ЭЛЕКТРОНИКА

УДК 621.039.05

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ БЕЗ ЦЕНТРА ИНВЕРСИИ НА ОСНОВАНИИ КВАНТОВОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

ЧЕРНЫШОВ Н.Н.

Описывается полученная по электрическому полю поправка к току, связанная с отсутствием центра инверсии кристалла. Рассматривается случай невырожденного электрического газа. Качественно статический расчет показано моделью асимметричных рассеивателей. Циркулярный фотогальванический эффект в этом расчете отсутствует и поле может считаться действительным. Поскольку решение задачи рассматривается за рамками борновского приближения, основанием является метод квантового кинетического уравнения.

1. Введение

В теории кинетических явлений ток в сильном электрическом поле является нечетной функцией. С учетом анизотропии при разложении тока по полю тензор α_{ijk} равен нулю. Целью является разработка методики расчета асимметричных рассеивателей при отсутствии циркулярного фотогальванического эффекта. Задачи исследования – разработка математической модели переноса заряда и решение квантового кинетического уравнения итерациями по нечетному интегралу столкновений.

2. Явления переноса заряда в электрическом поле

Из теории кристаллографии следует, что тензор нечетного ранга не равен нулю в кристалле без центра инверсии. Равенство нулю α_{ijk} есть следствие предположения о четности вероятности рассеяния электронов. В этом предположении кинетическое уравнение Больцмана имеет вид [1]

$$-eE\frac{\partial f_p}{\partial p} = \hat{I}f_p \equiv \sum_{p'}\left[W_{p',p}f_{p'} - W_{p,p'}\right]f_p. \tag{1}$$

Оно разбивается на уравнения для четной f_p^+ и нечетной f_p^- частей функции распределения:

$$-eE\frac{\partial f_p^{\pm}}{\partial p} = \hat{I}f_p^{\mp}. \tag{2}$$

В низшем порядке $f_p^- = 0, f_p^- = f_0(\in(p))$, где $f_0(\in(p))$ – равновесная функция распределения. Из уравнения (2) следует, что f_p^- разлагается по степеням поля. Если $W_{p',p}$ не является четной функцией, то в разложении тока по электрическому полю возможны члены, содержащие четные степени **E**. Известно, что в борновском приближении вероятность перехода является четной. Для выхода за борновское приближение использовался метод квантового кинетического уравнения. В работе [2] получен нечетный вклад вероятности перехода в низшем порядке теории возмущений. В качестве механизма рассеяния были рассмотрены заряженные примеси с мультипольными моментами. Рассмотрим вероятность перехода для рассеяния электронов на фононах. Для гамильтониана электрон-фононного взаимодействия в низшем порядке по деформации кристалла получим уравнение

$$H_{eph} = \sum_{q,t,p} c_{q,t}(b_{q,t} + b^+_{-q,t})a^+_p a^+_{p-q}, \tag{3}$$

где $c_{q,t}$ – матричный элемент взаимодействия; t – номер ветви колебаний. Здесь и в дальнейшем используется система единиц с $\hbar = 1$.

Можно убедиться, что вклад от расчета не меняется при смене знака всех импульсов. Этим свойством обладают все расчеты в гармоническом приближении. Следует учесть поправки более высокого порядка по деформации кристалла. Первыми поправками будем пренебрегать. Во втором порядке гамильтониан взаимодействия электронов с фононами имеет вид [3]

$$H_{e-ph} = \sum_{q,q',t,t',p,p'} c_{qt,q't'}(b_{qt} + b^+_{-qt})(b_{q't'} + b^+_{-q't'})a^+_p a_{p'}\delta_{p,p'+q+q'}.$$

Матричный элемент ангармонического взаимодействия $c_{qt,q't'}$ обладает следующими свойствами:

$$c_{qt,q't'} = c^*_{q't',qt} = c^*_{-qt,-q't'}. \tag{4}$$

Ангармоническое взаимодействие электронов с акустическими фононами при $q \to 0$ состоит из нелинейного деформационного потенциала $\Lambda_{ijkl}u_{ij}u_{kl}$ (u_{ij} - деформация кристалла) и нелинейного пьезопотенциала. Первый из них приводит к четным по импульсам вкладам в вероятность перехода. Поле в пьезоэлектрике с точностью до членов третьего порядка удовлетворяет уравнению Пуассона:

$$\nabla_i(k_{ij}E_j + k_{ijk}E_jE_k) = 4\pi\nabla_i(\beta_{ijk}u_{jk} + f_{ijkl}u_{jk}E_l + \beta_{ijklm}u_{jk}u_{lm}).$$

Здесь k_{ij} – тензор диэлектрических проницаемостей; k_{ijk} – нелинейная поляризуемость; β_{ijk} – пьезотензор; f_{ijkl} – коэффициенты электрострикции; β_{ijklm} – нелинейный пьезотензор.

3. Решение квантового кинетического уравнения

Схема решения квантового кинетического уравнения Больцмана состоит в следующем:

– интеграл столкновений разбивается на части;

– четная часть интеграла считается изотропной;

– считается, что время энергетической релаксации τ_e гораздо больше времени релаксации по импульсу τ_p;

– вывод уравнений для изотропной и нечетной по импульсу электрона частей функции распределения;

– полученные расчеты подставлялись в кинетическое уравнение с учетом анизотропного рассеяния [3].

