') \psi_2(z')\psi_1^*(z') \end{aligned}$$

Теперь можно найти связь V_{21} и E . Для этого воспользуемся равенством $V(z) = -e\varphi(z)$

$$(8) \begin{aligned} V_{21} &= -e \int_0^d \psi_2^*(z)\varphi(z)\psi_1(z)dz = eE \int_0^d \psi_2^*(z)z\psi_1(z)dz + \\ &+ \frac{4\pi e^2}{\kappa} \frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^d dz \psi_2^*(z)\psi_1(z) \int_0^z dz' (z - z') \psi_2(z')\psi_1^*(z') \end{aligned}$$

Из (8) находим

$$(9) V_{21} = \frac{eE \int_0^d \psi_2^*(z)z\psi_1(z)dz -}{1 - \frac{4\pi e^2}{\kappa} \frac{(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^d dz \psi_2^*(z)\psi_1(z) \int_0^z dz' (z - z') \psi_2(z')\psi_1^*(z')}$$

Обратим внимание на следующее обстоятельство. С учетом (9) выражение $\frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)}$

можно переписать в виде:

$$\frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)} = \frac{eEz_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu) - \frac{4\pi e^2}{\kappa}(n_1 - n_2) \int_0^d dz \psi_2^*(z) \psi_1(z) \int_0^z dz' (z - z') \psi_2(z') \psi_1^*(z')} =$$

$$= \frac{eEz_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega - i\nu)}$$

$$\text{где } \tilde{\omega}_{21} = \omega_{21} - \frac{4\pi e^2}{\kappa \hbar} (n_1 - n_2) \int_0^d dz \psi_2^*(z) \psi_1(z) \int_0^z dz' (z - z') \psi_2(z') \psi_1^*(z')$$

Таким образом, величина деполяризационного сдвига равна

$$- \frac{4\pi e^2}{\kappa \hbar} (n_1 - n_2) \int_0^d dz \psi_2^*(z) \psi_1(z) \int_0^z dz' (z - z') \psi_2(z') \psi_1^*(z')$$

Найдем теперь потери в КЯ. Очевидно, что потери на единицу площади равны:

$$(10) \quad P = \int_0^d j(z) E^*(z) + j^*(z) E(z) dz$$

Плотность тока можно найти из следующих соображений: Из уравнения непрерывности

$$(11) \quad i\omega \tilde{n} + \frac{dj}{dz} = 0$$

$$(12) \quad j(z) = i\omega e \frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^z dz \psi_2(z) \psi_1^*(z) = i\omega e^2 \frac{Ez_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^z dz \psi_2(z) \psi_1^*(z)$$

$$(13) \quad E(z) = E + \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{V_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\omega_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^z dz \psi_2(z) \psi_1^*(z)$$

$$(14)$$

$$P(\omega) = \int_0^d j(z) E^*(z) + j^*(z) E(z) dz =$$

$$= 2 \operatorname{Re} \int_0^d dz i\omega e^2 \frac{Ez_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^z dz' \psi_2(z') \psi_1^*(z') \left\{ E + \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{eEz_{12}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega + i\nu)} \int_0^z dz' \psi_2^*(z') \psi_1(z') \right\} =$$

$$= -2\omega e^2 E^2 \operatorname{Im} \left\{ \frac{z_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega - i\nu)} \int_0^d dz \int_0^z dz' \psi_2(z') \psi_1^*(z') \left[1 + \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{ez_{12}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega + i\nu)} \int_0^z dz' \psi_1(z') \psi_2^*(z') \right] \right\}$$

Проинтегрируем интеграл в (14) по частям:

$$\begin{aligned}
& \int_0^d dz \int_0^z dz' \psi_2(z') \psi_1^*(z') \left[1 + \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{ez_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega + i\nu)} \int_0^z dz' \psi_1(z') \psi_2^*(z') \right] = \\
& = - \int_0^d dzz \left\{ \psi_2(z) \psi_1^*(z) \left[1 + \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{ez_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega + i\nu)} \int_0^z dz' \psi_1(z') \psi_2^*(z') \right] \right\} - \\
& - \int_0^d dzz \frac{4\pi e}{\kappa} \frac{ez_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega + i\nu)} \psi_1(z) \psi_2^*(z) \int_0^z dz' \psi_2(z') \psi_1^*(z') \\
& = -z_{12} \left(1 + \frac{8\pi e^2}{\kappa} \frac{z_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega + i\nu)z_{12}} \operatorname{Re} \int_0^d dzz \psi_2(z) \psi_1^*(z) \int_0^z dz' \psi_2(z') \psi_1^*(z') \right)
\end{aligned}$$

Поэтому

(15)

$$\begin{aligned}
P(\omega) &= \\
&= 2\omega e^2 E^2 \operatorname{Im} \left\{ \frac{|z_{12}|^2 (n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega - i\nu)} \left(1 + \frac{8\pi e^2}{\kappa} \frac{z_{21}(n_1 - n_2)}{\hbar(\tilde{\omega}_{21} - \omega + i\nu)z_{12}} \operatorname{Re} \int_0^d dzz \psi_2(z) \psi_1^*(z) \int_0^z dz' \psi_2(z') \psi_1^*(z') \right) \right\} = \\
&= 2\omega e^2 E^2 \frac{|z_{12}|^2 (n_1 - n_2) \nu}{\hbar((\tilde{\omega}_{21} - \omega)^2 + \nu^2)}
\end{aligned}$$

Отметим, что вклад второго слагаемого в круглых скобках равен нулю.

9. Явления в контактах

Контактная разность потенциалов

Рассмотрим твердое тело конечных размеров. Работу которую необходимо совершить для того чтобы электрон, имеющий энергию равную химическому потенциалу, из твердого тела удалить в состояние покоя в вакуум вне твердого тела называется работой выхода или термодинамической работой выхода. Эту величину мы будем обозначать буквой Φ (см. рис. 9.1). Отметим два важных обстоятельства. Первое состоит в том, что в полупроводниках и диэлектриках химический потенциал может находиться в запрещенной зоне, где нет электронных состояний. Поэтому понятие термодинамической работы выхода в этих телах носит не буквальный, а скорее абстрактный характер, хотя эта величина определяет термоэлектронный поток из твердого тела в вакуум и может быть измерена в эксперименте, как будет показано ниже. Второе обстоятельство состоит в том, что термоэлектронная работа зависит не только от химической природы данного твердого тела (т.е. от его атомного состава), но и от состояния его поверхности. Для того чтобы пояснить последнее утверждение рассмотрим ситуацию когда на поверхность полупроводника высаживается один атомный слой посторонних атомов, которые заряжаются в результате обмена электронами с твердым телом. Таким образом возникает двойной заряженный слой, который образован заряженными посторонними атомами и зарядом который они отдали твердому телу, который располагается внутри твердого тела недалеко от поверхности. Очевидно, что на этом двойном слое происходит падение потенциала, в результате которого изменяется разность между химическим потенциалом и энергией покоящегося электрона в вакууме. Отметим, что двойной заряженный слой на поверхности полупроводника часто возникает и без посторонних атомов просто в силу того что плотность валентных электронов на поверхности как правило не совпадает с плотностью ионов. К тому же часто на поверхности даже расстояние между атомами несколько иное,

