

ЭФФЕКТЫ ГОРЯЧИХ ДЫРОК В ОДНООСНО ДЕФОРМИРОВАННОМ p -Ge ПРИ $E \parallel P \parallel [111]$

Стариков Е. В., Шикторов П. Н.

Методом Монте-Карло рассчитаны полевые зависимости дрейфовой скорости, частотные зависимости продольной дифференциальной подвижности, спектральные зависимости состояний прямого оптического перехода дырок между нижней и верхней расщепленными подзонами в одноосно деформированном p -Ge, когда давление P и электрическое поле E направлены вдоль оси $[111]$. Установлено, что при давлениях $P \geq 7-8$ кбар в диапазоне $E \approx 0.15-4$ кВ/см имеет место ОДП ганновского типа на частотах $0-100$ ГГц. Показано, что обнаруженное в работе И. В. Алтухова и др. (Письма ЖЭТФ. 1988. Т. 47. В. 3. С. 136-138) стимулированное излучение, сопровождающееся скачком тока в образце, не может быть объяснено прямыми оптическими переходами горячих дырок между подзонами, так как отсутствует инверсная заселенность этих переходов.

В работе [1] сообщалось об обнаружении в одноосно деформированном p -Ge, когда давление P и электрическое поле E приложены вдоль оси $[111]$, стимулированного излучения с длиной волны $80-120$ мкм, сопровождающегося резким ростом тока в образце. По мнению авторов [1], генерация вызвана образованием инверсии прямых оптических переходов дырок между расщепленными легкой и тяжелой подзонами. В настоящей работе, основываясь на моделировании методом Монте-Карло разогрева дырок E полем, мы рассматриваем как предложенный в [1] механизм, так и другие возможные причины генерации излучения, которые могут быть связаны с особенностями разогрева дырок E полем в одноосно деформированном p -Ge.

1. Валентная зона одноосно деформированного p -Ge

Для описания валентной зоны Ge использовалось параболическое гофрированное приближение, в рамках которого закон дисперсии для расщепившихся нижней и верхней подзон имеет вид [2]

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = Ak^2 + a\varepsilon \pm \sqrt{S(\mathbf{k})}, \quad (1)$$

где

$$S(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k}) + \varphi_b(\mathbf{k}, \hat{\varepsilon}) + \varphi_d(\mathbf{k}, \hat{\varepsilon}) + \psi_b(\hat{\varepsilon}) + \psi_d(\hat{\varepsilon}), \quad (2)$$

$$g(\mathbf{k}) = B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2), \quad (3)$$

$$\varphi_b(\mathbf{k}, \hat{\varepsilon}) = Bb [3(k_x^2\varepsilon_{xx} + k_y^2\varepsilon_{yy} + k_z^2\varepsilon_{zz}) - k^2\varepsilon], \quad (4)$$

$$\varphi_d(\mathbf{k}, \hat{\varepsilon}) = 2Dd(k_xk_y\varepsilon_{xy} + k_xk_z\varepsilon_{xz} + k_yk_z\varepsilon_{yz}), \quad (5)$$

$$\psi_b(\hat{\varepsilon}) = \frac{1}{2} b^2 [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2] \quad (6)$$

$$\psi_d(\hat{\varepsilon}) = d^2 (\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2). \quad (7)$$

Здесь энергия отсчитывается в сторону положительных значений, знак «-» соответствует нижней отщепившейся подзоне (индекс 1), знак «+» — верхней (2), константы закона дисперсии $A=13.27$, $B=8.63$, $C=12.4$ (в единицах $\hbar^2/2m_0$), $D^2=C^2+3B^2$, константы деформационных потенциалов $a=2.09$ эВ,

$b=2.5$ эВ, $d=4.5$ эВ [3], $\epsilon = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$ — шпур тензора деформации $\hat{\epsilon}$. Компоненты тензора $\hat{\epsilon}$ связаны с одноосным давлением P следующими соотношениями [4]:

$$\begin{aligned}\epsilon_{\alpha\beta} &= -\frac{1}{2} n_{\alpha} n_{\beta} P S_{44}, \quad \alpha \neq \beta, \\ \epsilon_{\alpha\alpha} &= -P [(S_{11} - S_{12}) n_{\alpha}^2 + S_{12}],\end{aligned}\quad (8)$$

