

Баранский П.И.¹, Гайдар Г.П.²



Баранский П.И.

¹Институт физики полупроводников
им. В.Е. Лашкарёва НАН Украины,
просп. Науки, 45, Киев, 03028, Украина;

²Институт ядерных исследований
НАН Украины, просп. Науки, 47,
Киев, 03680, Украина



Гайдар Г.П.

ТЕОРИЯ АНИЗОТРОПНОГО РАССЕЯНИЯ И АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ КИНЕТИКИ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРОЦЕССОВ В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В работе изложены физические основы теории анизотропного рассеяния. Обращается внимание исследователей на выгодное отличие от других теорий, которое заключается в возможности ее практического применения и в области промежуточных магнитных полей ($\mu H/c \approx 1$), в которой использование других теорий оказывается малоэффективным.

Ключевые слова: теория анизотропного рассеяния, многодолинные полупроводники, кинетические явления, электрические и магнитные поля.

This paper deals with the physics of anisotropic scattering theory. Researchers' attention is drawn to the advantageous features of this theory which made it suitable for practical application in the region of intermediate magnetic fields ($\mu H/c \approx 1$) where the use of other theories proved to be inefficient.

Key words: theory of anisotropic scattering, many-valley semiconductors, kinetic phenomena, electric and magnetic fields.

Введение

Без каких-либо преувеличений можно утверждать, что реальной предпосылкой успешного развития ряда разделов кинетики электронных процессов в полупроводниках в нашей стране (и за ее пределами) за последние три-четыре десятилетия была разработка теории анизотропного рассеяния (ТАР), развитием которой ее автор, проф. А.Г. Самойлович, и его школа успешно занимались (в г. Черновцы), начиная с 1960 г. и, фактически, до его последних дней творчески насыщенной и далеко не простой жизни.*

Некоторые разделы ТАР фигурировали в отдельных изданиях [1-4], которые были посвящены рассмотрению выделенных проблем. Поэтому, в данном обзоре будет не лишним, по возможности, сжато и последовательно изложить основные положения ТАР, акцентируя внимание на тех особенностях этой теории, которые обеспечивают практическую возможность использования ее в таких областях напряженности магнитных полей (удовлетворяющих в

*А.Г. Самойлович в 5 лет потерял возможность не только двигаться без посторонней помощи, но даже принимать пищу.

частности критерию $\frac{\mu H}{c} \approx 1$), описание кинетики электронного газа в которых для других теорий оказывается, по сути, невозможным.

Наиболее детально и полно ТАР приведена в конспекте лекций А.Г. Самойловича [5], подготовленном к печати учениками Анатолия Григорьевича – Вихор Л.Н., Охрем О.А. и Снарским А.А.

Заметим, что теоретический спецкурс ТАР (изданный в виде конспекта лекций) является, безусловно, самодостаточным и полным. Но, будучи ограниченным в своем объеме рамками вузовской программы, в нем, конечно, не нашли своего отображения результаты экспериментальных исследований, которые выполнялись в ИФП имени В.Е. Лашкарёва НАН Украины при активном участии в работе теоретиков Черновицкого Государственного университета. Именно этот пробел в объяснении взаимодействия ТАР с экспериментом хотели бы в определенной мере ликвидировать авторы данного обзора, ссылаясь, конечно, лишь на научные статьи и монографии, опубликованные А.Г. Самойловичем и сотрудниками возглавляемой им кафедры.

1. Физические основы теории анизотропного рассеяния и ее внос в изучение кинетики электронного газа в многодолинных полупроводниках (Ge и Si *n*-типа)

Исследование электрических и гальваномагнитных свойств твердых тел дает важные сведения относительно структуры энергетического спектра носителей, характера их рассеяния и других величин, которые описывают явления переноса. Знание точной количественной теории этих явлений позволяет определить целый ряд параметров и дает возможность широкого практического использования электрических и гальваномагнитных свойств твердых тел в науке и технике.

При рассмотрении движения электронов в кристаллической решетке необходимо корректно учитывать анизотропию эффективной массы и анизотропию рассеяния электронов как на колебаниях кристаллической решетки, так и на ионизированных примесях.

Первый успешный шаг в этом направлении сделан в работе Херринга и Фогта [6]. В этой работе неравновесная добавка к функции распределения n'_k принималась в виде линейной функции квазиимпульса \vec{k}

$$n'_k = \vec{A}(\varepsilon) \vec{k}, \quad (1)$$

что эквивалентно учету лишь первой гармоники в распределении n'_k по сферическим функциям, то есть, использовано линейное приближение. При ограничении линейным приближением отсутствует возможность оценки возникающих погрешностей. В случае сильно анизотропного рассеяния (рассеяние на ионизированных примесях) такой подход вообще непригоден.

