

ТЕОРИЯ ЯВЛЕНИЙ ПЕРЕНОСА В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ БЕЗ ЦЕНТРА ИНВЕРСИИ

Н.Н. Чернышов

*Харьковский национальный университет радиоэлектроники
Украина*

Поступила в редакцию 23.01.2012

В работе получена по электрическому полю поправка к току, связанная с отсутствием центра инверсии кристалла, рассмотрен случай невырожденного электрического газа. Качественно статический расчет показан 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. Вначале было получено кинетическое уравнение с учетом поправок к борновскому приближению, затем оно решалось итерациями по нечетному интегралу столкновений. Рассмотрение велось в произвольном порядке по электрическому полю.

Ключевые слова: электрическое поле, кинетическое уравнение, инверсия кристалла, гармоническое приближение, функция распределения, анизотропия, потенциал, интеграл столкновений.

У роботі одержано за електричним полем поправку до струму, пов'язану з відсутністю центра інверсії кристала, розглянуто випадок не виродженого електричного газу. Якісно статичний розрахунок показано моделлю асиметричних розсіювачів. Циркулярний фотогальванічний ефект в цьому розрахунку відсутній та поле може бути ураховано дійсним. Оскільки рішення розглядається за рамками борнівського приближення, основою являється метод квантового кінетичного рівняння. Спочатку було отримано кінетичне рівняння з урахуванням поправок до борнівського наближення, потім це рівняння розв'язувалося ітераціями за непарним інтегралом зіткнень. Розгляд вівся в довільному порядку за електричним полем.

Ключеві слова: електричне поле, кінетичне рівняння, інверсія кристалу, гармонічне приближення, функція розподілу, анизотропія, потенціал, інтеграл зіткнень.

In work the amendment to a current, connected with absence of the center of inversion of a crystal is received on an electric field, the case not clear electric gas is considered. Qualitatively static calculation it is shown by model asymmetric the allocator. The circular photogalvanic effect in this calculation is absent also a field can be considered valid. As the decision of a problem is examined behind frameworks bornovsky approximation, the basis is the method of the quantum kinetic equation. In the beginning the kinetic equation has been received in view of amendments to bornovsky to approximation, then it was solved iterations on odd integral of collisions. Consideration was conducted in the any order on an electric field.

Key words: an electric field, the kinetic equation, inversion of a crystal, harmonious approximation, function of distribution, anisotropy, potential, integral of collisions.

ВВЕДЕНИЕ

В теориях кинетических явлений для полупроводников электрический ток в сильном электрическом поле является нечетной функцией поля. Это утверждение следует из приложения к кристаллу модели сплошной среды. Однако, в теории, учитывающей анизотропию при разложении тока по полю тензор α_{ijk} и все тензоры нечетного ранга равны нулю.

Целью работы является разработка методики статического расчета. Циркулярный фотогальванический (ФГЭ) эффект в этом расчете отсутствует и поле считается действительным. Поскольку решение задачи рассматривается за рамками борновского приближения, основанием является метод квантового кинетического уравнения. Вначале было получено кинетическое уравнение, а затем оно решалось итерациями по нечетному интегралу столкновений.

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В СТАТИЧЕСКОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Из 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 [1]

$$-eE \frac{\partial f_p}{\partial p} = \hat{I}f_p \equiv \sum_{p'} [W_{p',p} f_{p'} - W_{p,p'}] f_p. \quad (1)$$

Уравнение (1) разбивается на уравнения для четной f_p^+ и нечетной f_p^- частей функции распределения

$$-eE \frac{\partial f_p^{\pm}}{\partial p} = \hat{I}f_p^{\pm}. \quad (2)$$

В низшем порядке по полю $f_p^- = 0$, $f_p^+ = f_0(O(p))$ где $f_0(O(p))$ – равновесная функция распределения. Из уравнения (2) следует, что с которой связан ток, разлагается по степеням поля. Однако если $W_{p',p}$ не является четной функцией, что может иметь место в кристаллах без центра инверсии, в разложении тока по электрическому полю возможны члены, содержащие четные степени E . Как известно, в борновском приближении вероятность перехода является четной в любых кристаллах. Для выхода за борновское приближение мы воспользовались методом квантового кинетического уравнения. В работе [2] был получен нечетный вклад в вероятность перехода в низшем порядке теории возмущений. В качестве механизмов рассеяния были рассмотрены заряженные примеси с мультипольными моментами и асимметричное рассеяние на акустических фотонах. Поправки для вероятности перехода, содержащие асимметричные вклады, были получены в рамках диаграммной техники Константина-Переля в низшем порядке по концентрации электронов и пренебрежении влиянием электрического поля на процесс соударений.