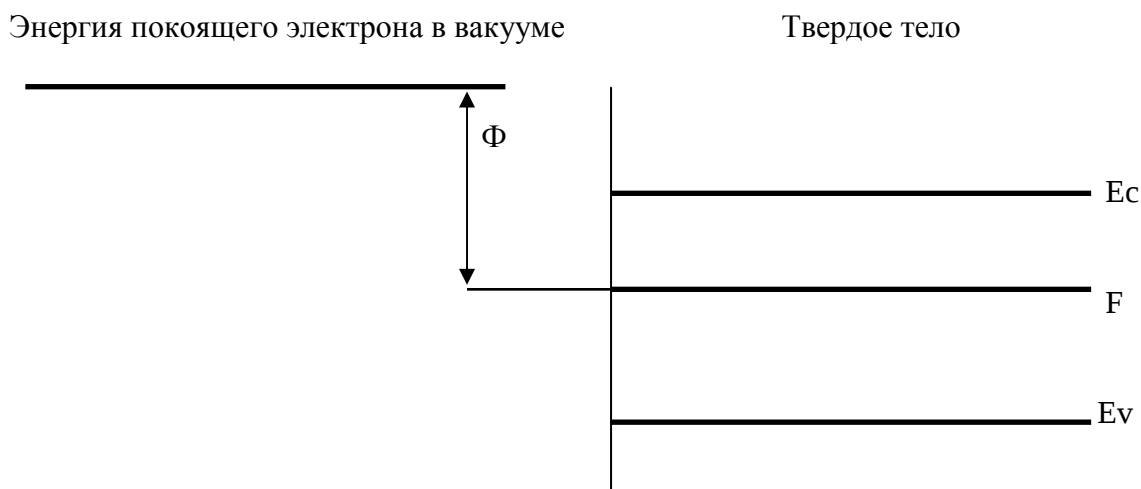


Рис. 9.1. Схематическое изображение работы выхода.

нежели в объеме полупроводника.

Рассмотрим, что произойдет, если привести в контакт два твердых тела с разными работами выхода. В момент установления контакта тела начнут обмениваться электронами. Результирующий поток электронов будет направлен из твердого тела с меньшей работой выхода в твердое тело с большей работой выхода, поскольку в последнем хим. потенциал располагается ниже. В результате на границе двух тел начнет возникать двойной заряженный слой и разность потенциалов. Процесс зарядки двух тел будет продолжаться до тех пор, пока разность потенциалов на заряженном слое не сделает химические потенциалы двух тел одинаковыми. Очевидно, что такая разность потенциалов равна разности работ выхода, деленной на заряд электрона. Эта разность потенциалов называется контактной разностью потенциалов.

Формула Ричарсона-Дэшмана

Обсудим теперь каким образом можно измерить термоэлектронную работу выхода. Для этого рассмотрим вакуумный диод. Хорошо известно, что при превышении определенного напряжения между анодом и катодом ток перестает зависеть от напряжения. Причина этого состоит в том, что все испущенные катодом электроны доходят до анода. Хорошо также известно, что ток в этом режиме сильно зависит от температуры катода. Для того чтобы найти величину этого тока рассмотрим вакуум и катод находящиеся в термодинамическом равновесии. В этом случае поток электронов, уходящих из катода в вакуум, равен потоку электронов, приходящих из вакуума в катод. Кроме того химические потенциалы электронов в вакууме и в катоде равны. Рассчитаем поток электронов из вакуума в катод. Поскольку, как правило, электронов в вакууме мало, то их функция распределения является невырожденной. В этом случае плотность тока электронов из вакуума на единицу поверхности катода равна (полагаем, что эта поверхность нормальна к оси z):

$$(9.1) \quad j = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{p_z}{m_0} \exp\left(\frac{F - E_{vac} - p^2/2m_0}{T}\right) d^3p =$$

где E_{vac} - энергия покоящегося электрона в вакууме, а интегрирование в (9.1) по $p_{x,y}$ проводится от $-\infty$ до ∞ , а по p_z от 0 до ∞ . Интегрируя (1) находим:

$$(9.2) \quad j = \frac{em_0 T^2}{2\pi^2 \hbar^3} \exp\left(-\frac{\Phi}{T}\right) = AT^2 \exp\left(-\frac{\Phi}{T}\right)$$

Формула (2) известна в вакуумной электронике как формула Ричарсона-Дэшмана. Из (2) видно, величина A зависит только от мировых констант и не зависит от природы катода. Эксперимент показывает, что формула (9.2) хорошо описывает зависимость тока насыще-

ния вакуумного диода от температуры, однако величина A немного различается для разных материалов. Таким образом, исследуя зависимость тока насыщения вакуумного диода от температуры, в котором в качестве катода используется исследуемое твердое тело, можно определить его термодинамическую работу выхода.

Контакт Шоттки

Рассмотрим контакт полупроводника с металлом. Пусть для определенности полупроводник является полупроводником n -типа. Возможны два типа контактов. В первом из них работа выхода металла больше работы выхода полупроводника. В этом случае часть электронов уходит из полупроводника в металл, где они скапливаются около контакта. В результате в полупроводнике около контакта образуется слой обеднения, в котором концентрация электронов меньше, нежели в глубине полупроводника. В результате возникновения контактной разности потенциалов для электронов в полупроводнике образуется потенциальный барьер, который препятствует их дальнейшему перетеканию в металл. Такой контакт принято называть контактом Шоттки в честь Вальтера Шоттки, который много сделал в исследовании таких контактов.

Во втором случае работа выхода металла меньше работы выхода полупроводника. В этом случае часть электронов из металла уходит в полупроводник, где собирается около контакта. В этой области концентрация электронов в полупроводнике выше, чем в объеме полупроводника – образуется слой обогащения. Такой контакт называют антизапорным или омическим.

Если металл контактирует с полупроводником p -типа, тогда контакт Шоттки образуется, если работа выхода металла меньше работы выхода полупроводника, поскольку в этом случае в полупроводнике образуется барьер и обедненная область для носителей тока дырок.

Рассчитаем электрический потенциал, который возникает в контакте Шоттки. Для этого будем полагать, что полупроводник имеет n -тип проводимости и является невырожденным. Как будет показано в дальнейшем, контактная разность потенциалов падает в полупроводнике, поскольку в нем концентрация электронов в зоне проводимости многократно выше, чем в полупроводнике. Будем полагать, что металл занимает полупространство $x < 0$, а полупроводник – $x > 0$. Уравнение Пуассона в полупроводнике имеет вид:

$$(9.3) \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\frac{4\pi\rho}{\kappa} = \frac{4\pi e}{\kappa} (n(\varphi) - n_0) ,$$

где n_0 - концентрация электронов в глубине полупроводника, равная концентрации заряженных доноров, $n(\varphi)$ - концентрация электронов в плоскости с потенциалом φ , κ - низ-

кочастотная диэлектрическая проницаемость полупроводника. Для невырожденного полупроводника $n(\varphi) = n_0 \exp\left(e \frac{\varphi - \varphi_\infty}{T}\right)$, где φ_∞ - потенциал в глубине полупроводника.