В рамках же ТАР решение кинетического уравнения, как будет показано ниже, имеет надежное математическое обоснование. Этот метод эквивалентен вариационному методу. Ограничимся рассмотрением упругого рассеяния электронов, которое имеют изоэнергетические поверхности в форме эллипсоидов вращения. Решение кинетического уравнения ищется в виде ряда распределения по сферическим функциям и сводится к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов этого распределения.

Для вычисления потоков необходимо из системы определить коэффициенты при первой

гармонике. Когда вероятность рассеяния в осях эллипсоида масс не зависит от азимута вектора \vec{q} , равного изменению квазиимпульса при рассеянии, и магнитное поле равняется нулю, коэффициенты при первой гармонике можно представить в виде рядов, первый член которых дает линейное приближение Херринга-Фогта. В случае продолговатых изоэнергетических эллипсоидов вращения ($m_{\parallel} > m_{\perp}$) при рассеянии на ионизированных примесях эти ряды быстро сходятся для любых (значительных) отношений $m_{\parallel} / m_{\perp}$, поэтому достаточно сохранять два члена ряда. В случае Si и Ge (как показывают оценки) при рассеянии на акустических фононах достаточно ограничиться первым членом распределения, ведь второй член на два порядка меньше первого. Как показывают оценки, последнее утверждение остается верным и при смешанном рассеянии.

2. Решение кинетического уравнения при анизотропном рассеянии электронов

2.1. Сведение кинетического уравнения к системе алгебраических уравнений (по данным работ [1-10])

При условиях анизотропного рассеяния вероятность перехода $W_{\vec{k}\vec{k}'}$ из состояния \vec{k} в состояние \vec{k}' зависит от направлений \vec{k} и \vec{k}' . Такое рассеяние может обуславливаться или анизотропией энергетического спектра электронов, или анизотропным характером рассеивателя. Будем рассматривать лишь упругое рассеяние. Предположим, что энергетический спектр электронов, которые находятся во внешнем электрическом поле при отсутствии магнитного поля ($H = 0$), имеет вид:

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2 k_i^2}{2 m_i}. \quad (2)$$

Тогда при слабых электрическом поле и градиенте температуры ($grad T$), в соответствии с [2, 3, 7-10], можно записать кинетическое уравнение в виде

$$\hat{D} n_{\vec{k}}^{(0)} + \hat{R} n_{\vec{k}}' = 0, \quad (3)$$

где

$$\hat{R} n_{\vec{k}}' = \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{k}'} (n_{\vec{k}'}' - n_{\vec{k}}'). \quad (4)$$

Здесь $n_{\vec{k}}^{(0)}$ – равновесная функция распределения, $n_{\vec{k}}'$ – неравновесная добавка к функции распределения, \hat{R} – оператор столкновений, $\hat{D} n_{\vec{k}}^{(0)}$ – свободный член кинетического уравнения

$$\hat{D} n_{\vec{k}}^{(0)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial n_{\vec{k}}^{(0)}}{\partial \varepsilon} \sum_i \left(\frac{\partial \mu}{\partial x_i} + \frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} - e E_i \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i}, \quad (5)$$

μ – химический потенциал, E – внешнее электрическое поле.

Кинетическое уравнение решают для каждого отдельно взятого изоэнергетического эллипсоида (перебросы между минимумами не учитываем).

Введем "деформированные" координаты в пространстве квазиимпульсов

$$\xi_i = \frac{\hbar}{\sqrt{2 m_i \varepsilon}} k_i. \quad (6)$$

Тогда выражение (2) будет иметь вид

$$\sum_i \xi_i^2 = 1. \quad (7)$$

Введем сферическую систему координат с полярной осью, ориентированной вдоль оси OZ эллипсоида постоянной энергии:

$$\xi_1 = \sin \vartheta_0 \cos \phi_0, \quad \xi_2 = \sin \vartheta_0 \sin \phi_0, \quad \xi_3 = \cos \vartheta_0. \quad (8)$$

В этом случае, обозначая

$$K_i = -\frac{\partial \mu}{\partial x_i} - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} + e E_i, \quad (9)$$