Рассмотрим вероятность перехода для рассеяния электронов на фононах. На рис. 1 показан типичный расчет теории возмущений.

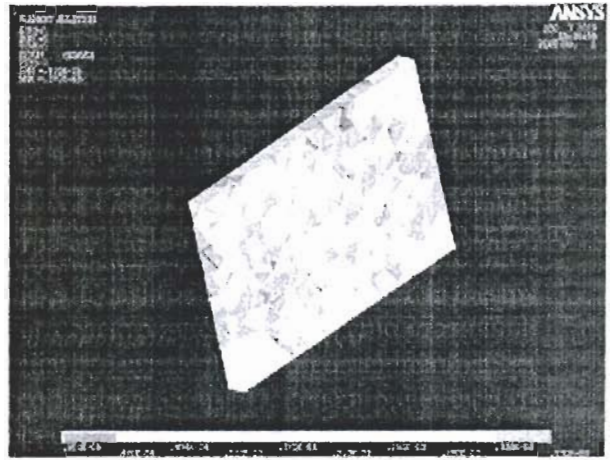


Рис. 1. Расчет электрического поля.

Рис. 1 описывает взаимодействие электронов с фононами в гармоническом приближении. Для гамильтониана электрон-фононного взаимодействия в низшем порядке по деформации кристалла

$$H_{eph} = \sum_{q,t,p} c_{q,t,p} (b_{q,t} + b_{-q,t}^+) a_p^+ a_{p-q}^+, \quad (3)$$

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 в гамильтониане взаимодействия. Эти поправки включают фонон-фононный гамильтониан и ангармонические поправки к гамильтониану электрон-фононного взаимодействия. Первыми поправками будем пренебрегать, предполагая малость фонон-фононного взаимодействия. Во втором порядке по деформации кристалла гамильтониан взаимодействия электронов с фононами имеет вид [3]

$$H_{e-ph} = \sum_{q,q',t,t',p,p'} c_{q,t,q',t'} (b_{q,t} + b_{-q,t}^+) \times (b_{q',t'} + b_{-q',t'}^+) a_p^+ a_{p'} \delta_{p,p'+q+q'}.$$

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

$$c_{q,t,q',t'} = c_{q',t',q,t}^* = c_{-q,t,-q',t'}^*. \quad (4)$$

Гамильтониан ангармонического взаимодействия электронов с акустическими фононами при $q \rightarrow 0$ состоит из нелинейного де-

формационного 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. Рассмотрим нелинейный пьезопотенциал. Поле в пьезоэлектрике с точностью до членов третьего порядка удовлетворяет нелинейному уравнению Пуассона

$$C_i [k_{ij} E_j + k_{ijk} E_j E_k] = 4C_i (b_{ijk} u_{jk} + f_{ijkl} u_{jk} E_l + b_{ijklm} u_{jk} u_{lm}).$$

Здесь k_{ij} – тензор диэлектрических проницаемостей, k_{ijk} – нелинейная поляризуемость, β_{ijk} – пьезотензор, f_{ijkl} – коэффициенты электроотрицности, β_{ijklm} – нелинейный пьезотензор. Решая это уравнение, находим

$$c_{q_i, q'_i} = \frac{2\pi i e (q_i + q'_i)}{\rho \Omega \sqrt{\omega_{q_i} \omega_{q'_i}}} \left((q + q') k (q + q') \right) \times \\ \times \left\{ q_j e'_k(q) q' e'_m(q') \beta_{ijklm} + k_{ijk} \frac{(4\pi)^2}{(qkq)(q'kq')} \times \right. \\ \times q_j q'_k q_l q'_m q'_r \beta_{imnr} \beta_{prst} e'_n(q) e'_s(q') + 2\pi f_{ijkl} \times \\ \times \left[\frac{q'_r q'_m \beta_{rnm}}{(q'kq')} q'_i q_j e'_k(q) e'_n(q') + \frac{q_r q_m \beta_{rnm}}{(qkq)} \times \right. \\ \left. \left. \times q_l q'_j e'_n(q) e'_k(q') \right] \right\}. \quad (5)$$

РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С УЧЕТОМ ПОПРАВКИ

Схема решения кинетического уравнения Больцмана состоит в следующем:

- интеграл столкновений разбивается на четную и нечетную части;
- четная часть интеграла столкновений считается изотропной, и зависит только от угла между начальным и конечным импульсами;
- делается приближение иерархии времени релаксации, в предположении, что время энергетической релаксации τ_e гораздо больше времени релаксации по импульсу τ_p ;
- получены связанные между собой уравнения для изотропной и нечетной по импульсу электрона частей функции распределения;
- полученные расчеты подставлялись в кинетическое уравнение с учетом анизотропного рассеяния и сделан расчет тока (рис. 2).

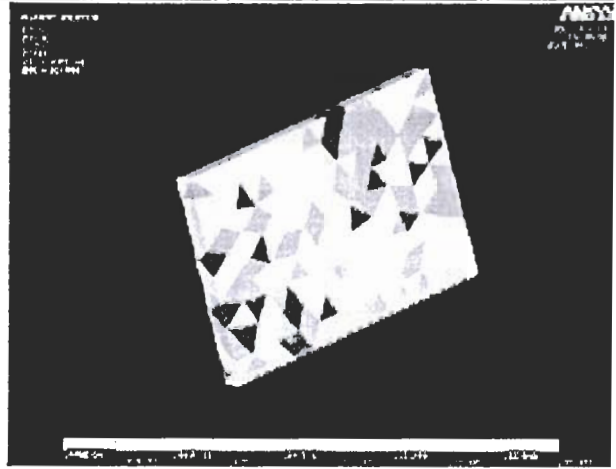


Рис. 2. Расчет тока при помощи кинетического уравнения.

Времена релаксации на фононах τ^{ph} и примесях τ' имеют вид [3]

$$\begin{cases} \tau_p(\varepsilon) = \tau_p^{ph}(T) \frac{X^{3/2}}{X^2 + Z}; \\ \tau_p^{(2)}(\varepsilon) = \tau_p^{ph}(T) \frac{3X^{3/3}}{3X^2 + Z}, \end{cases} \quad (6)$$

где $X = \frac{\varepsilon}{T}$; $\tau_p^{ph}(T) = \frac{\pi \rho s^2}{\sqrt{2} m^{3/2} \Lambda^2 T^{3/2}}$; s – скорость звука $Z = \frac{\tau_p^{ph}(T)}{\tau_p'(T)}$.

Безразмерный вектор

$$\xi_i = e E_i \sqrt{\frac{3\tau_p^{ph}(T)\tau_c(T)}{2T}}$$

по порядку величины равен изменению энергии электрона в электрическом поле на длине остывания, отнесенному к температуре T . Четный по электрическому полю вклад в ток выражается через функции [4]

$$F(X) = N \exp \left(- \int_0^X \frac{dX}{1 + \xi^2 \theta(X)} \right); \quad (7)$$

$$\Phi(X) = F(X) \left\{ N_1 + \alpha' \int_0^X \frac{dX \theta(X)}{[1 + \xi^2 \theta(X)]^2} \times \right. \\ \times \left[(\gamma \xi) (\xi^2 \theta(X) - 1) + 2\xi_i \xi_j \xi_k \frac{X \theta(X)}{3X^2 + Z} \times \right. \\ \left. \left. \times (\lambda'_{ijk} Z + \lambda_{ijk}^{ph} X) \times \left(\frac{X(1 + \xi^2 \theta(X))}{1 + \xi^2 \theta(X)} + \frac{X^2 - 3Z}{2(X^2 + Z)} \right) \right] \right\}. \quad (8)$$

$$\gamma_i = \frac{\sqrt{3}emT \ln \frac{\bar{\varepsilon}}{ms^2}}{12 \times 45 \times 7 \rho ks^2} \beta_{rlml'm'} P[irmlm'] \delta_{ir} \delta_{lm} \delta_{l'm'},$$