Если выбрать $\varphi_\infty = 0$, то уравнение принимает вид:

$$(9.4) \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \frac{4\pi e n_0}{\kappa} \left(\exp\left(\frac{e\varphi}{T}\right) - 1 \right)$$

Рассмотрим два предельных случая. Если $e|\varphi(0)| < T$, тогда экспоненту в (9.4) можно разложить в ряд Тейлора в любом месте полупроводника и ограничиться первыми двумя членами разложения. В этом случае (4) упрощается:

$$(9.5) \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \frac{4\pi e^2 n_0 \varphi}{\kappa T} = \frac{\varphi}{\lambda_D^2}, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\kappa T}{4\pi e^2 n_0}}.$$

Величина λ_D называется длиной экранирования Дебая. Решение (9.5), удовлетворяющее граничному условию $\varphi(\infty) = 0$ имеет вид:

$$(9.6) \quad \varphi(x) = \varphi(0) \exp\left(-\frac{x}{\lambda_D}\right)$$

Поэтому мы можем заключить, что если величина потенциала на границе полупроводника по абсолютной величине меньше T/e , то этот потенциал экспоненциально спадает вглубь полупроводника с характерным масштабом, которым является длина экранирования.

Однако, как правило, в контактах Шоттки контактная разность потенциалов удовлетворяет условию $|e\varphi_c| \gg T$ (характерные величины контактной разности потенциалов можно найти в главе 5 книги С.Зи Физика полупроводниковых приборов, т.1. параграф 5.5 М.Мир 1984). В этом случае в области, где падает основная часть потенциала можно полагать $e\varphi \gg T$ и поэтому приближенно можно считать, что в полупроводнике существуют две области: область объемного заряда, в которой $e\varphi \gg T$ и область квазинейтральности, где $\varphi = \varphi_\infty$. В области объемного заряда концентрация электронов много меньше концентрации заряженных доноров, и поэтому ей можно пренебречь. Обозначим ширину области объемного заряда L . На границе областей объемного заряда и области квазинейтральности должно выполняться следующее граничное условие:

$$(9.7) \quad \varphi(L) = \varphi_\infty, \quad \frac{d\varphi(L)}{dx} = 0.$$

Уравнение Пуассона в этом случае принимает вид:

$$(9.8) \quad \begin{cases} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\frac{4\pi en_0}{\kappa}, & x < L \\ \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = 0, & x > L \end{cases}$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее граничному условию (8), имеет вид:

$$(9.9) \quad \varphi(x) = -\frac{2\pi en_0}{\kappa} (x - L)^2 + \varphi_\infty$$

Зависимость потенциала и потенциальной энергии электрона от координаты в контакте Шоттки показана на рис. 9.2.

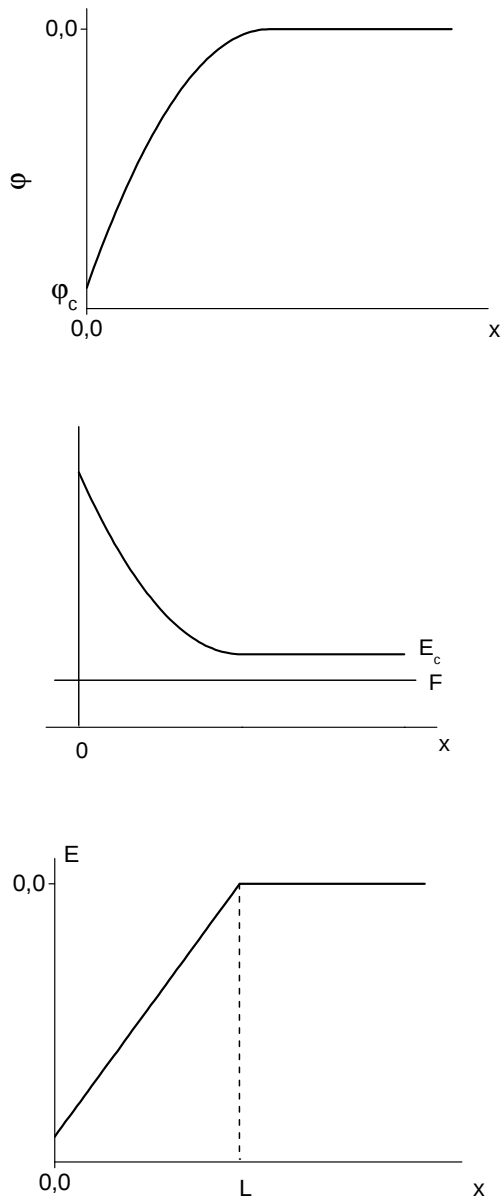


Рис. 9.2. Зависимость потенциала (а), потенциальной энергии электрона (дна зоны проводимости) (б) и электрического поля (в) от координаты в контакте Шоттки.

Из (9.9) видно, что зависимость потенциала от координаты в области объемного заряда параболическая, а электрического поля - линейная.

В случае отсутствия приложенного внешнего напряжения $\varphi(0) = \varphi_c < 0$. Если к контакту Шоттки приложено внешнее напряжение, то его принято считать положительным, если

оно уменьшает высоту потенциального барьера в полупроводнике для электронов, и отрицательным, если оно увеличивает величину этого барьера. Поскольку контакт Шоттки обладает сопротивлением большим, по сравнению с сопротивлениями металла и квазинейтральной области полупроводника, то при не слишком больших положительных напряжениях можно полагать, что вся его величина падает на барьере. В этом случае $\varphi(0) = \varphi_c + V$, где V - приложенное напряжение (полагаем что $\varphi_\infty = 0$). Отметим, что (9.8) и (9.9) будут справедливы только при условии $\varphi(0) \ll -T$. В этом случае из (9.9) находим выражение для ширины области объемного заряда:

$$(9.10) \quad \varphi_c + V = -\frac{2\pi en_0}{\kappa} L^2, \quad L = \sqrt{-\frac{(\varphi_c + V)\kappa}{2\pi en_0}}$$

Из (10) видно, что при приложении положительного напряжения ширина области пространственного заряда уменьшается, та при приложении отрицательного напряжения - увеличивается. Поверхностная плотность заряда полупроводника равна $q = en_0 L$. При изменении напряжения происходит изменение заряда полупроводника. Ситуация аналогична конденсатору.