где P — величина давления ($P > 0$ для сжатия, $P < 0$ для растяжения), n_x, n_y, n_z — направляющие косинусы вектора \mathbf{P} , $S_{11} = 9.37 \cdot 10^{-7}$ см²/кг, $S_{12} = -2.57 \cdot 10^{-7}$ см²/кг, $S_{44} = 14.3 \cdot 10^{-7}$ см²/кг [5]. В дальнейшем все энергии будем отсчитывать от дна нижней подзоны, для чего из выражения (1) следует вычесть не зависящую от \mathbf{k} константу $a\epsilon = \sqrt{\psi_b + \psi_d}$.

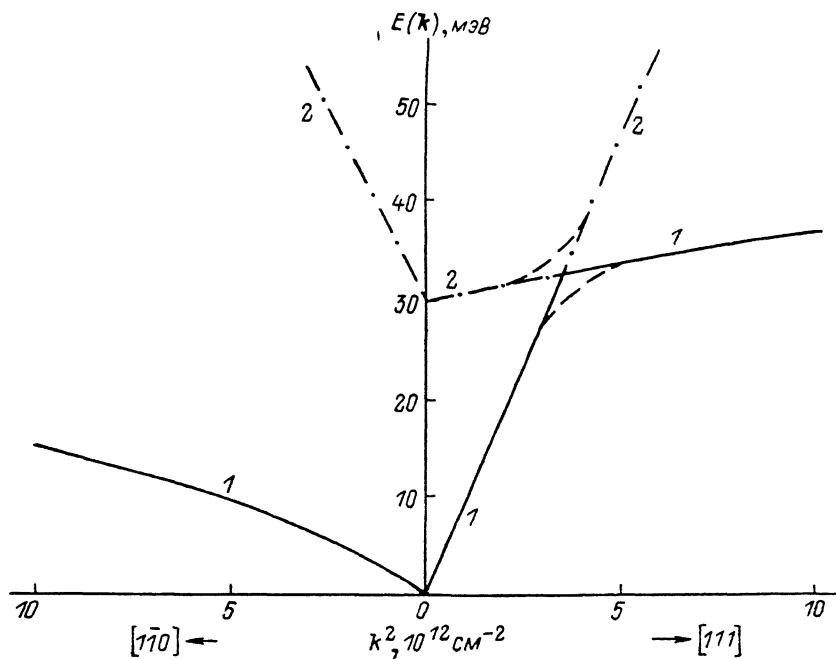


Рис. 1. Зонная диаграмма валентной зоны Ge в направлениях, параллельном (справа, $\mathbf{k} \parallel [111]$) и перпендикулярном (слева, $\mathbf{k} \parallel [1\bar{1}0]$) приложенному одноосному давлению $P = 8075$ кг/см².

Сплошная линия — нижняя отщепившаяся подзона (1), штрихпунктир — верхняя (2). Штриховые линии — качественное поведение энергетических ветвей вблизи точки вырождения с учетом спин-орбитальных поправок.

В отсутствие давления все слагаемые в (1), содержащие компоненты $\hat{\epsilon}$, равны нулю, и выражение (1) описывает две (легкую и тяжелую) параболические деформированные подзоны, вырожденные в точке $\mathbf{k} = 0$ импульсного пространства. Из (1)–(7) следует, что приложение к p -Ge одноосного давления P приводит к снятию вырождения и образованию энергетического зазора $\Delta_{12} = 2 \sqrt{\psi_b - \psi_d}$ при $\mathbf{k} = 0$. Когда P направлено вдоль оси типа $[111]$, точка вырождения при $\mathbf{k} = 0$ расщепляется на две симметричные точки, которые находятся на оси $[111]$ и удалены от центра зоны на расстояние $k_x = \sqrt{|\epsilon_{xy}| d/D}$. При движении в импульсном пространстве из $\mathbf{k} = 0$ вдоль направления приложенной деформации энергия дырки в нижней подзоне сначала изменяется по закону дисперсии легких дырок (в отсутствие деформации), а затем (после прохождения точки вырождения) — по закону дисперсии тяжелых дырок (рис. 1, сплошная линия). Изменение энергии дырок в верхней подзоне имеет при этом обратный характер (штрихпунктирная линия). Учет спин-орбитальных поправок (пропорциональных $\Delta_{12} \cdot 2\Delta_s$, $\Delta_s = 0.29$ эВ для p -Ge) полностью снимает вырождение [2], делая

переход более плавным (штриховые кривые), что, однако, не меняет картины качественно. В поперечном направлении подзоны все время расходятся, причем верхняя остается легкой, а нижняя — тяжелой (рис. 1, слева).