можно записать свободный член кинетического уравнения в виде

$$\hat{D} n_k^{(0)} = \sum_m D_m Y_{1m}(\vartheta_0, \phi_0), \quad (10)$$

где $Y_{lm}(\vartheta_0, \phi_0)$ – нормированная на единицу сферическая функция,

$$\left. \begin{aligned} D_1 &= \sqrt{\frac{4\pi\varepsilon}{3}} \frac{\partial n_k^{(0)}}{\partial \varepsilon} \left(\frac{K_1}{\sqrt{m_1}} - \frac{i}{\sqrt{m_2}} K_2 \right) \\ D_0 &= \sqrt{\frac{8\pi E}{3m_3}} \frac{\partial n_k^{(0)}}{\partial \varepsilon} K_3, \quad D_{-1} = -D_1^* \end{aligned} \right\}. \quad (11)$$

Учитывая выражение (10), естественно искать решение кинетического уравнения в виде распределения по сферическим функциям

$$n_k' = \sum_{km} X_{km}(\varepsilon) Y_{km}(\vartheta_0, \phi_0). \quad (12)$$

Поскольку при условиях упругого рассеяния оператор столкновений действует только на угловую часть функции n_k' , то получим

$$\hat{R} n_k' = - \sum_{jkm p} X_{km}(\varepsilon) B_{jk}(pm) Y_{jp}(\vartheta_0, \phi_0), \quad (13)$$

где

$$- \sum_{jp} B_{jp}(pm) Y_{jp}(\vartheta_0, \phi_0) = \hat{R} Y_{km}(\vartheta_0, \phi_0). \quad (14)$$

Подставляя (10) и (13) в (3), получим систему уравнений относительно неизвестных $X_{km}(\varepsilon)$:

$$\sum_{km} B_{jk}(pm) X_{km} = D_p \delta_{j1}. \quad (15)$$

Таким образом, задача определения n_k' из уравнения (3) свелась к нахождению X_{km} из бесконечной системы линейных алгебраических уравнений (15). Компоненты тока пропорциональны сферическим функциям первого порядка. А потому для вычисления тока достаточно найти из приведенной системы X_{1m} . Часть функции распределения n_k' , определяющей ток, имеет вид

$$n_k' = \sum_m X_{1m}(\varepsilon) Y_{1m}(\vartheta_0, \phi_0). \quad (16)$$

Исходя из принципа микроскопической обратимости, можно показать, что в распределении (12) входят только нечетные гармоники

Отметим, что систему уравнений (15) можно также получить, используя принцип максимума скорости роста энтропии.

Учитывая действие оператора столкновений на угловую часть функции n_k' , после проведения необходимых расчетов [8, 9] было получено следующее выражение для коэффициентов $B_{jk}(pm)$:

$$B_{jk}(pm) = \frac{4\sqrt{2m_1 m_2 m_3 \varepsilon}}{(2\pi\hbar)^3} i^{m-p} \sum_{s_{paired}} \sqrt{\frac{(2j+1)(2k+1)(j-s)!(k-s)!}{(j+s)!(k+s)!}} \times \int d\Omega \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \cos\theta W(\theta\vartheta\phi) P_j^s(\cos\theta) P_k^s(\cos\theta) P_{sp}^j(\cos\vartheta) P_{sm}^{*k}(\cos\vartheta) e^{i(m-p)\phi}. \quad (17)$$

Суммирование в (17) по s_{paired} проводится от $-k+1$ до $k-1$, если $k < j$; и от $-j+1$ до $j-1$, если $j < k$; P_j^s – присоединенная функция Лежандра; P_{sp}^j – орбитальная часть обобщенной сферической функции (функция Вигнера), определенной в [11]; $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\phi$, ϑ_0 и ϕ_0 – определяют направление $\vec{\xi}$ квазиимпульса электрона в "деформированной" системе координат (6) к рассеянию, ϑ и ϕ – определяют направление вектора $\vec{q} = \vec{\xi} - \vec{\xi}'$, равное изменению квазиимпульса при рассеянии, $\chi = \pi - 2\theta$ – угол рассеяния, то есть, угол между $\vec{\xi}$ и $\vec{\xi}'$ (рис. 1).

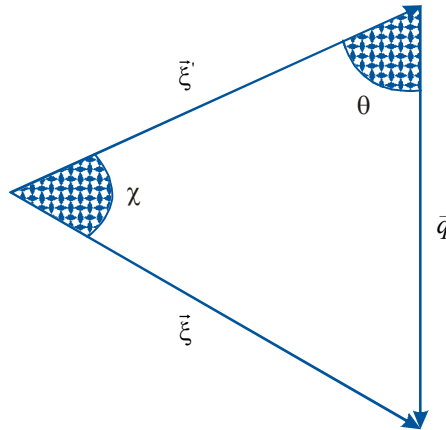


Рис. 1. Схематическое изображение угла рассеяния χ .