Для того чтобы найти емкость контакта Шоттки рассмотрим случай, когда к контакту Шоттки приложено достаточно большое по величине постоянное отрицательное напряжение и переменное напряжение малой амплитуды. Благодаря большому отрицательному напряжению барьер для электронов увеличивается и ток, обусловленный термоэлектронной эмиссией невелик. В этом случае ток, текущий через контакт Шоттки обусловлен в основном током перезарядки полупроводника. Для такого тока справедливо соотношение:

$$(9.11) \quad j = -\frac{Sdq}{dt} = C \frac{dV}{dt}$$

где S - площадь контакта, C - его емкость. Из (11) находим, что

$$(9.12) \quad C = -S \frac{dq}{dV}$$

Для получения простого и наглядного выражения емкости контакта Шоттки представим выражение для нее в виде:

$$(9.13) \quad C = -S \frac{dq}{dL} \left(\frac{dV}{dL} \right)^{-1} = \frac{S\kappa}{4\pi L}$$

Из (9.13) видно, что выражение для емкости контакта Шоттки совпадает по виду с таковым для плоского конденсатора, если в качестве расстояния между обкладками взять ширину области пространственного заряда и полагать, что между обкладками находится диэлектрик с проницаемостью κ . Физическая причина этого состоит в том, что в контакте

Шоттки при малом изменении заряда dq изменение напряжения dV точно такое же как и в плоском конденсаторе с расстоянием между обкладками L . Используя второе равенство (9.10) находим зависимость емкости контакта Шоттки от приложенного постоянного напряжения:

$$(9.14) \quad C = S \sqrt{-\frac{en_0\kappa}{8\pi(\varphi_c + V)}} = S \sqrt{\frac{en_0\kappa}{8\pi(|\varphi_c| - V)}}$$

Из (9.14) видно, что величина C^{-2} является линейной функцией от напряжения, наклон которой обратно пропорционален концентрации электронов (доноров) в полупроводнике. Эта функция обращается в нуль при $V = |\varphi_c|$ (см. рис. 9.3). Измеряя зависимость емкости от напряжения можно определять концентрацию электронов в полупроводнике.

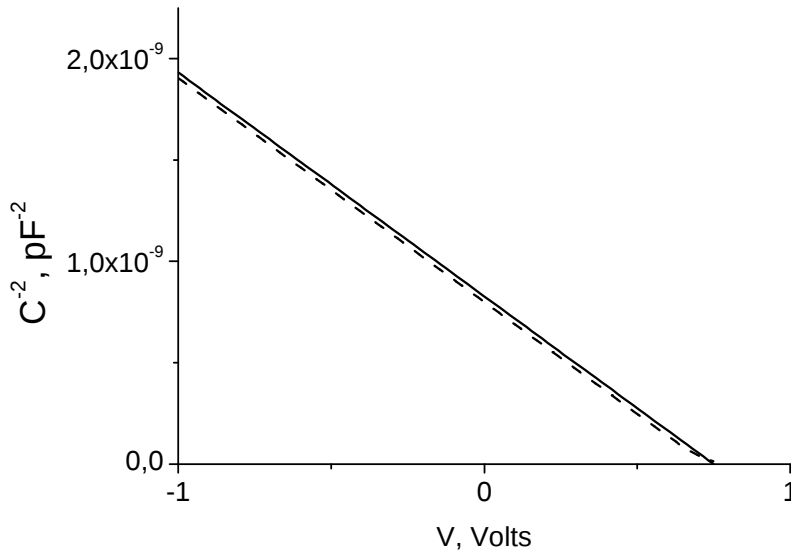


Рис. 9.3. Зависимости $C^{-2}(V)$, рассчитанные по формуле (9.14) (сплошная линия) и по формуле (9.18) (пунктирная линия) для контакта Шоттки к n-GaAs с концентрацией электронов 10^{16} см^{-3} при $T=300\text{K}$. Площадь контакта равна 1 см^2 , $\varphi_c = -0.75 \text{ В}$.

Оказывается, используя зависимость $C(V)$, можно определять зависимость от координаты концентрации электронов в неоднородно легированном полупроводнике, в котором концентрация изменяется на масштабах больших по сравнению с длиной экранирования. В этом случае концентрацию электронов в плоскости на границе области пространственного заряда можно найти из выражения:

$$(9.15) \quad n(L) = -\frac{8\pi}{e\kappa} \left(\frac{d}{dV} \left(\frac{S}{C} \right)^2 \right)^{-1}$$

Доказательство (9.15) предоставляется провести читателю, воспользовавшись приближением $|\varphi(0)| \gg T$.

Отметим, что для нахождения емкости контакта не обязательно знать зависимость потенциала от координаты, а достаточно иметь зависимость электрического поля от потенциала. Действительно, заряд полупроводника следующим образом связан с электрическим полем на контакте: $E(0) = -4\pi q / \kappa$. Для однородно легированного полупроводника эта зависимость может быть получена без использования каких-либо приближений с помощью однократного интегрирования уравнения Пуассона. Такое интегрирование всегда возможно, поскольку плотность заряда в однородно легированном полупроводнике является функцией потенциала и не зависит от координаты непосредственно. Покажем это на примере уравнения (9.4). Для того чтобы проинтегрировать один раз это уравнение умножим его на $d\varphi/dx$ и выделим полные производные в правой и левой частях. После этого уравнение приобретает вид:

$$(9.16) \quad \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 = \frac{d}{dx} \left(\frac{4\pi n_0}{\kappa} \left[\frac{T}{e} \exp\left(\frac{e\varphi}{T}\right) - \varphi \right] \right)$$

Интегрируя его один раз с использованием граничного условия $d\varphi/dx = 0$ при $\varphi = 0$ находим:

$$(9.17) \quad \frac{d\varphi}{dx} = \sqrt{\frac{8\pi n_0}{\kappa} \left[T \exp\left(\frac{e\varphi}{T}\right) - T - e\varphi \right]}$$

Используя (9.12) и связь электрического поля $E = -d\varphi/dx$ с зарядом полупроводника находим выражение для емкости:

$$(9.18) \quad C = S \sqrt{\frac{e^2 n_0 \kappa}{8\pi}} \left(\frac{1 - \exp\left(\frac{e\varphi_c + eV}{T}\right)}{\sqrt{T \exp\left(\frac{e\varphi_c + eV}{T}\right) - T - e\varphi_c - eV}} \right)$$

При выполнении условия $e(\varphi_c + V)/T \ll -1$ из (9.18) получается (9.14). Если $e|\varphi_c + V|/T \ll 1$, тогда из (9.18), разлагая экспоненту в ряд (под корнем разложение надо вести до второго порядка малости по $e(\varphi_c + V)/T$), получаем следующее выражение для емкости:

$$(9.19) \quad C = S \sqrt{\frac{e^2 n_0 \kappa}{4\pi T}} = S \frac{\kappa}{4\pi \lambda_D},$$

которое можно получить непосредственно из решения (9.6).