2. Механизмы рассеяния

Будем полагать, что в одноосно деформированном p -Ge, как и в отсутствие деформации [2, 6], взаимодействие дырок с акустическими и оптическими фононами описывается деформационными потенциалами, а с примесями — экранированным кулоновским потенциалом в приближении Конуэлл—Вайскопфа. В рассматриваемых условиях (гелиевые температуры решетки $T_0 \approx 4-10$ К, сильные электрические поля до 3—4 кВ/см, концентрация ионизованной примеси $N_I \approx 2 \cdot 10^{14}$ см $^{-3}$) основным механизмом рассеяния дырок, определяющим их разогрев, является спонтанная эмиссия оптических фононов. Используя общий подход, развитый в работе [2], и приведенные там волновые функции дырок для деформированной валентной зоны, вероятность перехода из состояния \mathbf{k} в j -й подзоне в состояние \mathbf{k}' в i -й подзоне за счет эмиссии оптического фонона можно представить в виде

$$P_{ji}^{\text{оп}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar^2 D_{\text{оп}}^2}{2V\rho\hbar\omega_0} W_{ji}^{\text{оп}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}') - \hbar\omega_0), \quad (9)$$

где $D_{\text{оп}} = 1.1 \cdot 10^9$ эВ/см — константа деформационного потенциала, $\hbar\omega_0 = 37$ мэВ — энергия оптического фонона, $\rho = 5.4$ г/см 3 — плотность германия. Дополнительный множитель, определяемый перекрытием волновых функций, имеет вид

$$W_{ji}^{\text{оп}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \Psi_{ji}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \frac{(-1)^{j+i}}{3\sqrt{S(\mathbf{k}')S(\mathbf{k})}} \left\{ \frac{1}{2} [\varphi_a(\mathbf{k}, \hat{\varepsilon}) + \varphi_a(\mathbf{k}', \hat{\varepsilon})] + \varphi_a(\hat{\varepsilon}) + D^2 (k'_x k'_y k_x k_y + k'_x k'_z k_x k_z + k'_y k'_z k_y k_z) \right\}, \quad (10)$$

где функция

$$\Psi_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{2} - \frac{(-1)^{j+i}}{4\sqrt{S(\mathbf{k})S(\mathbf{k}')}} [\varphi(\mathbf{k}, \hat{\varepsilon}) + \varphi(\mathbf{k}', \hat{\varepsilon}) + 2\psi(\hat{\varepsilon}) + D^2 (\mathbf{k}'\mathbf{k})^2 - B^2 k'^2 k^2 - C^2 (k_x'^2 k_x^2 + k_y'^2 k_y^2 + k_z'^2 k_z^2)] \quad (11)$$

соотношением $\Psi_{ji} = 1 - G_{ji}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ связана с фактором перекрытия волновых функций; $\varphi = \varphi_b + \varphi_d$, $\psi = \psi_b + \psi_d$.

Как показали расчеты, зависимость вероятности перехода от положения дырки в импульсном пространстве, определяемая множителем $W_{ji}^{\text{оп}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, незначительна. Результат практически не меняется, если вместо $W_{ji}^{\text{оп}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ использовать его среднее значение, равное 0.5, т. е. приближение усредненного по начальным состояниям матричного элемента перехода. Тогда влияние деформации на частоту рассеяния определяется только изменением в результате деформации плотности конечных состояний. В рамках последнего приближения учитывались также и акустическое рассеяние.