Когда вероятность рассеяния в осях эллипсоида масс не зависит от азимута вектора \vec{q} (от угла ϕ), то матрица $\|B_{jk}(pm)\|$ диагонализируется по p и по m :

$$B_{jk}(pm) = B_{jk}(p) \delta_{mp}. \quad (18)$$

При этом система (15) распадается на независимые системы с разными p :

$$\sum_k B_{jk}(p) X_{kp} = D_p \delta_{j1}. \quad (19)$$

В соответствии с этим $W(\theta\vartheta\phi)$ в (17) не будет зависеть от ϕ , тогда

$$B_{jk}(pm) = B_{jk}(m) \delta_{mp} = \frac{\sqrt{2m_1 m_2 m_3 \varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3} \sum_{s_{paired}} \sqrt{\frac{(2j+1)(2k+1)(j-s)!(k-s)!}{(j+s)!(k+s)!}} \times \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \cos\theta W(\theta, \vartheta) P_j^s(\cos\theta) P_k^s(\cos\theta) P_{sm}^j(\cos\vartheta) P_{sm}^{*k}(\cos\vartheta) \times \delta_{mp}. \quad (20)$$

Как видно из (17),

$$B_{jk}(pm) = B_{kj}^*(mp). \tag{21}$$

Пользуясь явным выражением для функций $P_{sm}^j(\cos \vartheta)$ [11], легко видеть из (20), что коэффициенты $B_{jk}(m)$ (как действительные) удовлетворяют условию

$$B_{jk}(m) = B_{kj}(m), \tag{22}$$

а, учитывая (20), можно также записать

$$B_{jk}(m) = B_{jk}(-m). \tag{23}$$

2.2. Итерационный способ определения X_{1m}

Метод вычисления X_{1m} , который будет изложен ниже, можно эффективно использовать для определения X_{1m} из системы (19).

Пусть $B(X X)$ является квадратической формой переменных X_{lm} :

$$B(X X) = \sum_{jk} B_{jk} X_j X_k \tag{24}$$

(индекс m пока что опускаем).

Введем обозначения

$$A_l(X) = \sum_k B_{lk} X_k, \tag{25}$$

$$Z_l = A_l(X), \quad Z_k = \begin{vmatrix} B_{11} & B_{13} & \dots & B_{1,2k-3} & A_1(X) \\ B_{31} & B_{33} & \dots & B_{3,2k-3} & A_3(X) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{2k-1,1} & B_{2k-1,3} & \dots & B_{2k-1,2k-3} & A_{2k-1}(X) \end{vmatrix}. \tag{26}$$

В соответствии с формулой Якобе

$$B(X X) = \sum_l \frac{Z_l^2}{\Delta_l \Delta_{l-1}}, \tag{27}$$

где Δ_l – определитель главного минора " l " порядка матрицы $\|B_{jk}\|$. В нашем случае переменные X_{1m} удовлетворяют системе (18), поэтому

$$A_l(X) = D, \quad A_{l>1} = 0, \quad B(X X) = D X_1. \tag{28}$$

Таким образом, для X_{1m} получим из (27) следующий ряд

$$X_{1m} = D_m \sum_l \frac{\bar{Z}_{l-1}^2}{\Delta_l(m) \Delta_{l-1}(m)}, \tag{29}$$

где

$$\bar{Z}_{l-1}^{(m)} = \begin{vmatrix} B_{31}(m) & B_{33}(m) & \dots & B_{3,2l-3}(m) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{2l-1,1}(m) & B_{2l-1,3}(m) & \dots & B_{2l-1,2l-3}(m) \end{vmatrix}; \quad \bar{Z}_0 = 1. \tag{30}$$

Сумма первых n членов ряда для X_{1m} является решение системы (19), если положить $X_{lm} = 0$ при $l > n$. В этом смысле указанный способ вычисления X_{1m} может быть назван итерационным. Отметим, что ряд (29) при рассмотрении рассеяния на фонах и ионах

примеси быстро сходится. Например, при рассеянии на ионизированных примесях в случае наиболее сильной анизотропии (когда рассеяние происходит, в основном, вперед и $\frac{m_1}{m_3} \ll 1$) отношение первых четырех членов этого ряда таково: 1 : 0.72 : 0.015 : 0. При этом недиагональные элементы матрицы $\|B_{jk}(m)\|$ не малы.