Связь между потенциалом и электрическим полем для контакта Шоттки к однородно легированному полупроводнику можно получить в общем случае. В общем случае уравнение Пуассона имеет вид:

$$(9.20) \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \frac{4\pi e}{\kappa} \left(N_c \Phi_{1/2} \left(\frac{F - E_c + e\varphi}{T} \right) - n_0 \right)$$

где $\Phi_{1/2}$ - интеграл Ферми-Дирака индекса 1/2 (выражение для него приведено в формуле (3.8)), N_c - эффективная плотность состояний зоны проводимости, выражение для которой приведено после (3.9).

Выделяя полные производные, аналогично тому, как это было сделано при получении (9.16) находим:

$$(9.21) \quad \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^2 = \frac{d}{dx} \left(\frac{4\pi e}{\kappa} \left[\frac{N_c T}{e} \Phi_{3/2} \left(\frac{F - E_c + e\varphi}{T} \right) - n_0 \varphi \right] \right)$$

При получении (21) было использовано следующее свойство интегралов Ферми-Дирака:

$$(9.22) \quad \frac{d\Phi_j(x)}{dx} = \Phi_{j-1}(x),$$

которое следует непосредственно из их определения (3.8). Интегрируя (21) находим искомую связь между потенциалом и полем:

$$(9.22) \quad \frac{d\varphi}{dx} = \sqrt{\frac{8\pi e}{\kappa} \left[\frac{N_c T}{e} \Phi_{3/2} \left(\frac{F - E_c + e\varphi}{T} \right) - \frac{N_c T}{e} \Phi_{3/2} \left(\frac{F - E_c}{T} \right) - n_0 \varphi \right]}$$

Используя (9.22) можно получить выражение для емкости контакта Шоттки в общем случае. Из-за громоздкости этого выражения мы не будем его здесь приводить. Читатель может получить его самостоятельно с использованием (9.22).

Вольт-амперная характеристика контакта Шоттки

Для нахождения вольт-амперной характеристики (т.е. зависимости тока от приложенного напряжения) контакта Шоттки введем понятие энергии электронного сродства. Энергией электронного сродства называют разность энергии вакуума внутри полупроводника и энергии дна зоны проводимости, причем эти две величины берутся в одной точке пространства. Энергия электронного сродства постоянна везде внутри полупроводника даже при наличии в нем электрических полей. Она является аналогом энергии ионизации атома.

При рассмотрении емкости контакту Шоттки мы считали, что потенциал полупроводника не изменяется при приложении к контакту внешнего напряжения. При рассмотрении протекания тока удобно считать неизменным потенциал металла. Будем полагать его равным

нулю. Поскольку в металле падение потенциала ничтожно мало по сравнению с таковым в полупроводнике, потенциал в точке контакта не зависит от величины приложенного напряжения, а, следовательно, постоянна энергия вакуума в точке контакта. По этой же причине не изменяется расстояние от химического потенциала металла до дна зоны проводимости на контакте. Действительно, эта величина равна разности энергии вакуума в месте контакта и энергии электронного сродства полупроводника.

Поток электронов из металла в полупроводник обусловлен термоэлектронной эмиссией через барьер, величина которого не зависит от приложенного напряжения (см. рис.9. 4). Поэтому этот поток также не зависит от приложенного напряжения.

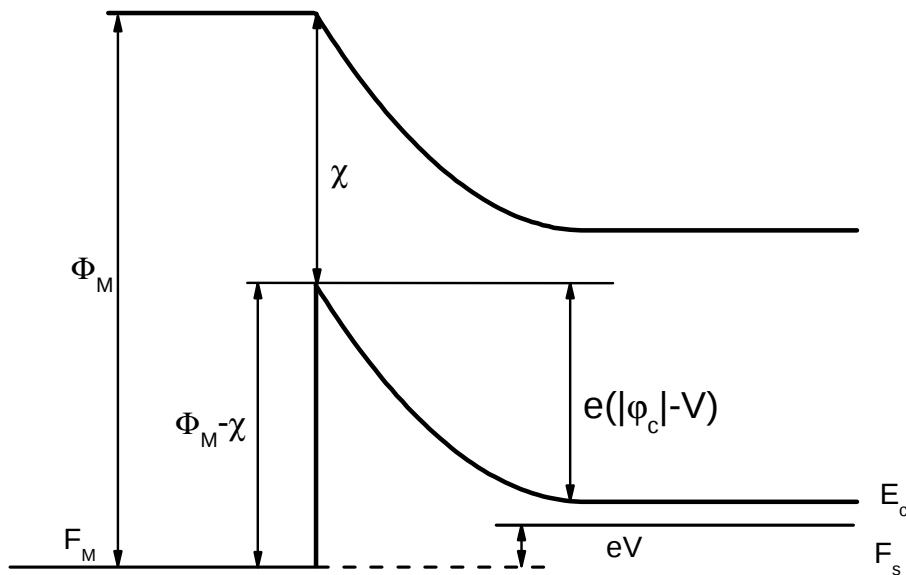


Рис. 4. Зонная диаграмма барьера Шоттки при положительном приложенном напряжении.

Если приложенное напряжение не слишком велико, так что барьер для электронов в полупроводнике по высоте заметно превосходит T , можно полагать, что поток электронов из полупроводника также обусловлен термоэлектронной эмиссией. В невырожденном полупроводнике плотность тока электронов из полупроводника в металл можно вычислить из следующего выражения:

$$(9.23) \quad j = -en_c v_T$$

где

$$(9.24) \quad n_c = n_0 \exp\left(\frac{e(V - |\phi_c|)}{T}\right)$$

концентрация электронов в зоне проводимости полупроводника в месте контакта,

$$(9.25) \quad v_T = - \frac{\int_{-\infty}^0 \frac{p_z}{m_c} \exp\left(-\frac{p_z^2}{2m_c T}\right) dp_z}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{p_z^2}{2m_c T}\right) dp_z} = \sqrt{\frac{T}{2\pi m_c}}$$

тепловая скорость электронов. Полный ток электронов является разностью двух токов: тока электронов, переходящих из полупроводника в металл, и тока электронов, переходящих из металла в полупроводник. Поскольку последний не зависит от приложенного напряжения и при его отсутствии полный ток равен нулю, то последний ток равен со знаком минус току электронов, переходящих из металла в полупроводник, при отсутствии внешнего напряжения. Поэтому плотность полного тока можно записать в виде:

$$(9.26) \quad j = j_c \left[\exp\left(\frac{eV}{T}\right) - 1 \right], \quad j_c = en_0 v_T \exp\left(-\frac{e|\varphi_c|}{T}\right)$$

Вольт-амперная характеристика (9.26) показана на рис. 9.5. Отметим два важных обстоятельства. Первое состоит в том, что при приложении достаточно больших отрицательных напряжений ток не зависит от напряжения. Это обусловлено тем, что в таких условиях ток протекает благодаря инжекции электронов из металла в полупроводник, а она, как было показано выше, не зависит от напряжения. Второе обстоятельство связано с экспоненциальным ростом тока при приложении к контакту Шоттки положительного напряжения. Оно является следствием уменьшения барьера. Экспоненциальный рост тока наблюдается при напряжениях, меньших $|\varphi_c|$. При приближении V к $|\varphi_c|$ сопротивление контакта Шоттки падает и необходимо учитывать падение напряжения на всем полупроводнике.