В силу резкой зависимости матричного элемента примесного рассеяния от абсолютной разности $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$ начального и конечного волновых векторов [как $(q^2 + \beta^2)^{-2}$] внутриподзонное рассеяние существенно только около дна подзон, а межподзонное — около точек вырождения, где q минимально. В первом случае при расчете частоты рассеяния использовалась сферическая аппроксимация закона дисперсии, а во втором — непосредственное интегрирование матричного элемента по изоэнергетическим поверхностям одноосно деформированного p -Ge.

Движение дырки под действием поля E в ближайшей окрестности точек вырождения, согласно [7-9], может существенно возмущаться процессом межподзонного туннелирования. Чтобы оценить вклад туннельных переходов в разогрев дырок, в приближении гамильтониана Латтинжера—Конна [10], учитывая наличие одноосной деформации, были получены с использованием подхода, развитого в [7-9], уравнения, описывающие вероятность перехода

дырки в другую подзону $P(\Delta', \Delta)$ при ее движении в окрестности точки вырождения,

$$P(\Delta', \Delta) = \int_{\Delta'}^{\Delta} \beta(x) a(x) dx, \quad (12)$$

$$a(x) = 2 \int_{\Delta'}^x \beta(y) [1 - 2P(\Delta', y)] \cos \left[\frac{\Delta_{12}}{eEk_s} \int_y^x \sqrt{a^2 + k_{\perp}^2} da \right] dy,$$

где $\beta(x) = k_{\perp}^2 / 2(x^2 + k_{\perp}^2)$, Δ и k_{\perp} — проекции волнового вектора дырки на ось деформации и поперек ее соответственно, отсчитываемые от точки вырождения. При моделировании процесс туннельного перехода трактовался как акт мгновенного переброса дырки в другую подзону при сохранении волнового вектора \mathbf{k} в момент, когда дырка пересекала плоскость, проходящую через точку вырождения перпендикулярно оси деформации. В качестве вероятности такого переброса принималось асимптотическое значение $P(\Delta', \Delta)$ при $\Delta \rightarrow \infty$ и $\Delta' \rightarrow -\infty$, которое рассчитывалось численным интегрированием (12).

3. Дрейфовые характеристики

Полевые зависимости дрейфовой скорости дырок v для $\mathbf{E} \parallel \mathbf{P} \parallel [111]$ приведены на рис. 2. Кривые 1—5 рассчитаны для $\Delta_{12} = 0, 15, 30, 45$ и 60 мэВ, что соответствует давлениям $P \approx 0, 4, 8, 12$ и 16 кбар (точнее $\Delta_{12} = 15$ мэВ при

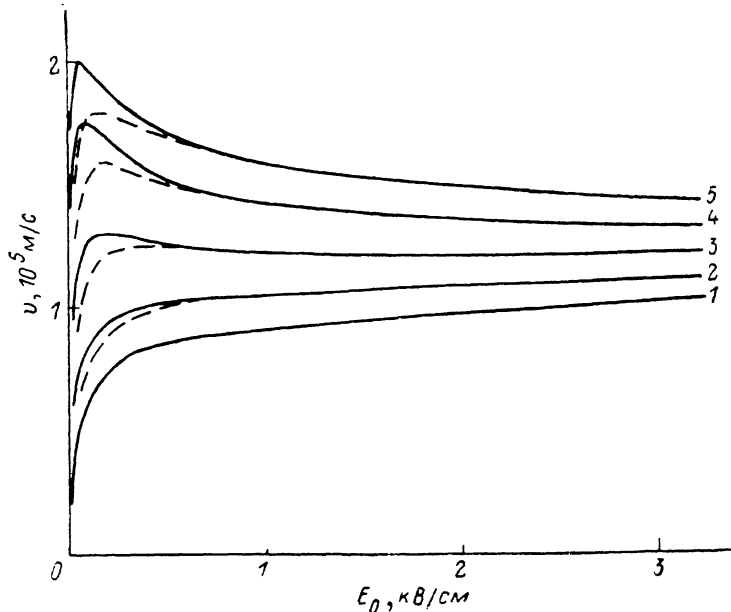


Рис. 2. Полевая зависимость дрейфовой скорости ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{P} \parallel [111]$).