2.3. Рассеяние на ионизированных примесях

Будем считать диэлектрическую постоянную ζ изотропной и примем потенциал примеси в виде

$$V = \frac{e_0^2}{\zeta r} e^{-r/a}, \quad (31)$$

где e_0 – заряд электрона, a – радиус экранирования, который в невырожденном случае вычисляется по формуле

$$a^{-2} = \frac{4\pi e_0^2 n'}{\zeta kT}, \quad (32)$$

где $n' = n + (n + N_A) \left(1 - \frac{n + N_A}{N_D}\right)$. Здесь n – концентрация электронов в зоне проводимости, N_D

и N_A – концентрации доноров и акцепторов, соответственно величина n' , согласно Бруксу [12], учитывает влияние компенсирующей примеси на экранирование.

При этих условиях в борновском приближении для матричного элемента переход получен

$$V_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{e_0^2}{\zeta} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}',\vec{r})} \frac{e^{-r/a}}{r} d\vec{r} = \frac{4\pi e_0^2}{\zeta} \frac{1}{(\vec{k}-\vec{k}')^2 + a^{-2}}. \quad (33)$$

Если выразить $(\vec{k}-\vec{k}')^2$ через углы θ , ϑ и ϕ (см. объяснение к (17)), в случае эллипсоида обращения получим следующее выражение для вероятности перехода

$$W(\theta\vartheta\phi) = \frac{2\pi}{\hbar} N |V_{\vec{k}\vec{k}'}|^2 = \frac{\pi^3 e_0^4 N \hbar^3}{2 \varepsilon^2 m_3^2 \chi^2 \left[\left(\cos^2 \vartheta + \frac{m_1}{m_3} \sin^2 \vartheta \right) \cos^2 \theta + \gamma^2 \right]^2}, \quad (34)$$

где

$$\gamma^2 = \frac{\hbar^2}{8 a^2 m_3 \varepsilon}, \quad (35)$$

N – число ионизированных примесей в 1 см^3 , $m_1 = m_2 < m_3$.

Параметр γ^2 в области $5 \leq T \leq 300 \text{ К}$ и $10^{14} \leq N_D \leq 10^{17} \text{ см}^{-3}$ находится в интервале $10^{-7} \leq \gamma^2 \leq 10^{-2}$. При таких малых γ^2 угловое слагаемое в знаменателе (34) существенно, поскольку вероятность рассеяния на некоторый угол χ (угол рассеяния $\chi = \pi - 2\theta$) при реальных значениях $\frac{m_1}{m_3}$ очень сильно зависит от угла ϑ , то есть, от направления движения электрона.

Поскольку в нашем случае $W(\theta\vartheta\phi)$ не зависит от ϕ , коэффициенты

$B_{jk}(pm) = B_{jk}(m) \delta_{pm}$ (см. (18)), то можно определить X_{1m} с помощью ряда (29). В предельном случае малых, но конечных γ^2 и $\frac{m_1}{m_3}$, получим

$$X_{10} = \frac{D_0}{\tilde{B}_{11}(0)} (1 + 0.72 + 0.015 + 0.00018 + \dots). \quad (36)$$

Значение $\tilde{B}_{jk}(m)$ для $m = 0.1$ приведены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1

Значения коэффициентов $\frac{\tilde{B}_{jk}(0)}{\tilde{B}_{11}(0)}$ при некоторых j и k

j	k			
	1	3	5	7
1	1	3.44	6.74	10.7
3	3.44	28.2	59.2	96.0
5	6.74	59.2	169	287
7	10.7	96.0	287	576

Таблица 2

Значения коэффициентов $\frac{\tilde{B}_{jk}(1)}{\tilde{B}_{11}(1)}$ при некоторых j и k

j	k		
	1	3	5
1	1	1.40	1.74
3	1.40	4.70	6.24
5	1.74	6.24	11.4

Для больших значений γ^2 и $\frac{m_1}{m_3}$, когда анизотропия меньше, ряд (29), естественно, сходится еще лучше. Если воспользоваться формулой для оценки, в которую подставим $\frac{m_1}{m_3} = 0.052$ для *Ge* и $\frac{m_1}{m_3} = 0.196$ для *Si*, то второй член в (29) будет равняться соответственно 0.38 и 0.15, а третий член $\cong 10^{-3}$ в обоих случаях.

Аналогично для X_{11} в предельном случае малых, но конечных γ^2 и $\frac{m_1}{m_3}$, получим

$$X_{11} = \frac{D_1}{\tilde{B}_{11}(1)} (1 + 0.72 + 0.015 + \dots). \quad (37)$$

Для *Ge* и *Si* второе слагаемое в (37) будет равно 0.50 и 0.18 соответственно. Поэтому как в случае X_{10} , так и в случае X_{11} , можно ограничиться двумя членами ряда.