Для описания измеряемых вольт-амперных характеристик контактов Шоттки обычно в формулу (9.26) вводят фактор неидеальности $\beta \leq 1$, который для хороших контактов близок к единице. В этом случае

$$(9.27) \quad j = j_c \left[\exp\left(\frac{\beta eV}{T}\right) - 1 \right]$$

Кроме того, при достаточно больших приложенных напряжениях наблюдается медленное увеличение обратного тока. Это увеличение связано с двумя причинами. Первая состоит в том, что рассматривая барьер для электронов в полупроводнике, мы не учли силы изображения, которые приводят к его зависимости от приложенного напряжения. Вторая причина состоит в том, что с увеличением обратного напряжения, барьер для электронов становится тоньше, и существенными становятся токи, обусловленные туннелированием электронов через барьер.

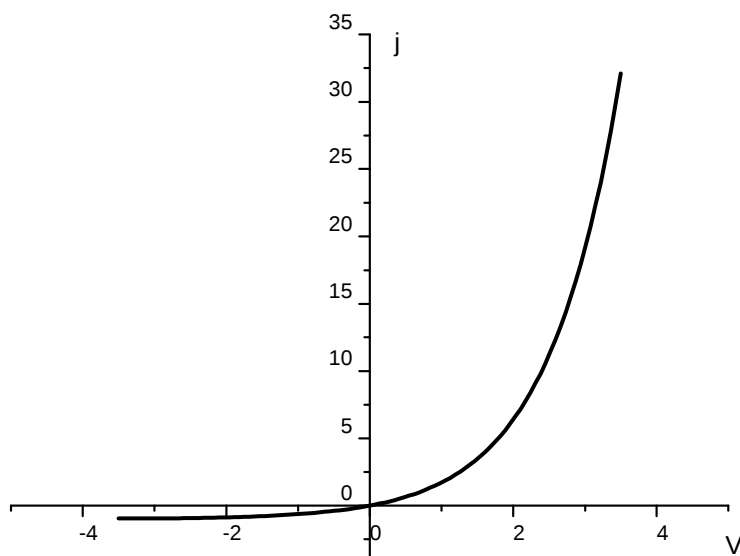


Рис. 9.5. Вольт-амперная характеристика барьера Шоттки

Из вида вольт-амперной характеристики видно, что контакт Шоттки можно использовать в качестве детектора и смесителя. Возникает вопрос: до каких частот можно использовать контакт Шоттки в качестве детектора? Характерное время установления вольт-амперной характеристики контакта Шоттки определяется временем пролета электронов через область пространственного заряда. Если рассматривать контакт Шоттки к GaAs, то характерная тепловая скорость при комнатной температуре $\sim 10^7$ см/с. Для $n_0 = 10^{17}$ см⁻³ ширина обедненной области согласно (10) $\sim 10^{-5}$ см. Поэтому время пролета через область пространственного заряда $\sim 10^{-12}$ с. Важную роль для быстродействия играет RC. Используя (9.27) и (9.14) можно оценить эту величину для плоского контакта Шоттки (см. задачу 1). Эта величина может быть также порядка 10^{-11} - 10^{-12} с. Часто для уменьшения RC используют диоды специальных конструкций с малой площадью контакта. Такие приборы способны осуществлять детектирование в терагерцовом диапазоне частот и являются в настоящее время одними из наиболее быстродействующих детекторов.

Омический контакт. Токи ограниченные объемным зарядом

Рассмотрим теперь омический или антизапорный контакт к полупроводнику n-типа. В этом случае электроны из металла приходят в полупроводник. Поэтому вблизи контакта концентрация электронов больше чем в глубине полупроводника – образуется область обогащения электронами. Зонная диаграмма и зависимость потенциала от координаты для такого контакта показаны на рис. 6.

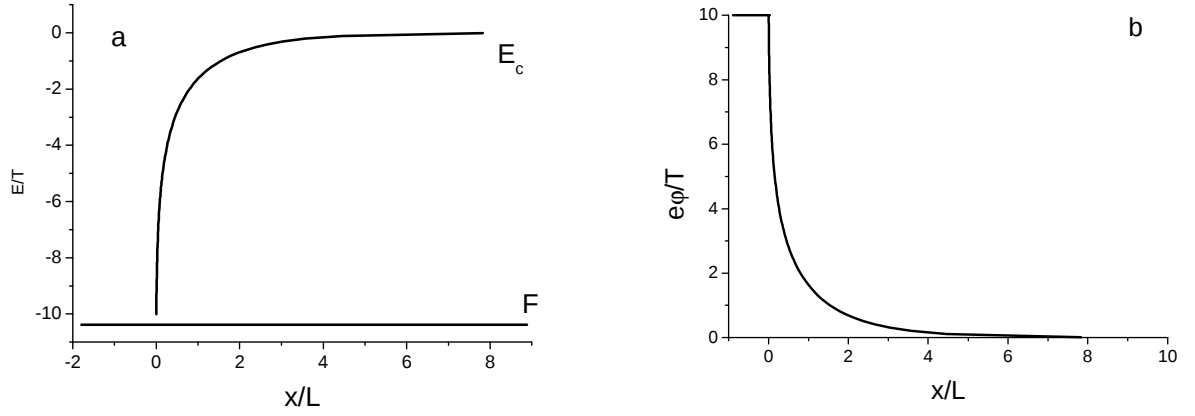


Рис. 9.6. Зависимость положения дна зоны проводимости (а) и потенциала от координаты в омическом контакте без приложенного напряжения. Зависимости рассчитаны по (9.29) при этом полагалось $e\varphi_c = 10T$. $L = \sqrt{\kappa T / (8\pi e^2 n_0)}$

Найдем зависимость потенциала от координаты вблизи контакта. Полупроводник предполагаем невырожденным. В этом случае для нахождения этой зависимости можно воспользоваться (9.16) (полагаем потенциал в глубине полупроводника равным нулю). Из рис. 9.6 видно, что для омического контакта производная от потенциала по координате отрицательна поэтому, интегрируя (16), получаем:

$$(9.28) \quad \frac{d\varphi}{dx} = -\sqrt{\frac{8\pi m_0}{\kappa} \left[T \exp\left(\frac{e\varphi}{T}\right) - T - e\varphi \right]}$$

Интегрируя (28) находим зависимость координаты от потенциала:

$$(9.29) \quad x = -\int_{\varphi_c}^{\varphi} \frac{d\varphi}{\sqrt{\frac{8\pi m_0}{\kappa} \left[T \exp\left(\frac{e\varphi}{T}\right) - T - e\varphi \right]}}$$