Δ_{12} , мэВ: 1 — 0, 2 — 15, 3 — 30, 4 — 45, 5 — 60. $T = 10$ К. Сплошные линии — без учета примесного рассеяния, штриховые — $N_I = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $\rho_0 = 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

$P = 4037 \text{ кг/см}^2$). Влияние примесного рассеяния существенно только в слабых полях, что приводит к уменьшению подвижности дырок за счет внутриволнового рассеяния (штриховые кривые). Междоузельное примесное рассеяние при $\Delta_{12} \geq 15$ мэВ практически отсутствует.

Основная особенность дрейфовых характеристик — наличие участка отрицательной дифференциальной подвижности (ОДП), т. е. $\mu_{\pm} = \partial v / \partial E < 0$ начиная с давлений $P \geq 7-8$ кбар. Расчет частотной зависимости $\mu_{\pm}(\omega)$ в области ОДП (рис. 3), проведенный методом усреднения по ансамблям до и после рассеяния [11], показал, что частота отсечки ОДП не превышает 70—90 ГГц. Теоре-

тически возникновение ОДП было предсказано еще в работе [12], а экспериментальное исследование эффекта было проведено в [13]. По основным параметрам результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментом. В частности, с увеличением давления наблюдается увеличение дрейфовой скорости, особенно существенное в относительно слабых полях; ОДП возникает начиная с $\Delta_{12} \geq \geq 30$ мэВ; пороговое поле ОДП уменьшается с увеличением давления; при $\Delta_{12} \geq 45$ мэВ значение порогового поля для эффекта Ганна устанавливается в области 150–200 В/см.

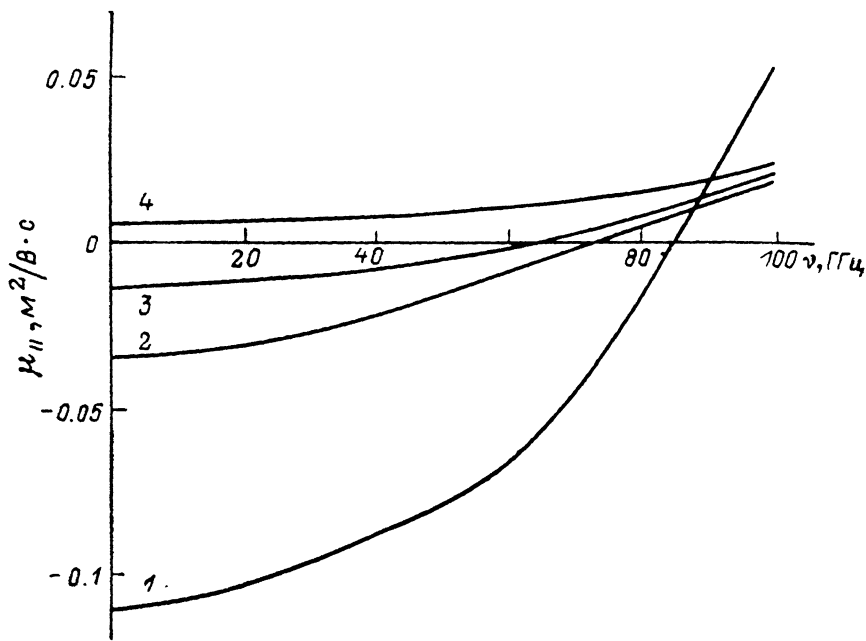


Рис. 3. Частотная зависимость продольной дифференциальной подвижности $\mu_{||}$.
 $T_0 = 10$ К, $N_I = 0$, $P = 12$ кбар. E , кВ/см: 1—1, 2—2, 3—3, 4—4.