Ограничившись в (29) вторым членом, будем иметь

$$X_{1m} = D_m \chi_m, \quad (38)$$

где

$$\chi_m = \frac{1}{B_{11}(m)} \left[1 + \frac{B_{13}^2(m)}{B_{11}(m) B_{33}(m) - B_{13}^2(m)} \right], \quad (39)$$

причем $\chi_1 = \chi_{-1}$. Учитывая (21) и (38), получим следующие выражения для компонент тензора времени релаксации

$$\left. \begin{aligned} \tau_{\parallel} = \tau_{33} = \chi_0 &= \frac{1}{B_{11}(0)} (1 + g_0) \\ \tau_{\perp} = \tau_{11} = \chi_1 &= \frac{1}{B_{11}(1)} (1 + g_1) \end{aligned} \right\}, \quad (40)$$

где

$$g_m = \frac{B_{13}^2(m)}{B_{11}(m) B_{33}(m) - B_{13}^2(m)}. \quad (41)$$

В изотропном случае ($\frac{m_1}{m_3} = 1$) все $B_{jk}(m) = 0$ при $j \neq k$ и формулы (40) дают нам время релаксации, полученное Бруксом и Херрингом [12], а также Динглем [13]

$$\tau^{-1} = \frac{\pi e_0^4 N}{\zeta^2 \sqrt{2 m^* \varepsilon^3}} \left(\ln \frac{1 + \gamma^2}{\gamma^2} - \frac{1}{1 + \gamma^2} \right). \quad (42)$$

Отметим, что все коэффициенты $B_{jk}(m)$ могут быть вычислены точно и представляют собой довольно сложные и громоздкие выражения. Однако, как оказалось, при вычислении $B_{jk}(m)$ для *Ge* и *Si* можно выполнить распределение по параметру $\alpha^2 = \gamma^2 \frac{m_3}{m_1}$ и пренебречь всеми членами порядка α^2 и выше, поскольку в наиболее важной для практики области $\gamma^2 \leq 10^{-2}$. Найденные коэффициенты $B_{jk}(m)$ могут быть использованы для вычисления поправки g_m по формуле (39) в случаях, когда рассеяние на ионах примеси превалирует над другими механизмами рассеяния (сильно компенсированные образцы, низкие температуры и др.)

2.4. Рассеяние на акустических фононах

На основе метода деформационного потенциала [6] и результатов работы [14] вероятность рассеяния для *Ge* и *Si* приводится к виду

$$W(\vartheta) = \frac{2\pi k T C_1^2}{C_{11}' \hbar} \left\{ \begin{aligned} &1 + \frac{2 C_2 m_3 \cos^2 \vartheta}{C_1 (m_1 \sin^2 \vartheta + m_3 \cos^2 \vartheta)} + \frac{C_2^2 m_3^2 \cos^4 \vartheta}{C_1^2 (m_1 \sin^2 \vartheta + m_3 \cos^2 \vartheta)^2} + \\ &+ \frac{C_2^2 C_{11}' m_1 m_3 \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta}{C_1^2 C_{44}' (m_1 \sin^2 \vartheta + m_3 \cos^2 \vartheta)^2} \end{aligned} \right\}, \quad (43)$$

где C_1 и C_2 – константы деформационного потенциала, C_{11}' и C_{44}' – усредненные упругие постоянные, определенные в [14].

Как видно из (43), W не зависит от угла θ , а также, и от угла рассеяния. Коэффициенты $B_{jk}(m)$ вычисляются по формуле

$$B_{jk}(m) = \frac{4 m_1 \sqrt{2 m_3 \varepsilon}}{(2 \pi \hbar)^3} \sum_{s \text{ paired}} L_{jk}^s R_{jk}^s(m), \quad (44)$$

где

$$\left. \begin{aligned} L_{jk}^s &= 2 \sqrt{\frac{(j-s)!(k-s)!}{(j+s)!(k+s)!}} \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta P_j^{*s}(\cos \theta) P_k^s(\cos \theta) \\ R_{jk}^s(m) &= \int d\Omega \bar{P}_{sm}^j(\cos \vartheta) \bar{P}_{sm}^{*k}(\cos \vartheta) \end{aligned} \right\}, \quad (45)$$

$\bar{P}_{sm}^j(\cos \vartheta)$ – функции, нормированные на единицу.

Матрица коэффициентов $B_{jk}(m)$ в этом случае очень близка к диагональной, поэтому второй член ряда (29) для X_{1m} уже можно опустить, поскольку для Ge и Si он на два порядка меньше первого.