Интеграл в (29) не вычисляется в элементарных функциях в общем случае. Поэтому рассмотрим два предельных случая: $e\varphi_c \ll T$ и $e\varphi_c \gg T$. В первом случае разлагая экспоненту в ряд с точностью до членов $\sim \varphi^2$ получаем решение (9.6). Во втором случае можно найти зависимость потенциала от координаты в области вблизи контакта, где выполняется условие $e\varphi \gg T$. Фактически это условие означает, что концентрация электронов в этой области много больше концентрации заряженных доноров и последней можно пренебречь. В этом случае T и $e\varphi$ можно пренебречь по сравнению с экспонентой в подынтегральной функции (29) и интеграл (29) вычисляется:

$$(9.30) \quad x = \sqrt{\frac{\kappa T}{2\pi e^2 n_0}} \left(\exp\left(-\frac{e\varphi}{2T}\right) - \exp\left(-\frac{e\varphi_c}{2T}\right) \right)$$

Из (30) можно найти зависимость потенциала от координаты вблизи контакта:

$$(9.31) \quad \varphi = \varphi_c - \frac{2T}{e} \ln \left(1 + \frac{x}{x_0} \right), \quad x_0 = \sqrt{\frac{\kappa T}{2\pi e^2 n_0 \exp\left(\frac{e\varphi_c}{T}\right)}} = \sqrt{\frac{\kappa T}{2\pi e^2 n_k}},$$

где n_k - концентрация электронов на контакте. Из (9.31) видно, что потенциал вблизи контакта изменяется по логарифмическому закону с характерным масштабом x_0 .

Рассмотрим теперь вольт-амперную характеристику омического контакта. Для этого воспользуемся диффузионно-дрейфовым приближением. В стационарных условиях плотность тока должна быть постоянной по всей длине полупроводника (разумеется, что мы пренебрегаем краевыми эффектами, полагая, что размер контакта существенно превосходит толщину полупроводника). Это условие можно записать в следующем виде для полупроводника n-типа:

$$(9.32) \quad j = en\mu E + eD \frac{dn}{dx},$$

Концентрация и электрическое поле изменяются вдоль полупроводника. Они связаны между собой одним из уравнений Максвелла:

$$(9.33) \quad \kappa \frac{dE}{dx} = 4\pi e(n_0 - n)$$

Исключая из (32) концентрацию электронов с помощью (9.33) получаем уравнение для нахождения электрического поля:

$$(9.34) \quad j = e\mu n_0 E - \frac{\kappa\mu}{4\pi} E \frac{dE}{dx} - \frac{\kappa D}{4\pi} \frac{d^2 E}{dx^2}$$

Решение этого уравнения в аналитическом виде можно найти только для случая $n_0 = 0$, (см. книгу М.Ламперт, П.Марк Инжекционные токи в твердых телах. М.Мир, 1973 гл.9 параграф 8, а также работу W.Shockley, R.C.Prim Phys.Rev. v.90, p.753 (1953)). Это решение выражается через функции Бесселя дробного аргумента или функции Эйри. Оно весьма громоздко и неудобно для анализа. Поэтому мы проанализируем общий случай, но анализ сделаем нестрогий с математической точки зрения.

Для упрощения задачи пренебрежем диффузионным слагаемым в токе. Сделать это можно при приложении достаточно больших напряжений. Это понятно из того обстоятельства, что при малых напряжениях вблизи контакта дрейфовая составляющая тока направлена в противоположную сторону по сравнению с направлением полного тока. Более подробное обсуждение условия применимости этого приближения можно найти в книге В.Л.Бонч-Бруевича, С.Г.Калашникова «Физика полупроводников» М.Наука 1990 гл.6, параграф 10.

Пренебрегая диффузией, получим уравнение первого порядка:

$$(9.34) \quad j = e\mu n_0 E - \frac{\kappa\mu}{4\pi} E \frac{dE}{dx},$$

После интегрирования этого уравнения получаем следующую связь между координатой и полем:

$$(9.35) \quad \frac{x}{l} + C = \frac{E}{E_0} + \ln\left(1 - \frac{E}{E_0}\right),$$

где характерная длина $l = \frac{\kappa j}{4\pi e^2 \mu n_0^2} = \frac{j \tau_M}{e n_0}$, $\tau_M = \frac{\kappa}{4\pi e \mu n_0}$ - время максвелловской релаксации в полупроводнике без учета инжекции, характерное поле $E_0 = \frac{j}{e\mu n_0}$.

Поскольку при пренебрежении диффузией $j = e\mu n E$, то $E/E_0 = n_0/n < 1$. Отметим, что если электроны двигаются вдоль оси x , как это изображено на рис. 5, то $j, E < 0$, поэтому и $l, E_0 < 0$.

Пусть $x = 0$ соответствует контакту металл-полупроводник. В точке контакта концентрация не зависит от приложенного напряжения, поскольку потенциал этой точки не изменяется по отношению к уровню Ферми металла, аналогично тому, как это было в контакте Шоттки. Из условия равенства $n = n_k$ находится постоянная C :

$$(9.36) \quad C = \frac{n_0}{n_k} + \ln\left(1 - \frac{n_0}{n_k}\right) \approx -\frac{1}{2}\left(\frac{n_0}{n_k}\right)^2 \ll 1$$

Последнее приближенное равенство в (9.36) получено с помощью разложения логарифма, с учетом того что $n_0/n_k \ll 1$. Для нахождения вольт-амперной характеристики необходимо вычислить падение напряжения на полупроводнике:

$$(9.37) \quad \begin{aligned} V = \int_0^L E(x) dx &= \int_{E(0)}^{E(L)} \frac{E dE}{\left(\frac{dE}{dx}\right)} = \frac{\kappa\mu}{4\pi} \int_{E(0)}^{E(L)} \frac{E^2 dE}{(e\mu n_0 E - j)} = \mu\tau_M E_0^2 \left[\frac{E}{E_0} + \frac{1}{2} \frac{E^2}{E_0^2} + \ln\left(1 - \frac{E}{E_0}\right) \right] \Bigg|_{E(0)}^{E(L)} = \\ &= \mu\tau_M E_0^2 \left[\frac{L}{l} + \frac{E(L)^2}{2E_0^2} - \frac{E(0)^2}{2E_0^2} \right] \end{aligned}$$

При получении последнего равенства было использовано (9.35). Значения электрического поля на краях полупроводника при заданной плотности тока определяются из трансцендентного уравнения (9.35) с использованием (9.36). Таким образом, задача о нахождении вольт-амперной характеристики решается лишь численно. Однако можно рассмотреть три частных случая, когда вид вольт-амперной характеристики может быть найден аналитически. Прежде чем рассматривать эти предельные случаи заметим, что из (9.35) следует, что $|E(L)| \geq |E(0)|$.

При протекании слабых токов отношение L/l отрицательно и велико по абсолютной величине. Как видно из (35) такое возможно, только если аргумент логарифма близок к нулю, т.е. $E(L)/E_0 \approx 1$. В этом случае $|L/l| \gg |E(L)/E_0|$ и $|E(L)| \gg |E(0)|$. Таким образом, из (9.37) находим напряжение:

$$(9.38) \quad V \approx \mu\tau_m E_0^2 L / l = \frac{jL}{e\mu n_0}$$

Как видно при слабых токах выполняется закон Ома и инжекция электронов из металла не сказывается на суммарной электрическом сопротивлении полупроводника.