4. Междонозная инверсия

В работе [1] высказано предположение, что причина появления стимулированного излучения с длиной волны $\lambda \approx 80-120$ мкм в одноосно деформированном в направлении [111] p -Ge при $P \geq 7-8$ кбар и $E \geq 1.5-3.0$ кВ/см связана с образованием инверсии прямых оптических переходов горячих дырок между расщепленными верхней и нижней подзонами. Рост тока в образце, наблюдающийся при генерации, объясняется интенсивным опустошением верхней подзоны вынужденными оптическими перебросами дырок в нижнюю подзону, где их подвижность значительно выше [при $E_1(k) < \Delta_{12}$], чем в верхней подзоне. Для обоснования такого механизма генерации необходимо рассмотреть в первую очередь саму возможность формирования в результате разогрева дырок полем E инверсии прямых оптических переходов 1—2 в расщепленной давлением валентной зоне. С этой целью были проведены расчеты концентрации дырок в верхней подзоне и спектральных распределений заселенности $N_i(h\nu)$ состояний верхней ($i=2$) и нижней ($i=1$) подзон, находясь в которых, дырки, совершая прямой оптический переход 1—2, могут соответственно испускать и поглощать фотон энергии $h\nu$:

$$N_i(h\nu) = \int f_i(k) \delta\{E_2(k) - E_1(k) - h\nu\} dk. \quad (13)$$

Здесь $f_i(k)$ — функции распределения дырок в подзонах ($i=1, 2$), нормированные на полную концентрацию дырок $p_0 = \sum_{i=1}^2 \int f_i(k) dk$. В случае возникновения

инверсии на частоте $h\nu$ будем иметь $N_2(h\nu) > N_1(h\nu)$. На рис. 4 представлены зависимости $N_1(h\nu)$ и $N_2(h\nu)$, рассчитанные при $E=2$ кВ/см для трех значений давления, соответствующих расщеплению $\Delta_{12}=15, 30, 45$ мэВ. Как следует из рис. 4, во всей области спектра величина $N_1(h\nu)$ значительно превосходит $N_2(h\nu)$, т. е. инверсии нет. Аналогичный результат получен при других значениях E и P , в том числе при $P=4$ кбар и $E=40-100$ В/см, при которых также наблюдалась генерация [1]. Во всех случаях концентрация дырок в верхней подзоне, как и в недеформированном p -Ge, не превышает 3 % и, более того, падает с ростом расщепления. Так, в случае, представленном на рис. 4, она составляла приблизительно 2, 1.5 и 1 % для кривых 1, 2 и 3 соответственно.

Учет в вычислениях как эффекта межподзонного туннелирования, так и перебросов дырок между подзонами за счет примесного рассеяния не меняет результатов качественно. Это связано с тем, что в рассматриваемых условиях

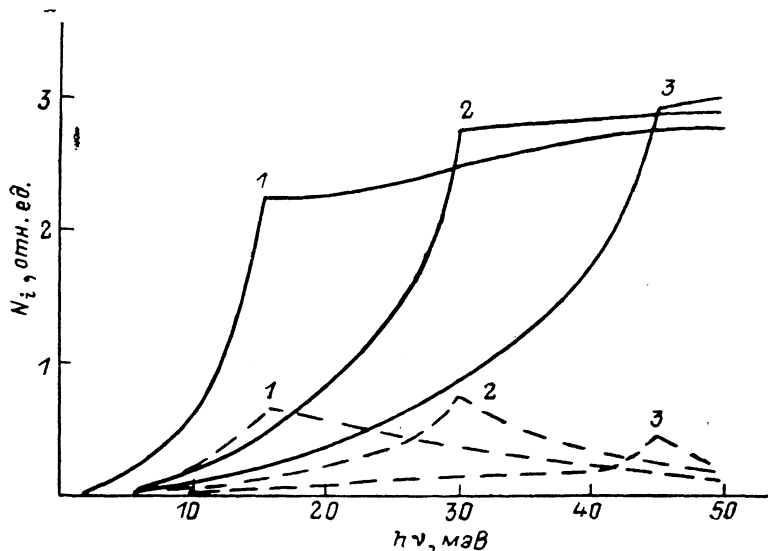


Рис. 4. Зависимость заселенности прямых оптических переходов в нижней (N_1 , сплошные линии) и верхней (N_2 , штриховые) подзонах от энергии кванта перехода $h\nu$.

$T_0 = 10$ К, $N_I = 2 \cdot 10^{14}$ см $^{-3}$, $p_0 = 1 \cdot 10^{14}$ см $^{-3}$, $E = 2$ кВ/см, P , кбар: 1 — 4, 2 — 8, 3 — 12.