Согласно (44) и (45) соответствующие значения $B_{11}(m)$ будут иметь вид

$$B_{11}(m) = \frac{1}{\tau_0} S_m, \quad (46)$$

где "изотропное" время релаксации τ_0

$$\tau_0 = \frac{\pi C_{11}' \hbar^4}{k T C_1^2 \sqrt{2 m_1^2 m_3 \varepsilon}}, \quad (47)$$

$$\begin{aligned} S_0 &= 1 + \frac{2 C_2 m_3}{C_1 m_1 \beta^2} \left(1 - \frac{3}{\beta^2} + \frac{3}{\beta^3} b \right) + \frac{m_3 C_2^2}{m_1 C_1^2 \beta^4} \times \\ &\times \left\{ \frac{m_3}{m_1} \left(1 - \frac{6}{\beta^2} - \frac{3 m_1}{2 \beta^2 m_3} + \frac{15}{2 \beta^3} b \right) + \frac{C_{11}'}{C_{44}'} \left[2 + \frac{15}{2 \beta^2} - \frac{3 b}{2 \beta^3} (5 + 3 \beta^2) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (48)$$

$$\begin{aligned} S_1 &= 1 + \frac{C_2 m_3}{C_1 m_1 \beta^2} \left(2 - \frac{3}{\beta^2} + \frac{3 b m_3}{m_1 \beta^3} \right) + \frac{m_3 C_2^2}{m_1 C_1^2 \beta^4} \times \\ &\times \left\{ \frac{m_3}{m_1} \left(1 + \frac{15}{4 \beta^2} - \frac{3 b}{4 \beta^3} (5 + 3 \beta^2) \right) - \frac{C_{11}'}{4 C_{44}'} \left[13 + \frac{15}{\beta^2} - \frac{3}{\beta^3} (5 + 6 \beta^2 + \beta^4) b \right] \right\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Здесь $\beta^2 = \frac{m_3 - m_1}{m_1}$, $b = \arctg \beta$.

Тензор времени релаксации имеет вид

$$\tau_{11} = \tau_{22} = \tau_{\perp} = \frac{1}{B_{11}(1)} = \frac{\tau_0}{S_1}; \quad \tau_{33} = \tau_{\parallel} = \frac{1}{B_{11}(0)} = \frac{\tau_0}{S_0}. \quad (50)$$

2.5. Смешанное рассеяние

В случае смешанного рассеяния коэффициенты $B_{jk}(m)$ (вследствие сложения вероятностей перехода) будут иметь вид

$$B_{jk}(m) = B_{jk}^f(m) + B_{jk}^{ion}(m), \quad (51)$$

где $B_{jk}^f(m)$ и $B_{jk}^{ion}(m)$ – коэффициенты, которые соответствуют рассеянию на одних фононах или ионах примеси. Второй член ряда (29) для X_{1m} (он был обозначен как g_m) будет определяться соотношением

$$g_m = \frac{(B_{13}^f(m) + B_{13}^{ion}(m))^2}{(B_{11}^f(m) + B_{11}^{ion}(m))(B_{33}^f(m) + B_{33}^{ion}(m)) - (B_{13}^f(m) + B_{13}^{ion}(m))^2}. \quad (52)$$

Поскольку матрица коэффициентов $\|B_{jk}^\phi(m)\|$ (как уже упоминалось выше) почти диагональная, то из (51) следует, что поправка g_m в этом случае намного меньшая, чем в случае сугубо ионного рассеяния. Анализ показывает, что для *Ge* и *Si* при смешанном рассеянии g_m составляет несколько процентов во всем практически важном интервале температур и концентраций примесей. Поэтому в случае смешанного рассеяния (а этот вид рассеяния практически имеет место очень часто) достаточно в разложении (29) для X_{1m} ограничиться первым членом (линейное приближение).

3. Использование ТАР для исследования термоэлектрических и термомагнитных явлений в анизотропных полупроводниках

Поскольку теория термоэлектрических и термомагнитных явлений в рамках использованных здесь предположений была опубликована в полном объеме отдельным изданием [3], здесь мы ограничимся несколькими замечаниями общего характера, связанными с ее практическим использованием (при сопоставлении ее выводов с экспериментом).

В рамках принятых в зонной теории и ТАР предположений в цитированном издании построена общая теория гальвано- и термомагнитных явлений для произвольных по величине (но не квантовых) магнитных полей. При этом кинетика электронных процессов в многодолинных полупроводниках рассматривалась как при наличии, так и при отсутствии эффектов увлечения электронов фононами.

Качественный и количественный анализ всей совокупности рассмотренных эффектов, как оказалось, удается провести до конца, ограничиваясь введением всего лишь двух, хорошо измеренных на опыте параметров: параметра анизотропии подвижности $K = \mu_\perp / \mu_\parallel$ и параметра анизотропии термоЭДС увлечения $M = \alpha_\parallel^\phi / \alpha_\perp^\phi$, которые характеризуют отдельно взятый изоэнергетический эллипсоид.