Для токов, когда выполняется условие $1 \gg |L/l| \gg |C|$, из (9.35) находим, что $E(L) \gg E(0)$ и:

$$(9.39) \quad \frac{L}{l} \approx -\frac{1}{2} \left(\frac{E(L)}{E_0} \right)^2 - \frac{1}{3} \left(\frac{E(L)}{E_0} \right)^3$$

Отметим, что для получения правильного выражения для напряжения в этом случае необходимо учитывать оба слагаемых в (9.39), несмотря на то что $E(L)/E_0 \ll 1$. Из (9.37) получается следующее выражение для напряжения

$$(9.40) \quad V = -\frac{1}{3} \mu\tau_m E_0^2 \left(\frac{E(L)}{E_0} \right)^3 \approx -\frac{1}{3} \mu\tau_m E_0^2 \left(\frac{-2L}{l} \right)^{3/2} = -\frac{|j|^{1/2} (2L)^{3/2}}{3\mu(en_0\tau_m)^{1/2}}$$

Для получения второго равенства в (9.40) мы использовали только первое слагаемое в (9.39). Из (9.40) получаем следующую зависимость плотности тока от напряжения:

$$(9.41) \quad j = \frac{9}{32\pi} \frac{\kappa\mu}{L^3} V^2$$

которая носит название закона Мотта.

Наконец при больших токах, когда выполняется неравенство $L/l \ll C$ из (9.35) видно, что $E(L) \approx E(0) = E_0 n_0 / n_k = j / e\mu n_k$, т.е. электрическое поле в полупроводнике не зависит от координаты. При этом концентрация электронов в полупроводнике также не зависит от координаты и равна n_k . В этом случае зависимость напряжения от плотности тока такая же что и в (9.38), но с заменой $n_0 \rightarrow n_k$

$$(9.42) \quad V = \frac{j}{e\mu n_k} L$$

Таким образом, при больших токах для омического контакта опять выполняется закон Ома, но проводимость полупроводника определяется величиной $e\mu n_k$.

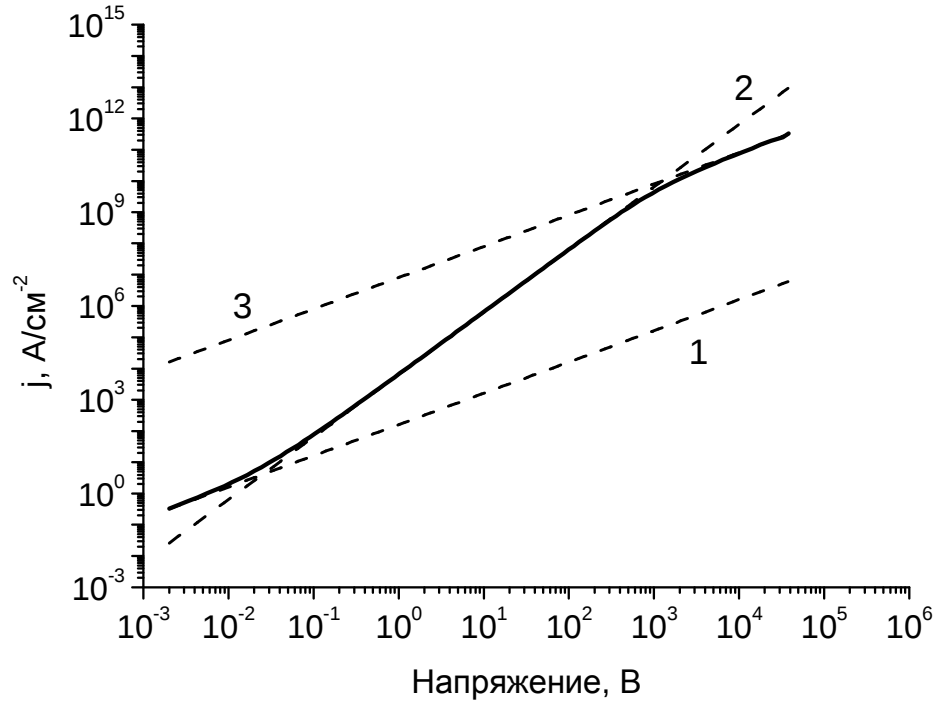


Рис. 9.7 Зависимость плотности тока от напряжения к GaAs с омическим контактом, $L=1\text{мкм}$, с подвижностью $5000\text{ см}^2/\text{Вс}$, $n_0 = 2 \cdot 10^{13}\text{ см}^{-3}$, $n_k = 10^{18}\text{ см}^{-3}$. Сплошная линия соответствует численному расчету с использованием (9.37) и (9.35). Линия 1 соответствует выражению (9.38), линия 2 – (9.41), линия 3 – (9.42).

На рис. 9.7 показана зависимость плотности тока от напряжения образца GaAs с омическим контактом, рассчитанная с использованием численного решения для $E(L)$ (сплошная линия). Пунктирными линиями показаны зависимости (9.38), (9.41), (9.42).

Обсудим теперь при каких напряжениях происходит переход от закона Ома к закону Мотта. По порядку величины это напряжение можно найти из условия $L/l \approx -1$, что следует из рассуждений перед формулами (9.38) и (9.39). Это условие можно представить в виде: $\tau_M = -en_0L/j$. Плотность тока в этом случае можно считать равной $j = en_0v$, где v – скорость электрона и поэтому условие переходу от омического закона к закону Мота можно представить в наглядном виде: $\tau_M = \tau_{tr}$, где τ_{tr} – время пролета электроном полупроводника. Соответствующее напряжение равно по порядку величины $|V| \approx L^2 / \mu\tau_M$.

Напряжение, при котором происходит переход от закона Мота к омическому закону (9.42) можно оценить из условия $L/l \approx C$. Которое наглядно можно представить в виде $2\tau_{tr} = \tau_M'$, где $\tau_M' = \tau_M n_0 / n_k$ – время максвелловской релаксации в полупроводнике с концентрацией электронов n_k . Напряжение перехода $V \approx 2L^2 / \mu\tau_M'$.

В заключение этого раздела кратко обсудим влияние ловушек на вольт-амперную характеристику полупроводника в условиях инжекции. Электрон, находящейся на ловушке дает вклад в изменение электрического поля, но не дает вклада в ток. Поэтому наличие ловушек в полупроводнике приводит к увеличению верхней границы напряжения, при котором справедлива зависимость (9.38). Переход от зависимости (9.38) к закону Мота (9.41) в таком полупроводнике происходит на узком интервале напряжений, при котором ток очень быстро растет с напряжением. Подробный анализ этого случая можно найти в книге М.Ламперт и П. Марк Инжекционные токи в твердых телах М.Наука 1973..