Времена релаксации на фононах τ^{ph} и примесях τ^{i};

$$\begin{cases} \tau_p(\varepsilon = \tau_p^{ph}(T)\dfrac{X^{\frac{3}{2}}}{X^2+Z}; \\ \tau_p^{(2)}(\varepsilon = \tau_p^{ph}(T)\dfrac{3X^{\frac{3}{2}}}{3X^2+Z}, \end{cases} \qquad (5)$$

где $X = \dfrac{\varepsilon}{T}$; $Z = \dfrac{\tau_p^{ph}(T)}{\tau_p^{i}(T)}$; $\tau_p^{ph}(T) = \dfrac{\pi\rho s^2}{\sqrt{2}m^{3/2}\Lambda^2 T^{3/2}}$; s – скорость звука.

Безразмерный вектор $\xi_i = eE_i\sqrt{\dfrac{3\tau_p^{ph}(T)\tau_e(T)}{2T}}$ по порядку величины равен изменению энергии электрона в электрическом поле на длине остывания.

Четный по электрическому полю вклад равен [4]

$$F(X) = N\exp\left(-\int_0^X \frac{dX}{1+\xi^2\theta(X)}\right); \qquad (6)$$

Функция $\theta(X) = \dfrac{X}{X^2+Z}$; $Z = \dfrac{\tau_p^{ph}(T)}{\tau_p^{i}(T)}$ и константа N определяются нормировкой

$$\nu T^{3/2}\int_0^\infty dX\sqrt{X}F(X) = 1; \int_0^\infty dX\sqrt{X}\Phi(X) = 0. \qquad (7)$$

Примесный безразмерный тензор $\lambda_{ijk}^{(i)}$ определяется эффективным октупольным моментом примеси $\widetilde{Q}_{ijk}$. Величина четвертого вклада

$$\begin{aligned} \bar{j}_i = \nu T^{2/\sqrt{3}} n_0 es\int_0^\infty dXX^2\{-\theta(X)\Phi'(X)\xi + \\ +\alpha'\gamma_i(F'+F)\theta)\theta(+2\alpha'\xi_j\xi_k\frac{X^{3/2}\theta(X)}{3X^2+Z}\times \\ \times\left(\sqrt{X}\theta(X)F'\right)'\left[\lambda_{ijk}^{(i)}Z + \lambda_{ijk}^{(ph)}X\right]\Big\}. \end{aligned} \qquad (8)$$

В предельных случаях получаем $\xi \ll 1, Z \ll 1$ – слабый разогрев, рассеяние на фононах превалирует:

$$\begin{aligned} \bar{j}_i = \frac{4\alpha' n_0 es}{\sqrt{3\pi}}\Big[2(1-\ln 2)(\xi_\gamma)\xi_i + \gamma_i\xi^2 + \\ +\left(\lambda_{ijk}^{(ph)} + \frac{1}{3}\lambda_{ijk}^{(i)}Z\ln\frac{1}{Z}\right)\xi_j\xi_k\Big]. \end{aligned}$$

Векторная величина γ_i существует только в кристаллах с особенной полярной осью – в частности, во всех пиро- и сегнетоэлектриках. Тензор λ_{ijk} отличен от нуля в более широком классе кристаллов, в частности, в кубических кристаллах без центра инверсии типа A_3B_5. В этих кристаллах существуют равные компоненты $\lambda_{123} = \lambda_{132} = \lambda_{213} = \lambda_{231} = \lambda_{312} = \lambda_{321}$. В них четная часть тока обращается в ноль, если поле направлено по одной из кристаллографических осей [5]. В слабых полях четная по полю часть тока начинается с квадратичных ξ_i поправок. При благоприятных условиях в слабом электрическом поле квадратичная поправка может достичь 10^{-2} от величины омического вклада. В переменном электрическом поле квадратичная поправка к закону Ома определяет стационарный ток, который выражается через амплитуду переменного поля. Интересно, что квадратичная поправка к току не связана с разогревом электронов. Она оказывается конечной в случае отсутствия фононного рассеяния, определяемого релаксацией энергии электронов. Из уравнения для средней энергии электронов получим

$$\langle e\rangle = \frac{3}{2}T\left(1-\alpha'\gamma_i\xi_i+\xi^2\right). \qquad (9)$$

4. Вывод

Научная новизна работы заключается в том, что решение квантового кинетического уравнения дает возможность определить сдвиг аргумента функции распределения по импульсам на величину пропорциональную значению электрического поля.

Из-за различия вероятностей рассеяния состояний p и -p сдвиг аргумента функции распределения по импульсам неодинаков для разных групп электронов, что приводит к изменению средней энергии электронов.

Литература: 1. *Glass A.M., Linde D. and Auston D.H.* Excited state polarization, bulk photovoltaic effect and the photorefractive effect in electrically polarized media // J. Electr, Mater. 1975. Vol.4, №5. P. 915-943. **2.** *Doviak J.M., Kothary S.* Optical rectification and photon drag in p-type GaAs at 10.6m and 1.06m // Proceeding Intern. Conf. on Phys / Semiconductors, Stuttgart. 1974. P. 1257-1261. **3.** *Баскин Э.М., Энтин М.В.* Фотогальванический эффект в кристаллах без центра инверсии // ФТТ. 1978. Т.20, №8. С. 2432-2436. **4.** *Ивченко Е.Л., Пикус Г.Е.* Фотогальванические эффекты в полупроводниках // Проблемы современной физики / Сборник статей к 100-летию со дня рождения *А.Ф. Йоффе*. Л.: Наука. 1980. С. 275-293. **5.** *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика // Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1989. с.340.

Поступила в редколлегию: 20.05.2013

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, проф. Панченко А.Ю.

Чернышов Николай Николаевич, канд. техн. наук, старший научный сотрудник кафедры микроэлектроники, электронных приборов и устройств ХНУРЭ. Научные интересы: математическая физика; методы математического анализа; численное моделирование; задачи теории поля, солнечной и ядерной энергетики. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел. (057) 7021362. E-mail: chernyshov@kture.kharkov.ua.