Использование одноосной упругой деформации (при наложении на кристалл и изменении деформирующего механического напряжения X в довольно широких границах) обеспечивает проведение анализа исследуемых явлений при разном количестве эффективно проявляющих себя изоэнергетических эллипсоидов: от одного (*n-Ge*, деформированный в направлении $\langle 111 \rangle$) до шести (*n-Si* – в недеформированном кристалле).

Существует, однако, много полупроводников, в которых изоэнергетические поверхности имеют форму не эллипсоидов вращения, а форму трехосных эллипсоидов (и даже более сложную). В монографии [3] осуществлена также необходимые обобщения теории, пригодной для описания кинетических явлений и в этих (далеко не простых) случаях, которые можно использовать для сопоставления опытных данных с теорией.

Выводы

1. Сформулированы основные положения теории анизотропного рассеяния (ТАР) и приведены наиболее важные формулы этой теории в виде, удобном для практического использования при сопоставлении с опытными данными.

2. Выяснены возможности практического использования ТАР при исследовании термоэлектрических и термомагнитных явлений в многодолинных полупроводниках типа *n-Si* и *n-Ge*.
3. Отмечена характерная особенность ТАР, а именно: ее пригодность для описания кинетики электронных процессов не только в области предельно малых или предельно больших (неквантовых), но и в области промежуточных магнитных полей H (то есть, при $\frac{\mu H}{c} \approx 1$), в которой использование других теорий не является эффективным.

Литература

1. Томчук П.М. Анизотропное рассеяние носителей тока в полупроводниках / П.М. Томчук // УФЖ. – 1968. – Т. 13, № 8. – С. 1366 – 1377.
2. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках / П.И. Баранский, И.С. Буда, И.Д. Даховский [и др.]. – К.: Наук. Думка, 1977. – 270 с.
3. Баранский П.И. Теория термоэлектрических и термомагнитных явлений в анизотропных полупроводниках П.И. Баранский, И.С. Буда, И.В. Даховский. – К.: Наук. думка, 1987. – 272 с.
4. Баранский П.И. Термоэлектрические и термомагнитные явления в многодолинных полупроводниках / П.И. Баранский, И.С. Буда, В.В. Савяк. – К.: Наук. думка, 1992. – 268 с.
5. Термоэлектрические и термомагнитные методы превращения энергии. Конспект лекций профессора А.Г. Самойловича / Л.Н. Вихор, Е.А. Охрем, А.А. Снарский. – Черновцы: Рута, 2006. – 228 с.
6. Херринг К. Проблемы физики полупроводников / К. Херринг, Э. Фогт. – М.: ИЛ, 1957. – 567 с.
7. Самойлович А.Г. Анизотропное рассеяние электронов на ионизированных примесях / А.Г. Самойлович, И.Я. Коренблит, И.В. Даховский // ДАН СССР. – 1961. – Т. 139, № 2. – С. 355 – 358.
8. Решение кинетического уравнения при анизотропном рассеянии электронов / А.Г. Самойлович, И.Я. Коренблит, И.В. Даховский [и др.] // ФТТ. – 1961. – Т. 3, № 10. – С. 2939 – 2952.
9. Анизотропное рассеяние электронов на ионизированных примесях и акустических фононах / А.Г. Самойлович, И.Я. Коренблит, И.В. Даховский // ФТТ. – 1961. – Т. 3, № 11. – С. 3285 – 3298.
10. Даховский И.В. Анизотропное рассеяние электронов в германии и кремнии / И.В. Даховский // ФТТ. – 1963. – Т. 5, № 8. – С. 2332 – 2338.
11. Гельфанд И.М. Представления группы вращения и группы Лоренца / И.М. Гельфанд, Р.А. Минлос, З.Я. Шапиро – М.: Физматгиз, 1958. – 367 с.
12. Брукс Г. Проблемы современной физики: Сб. пер. Вып. 8 / Г. Брукс. – М.: Изд-во Иностран. лит., 1957. – 216 с.
13. Dingle R.V. Scattering of electrons and holes by charged donors and acceptors in semiconductors / R.V. Dingle // Phil. Mag. Ser. 7. – 1955. – 46 (379). – 831 – 840 pp.
14. Самойлович А.Г. Влияние анизотропии кристалла на тепловые колебания атомов в *Ge* и *Si* / А.Г. Самойлович, В.Д. Искра // ФТТ. – 1960. – Т. 2, № 11. – С. 2827 – 2833.

Поступила в редакцию 22.10.2012.