вероятности межподзонных переходов за счет этих процессов значительны лишь в непосредственной окрестности точек вырождения, где число горячих дырок слишком мало, чтобы сколько-нибудь существенно повлиять на рассматриваемые характеристики.

Заключение. Из представленных результатов следует, что в рамках модели, использованной для описания разогрева дырок в деформированном p -Ge, механизм, предложенный в [1] для объяснения происхождения стимулированного излучения, не работает — инверсии прямого оптического перехода 1—2 при $h\nu < \Delta_{12}$ нет. Даже если допустить, что выбранная модель не вполне совершенна и инверсия при $h\nu < \Delta_{12}$ есть (а для этого достаточно увеличения концентрации в верхней подзоне до 7—8 %), то и тогда объяснить резкое увеличение тока в (2—5 раз) как вторичный эффект процесса генерации вряд ли удастся, поскольку оптические переходы 1—2 с $h\nu < \Delta_{12}$ могут идти лишь в узких областях импульсного пространства, вытянутых вдоль оси [111], где в верхней подзоне и должна быть локализована подавляющая часть горячих дырок. В направлениях, перпендикулярных оси [111], преобладают переходы 1—2 с $h\nu < \Delta_{12}$ (рис. 1).

Если поменять позицию и считать, что эффект роста тока, наблюдавшийся в эксперименте, первичен, то в рамках рассматриваемой модели он может быть связан лишь с увеличением относительной концентрации дырок в верхней подзоне, причем в областях, лежащих выше точек вырождения, где скорости дырок

значительно выше, чем в нижней подзоне. Однако природа и возможность существования механизмов, осуществляющих такую закачку, не ясны.

По-видимому, и сам эффект Ганна также не может объяснить ни возникновения генерации в области 100 мкм, ни увеличения тока. Однако полностью исключить связь между ним и наблюдаемыми эффектами пока нельзя, так как условия, в которых он наблюдается ($P \geq 7-8$ кбар, $0.5 \leq E \leq 2-4$ кВ/см), достаточно хорошо коррелируют с областью существования обнаруженных в работе [1] явлений.

На наш взгляд, на данном этапе исследований дальнейший прогресс в понимании явления в первую очередь может быть связан с более детальными экспериментальными исследованиями эффекта, которые должны ответить на принципиальные вопросы: что первично — рост тока в образце или генерация; не связан ли рост тока с увеличением концентрации дырок; каков спектр стимулированного излучения.

Список литературы

- [1] Алтухов И. В., Каган М. С., Синис В. П. // Письма ЖЭТФ. 1988. Т. 47. В. 3. С. 136—138.
- [2] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1978. 584 с.
- [3] Баширов Р. И., Гавриленко В. И., Красильник З. Ф., Мусаев А. М., Никоноров В. В., Потапенко С. Ю., Чернобровцева М. Д. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 3. С. 479—484.
- [4] Полякова А. Л. Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов. М., 1979. 168 с.
- [5] Komiyama S., Kuroda S. // Phys. Rev. 1988. V. B38. N 2. P. 1274—1280.
- [6] Jacoboni C., Reggiani L. // Rev. Mod. Phys. 1983. V. 55. N 3. P. 645—705.
- [7] Алешкин В. Я., Романов Ю. А. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. В. 5. С. 1857—1862.
- [8] Алешкин В. Я., Романов Ю. А. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 2. С. 281—286.
- [9] Dargys A., Rudolph A. F. // Phys. St. Sol. (b). 1986. V. 135. N 2. P. 437—444.
- [10] Luttinger J. M., Kohn W. // Phys. Rev. 1955. V. 97. N 4. P. 869—893.
- [11] Стариков Е. В., Шикторов П. Н. // Взаимодействие электромагнитных волн с полупроводниками и полупроводниково-диэлектрическими структурами. Ч. 1. Саратов, 1988. С. 10—15.
- [12] Ridley B. K., Watkins T. B. // Proc. Phys. Soc. 1961. V. 78. N 500. P. 293—304.
- [13] Smith J. E., McGroddy J. C., Nathan M. I. // Phys. Rev. 1969. V. 186. N 3. P. 727—734.

Институт физики полупроводников
АН ЛитССР
Вильнюс

Получена 13.03.1989
Принята к печати 13.04.1989