$$\lambda_{ijk}^{(ph)} = \frac{18\sqrt{3} \times 10^{-4} emT}{\rho ks^2} \beta_{rlml'm'} \{ P[jk] P[l'm'j] P[ilm] \times \\ \times [5.8(\delta_{ir} \delta_{ik} \delta_{ni'} \delta_{ml'} + \delta_{rl'} \delta_{ml'k} \delta_i \delta_{im} + 3.2(\delta_{ir} \delta_{lm} \delta_{l'k} \delta_{mj} + \\ + \delta_{rl'} \delta_{jm'} \delta_{im} \delta_{ik}) - 2.6(\delta_{ir} \delta_{l'k} \delta_{lm} \delta_{mj} + \delta_{rl'} \delta_{ik} \delta_{lm} \delta_{mj} + \\ + 0.73\delta_{rk} \delta_{il} \delta_{im} \delta_{mj} - 4.3\delta_{rk} \delta_{il} \delta_{lm} \delta_{mj})] - P[ilm] P[l'm'jk] \times \\ \times [1.4\delta_{il} \delta_{mr} \delta_{l'm'} \delta_{jk} + 1.7\delta_{ir} \delta_{l'm'} \delta_{jk} - 0.6\delta_{rl'} \delta_{im'} \delta_{jk} - \\ - 2.9\delta_{il} \delta_{ml'} \delta_{rm} \delta_{jk}] \};$$

$$\lambda_{ijk}^{(i)} = \frac{16\sqrt{3} \times 10^{-2} Tem^2}{k \ln \eta} \tilde{Q}_{imn} \{ P[li] P[kj] \times \\ \times [1.5\delta_{nm} \delta_{li} \delta_{kj} + 0.06(\delta_{nm} \delta_{lk} \delta_{ij} + 2\delta_{nk} \delta_{ml} \delta_{ij}) - \\ - 1.2\delta_{nl} \delta_{mi} \delta_{kj} - 0.36(2\delta_{nl} \delta_{mk} \delta_{ij} + \delta_{nk} \delta_{mj} \delta_{li})] \}.$$

$$\text{Функция } \theta(X) = \frac{X}{X^2 + Z}; \quad Z = \frac{\tau_p^{ph}(T)}{\tau_p^i(T)}.$$

Константы N и N_1 определены условиями нормировки

$$\nu T^{3/2} \int_0^\infty dX \sqrt{X} F(X) = 1; \quad \int_0^\infty dX \sqrt{X} \Phi(X) = 0. \quad (9)$$

Буквой $P[i...k]$ обозначен оператор суммирования по всем перестановкам. Примесный безразмерный $\tau \lambda_{ijk}^{(i)}$ определяется эффективным октупольным моментом примеси \tilde{Q}_{ijk} .

Величина четвертого вклада

$$\bar{j}_i = \nu T^{2/\sqrt{3}} n_0 es \int_0^\infty dX X^2 \{ -\theta(X) \Phi'(X) \xi + \\ + \alpha' \gamma_i (F' + F) \theta(X) + 2\alpha' \xi_j \xi_k \frac{X^{3/2} \theta(X)}{3X^2 + Z} \times \\ \times (\sqrt{X} \theta(X) F')' [\lambda_{ijk}^{(i)} Z + \lambda_{ijk}^{(ph)} X] \}. \quad (10)$$

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

$$\bar{j}_i = \frac{4\alpha' n_0 es}{\sqrt{3}\pi} \left[2(1 - \ln 2)(\xi_j) \xi_i + \gamma_i \xi_i^2 + \left(\lambda_{ijk}^{(ph)} + \frac{1}{3} \lambda_{ijk}^{(i)} Z \ln \frac{1}{Z} \right) \xi_j \xi_k \right]. \quad (11)$$

Векторная величина γ_i существует только в кристаллах с особенной полярной осью – в частности, во всех пирозлектриках 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 только равные компоненты $\lambda_{123} = \lambda_{132} = \lambda_{213} = \lambda_{231} = \lambda_{312} = \lambda_{321}$. В таких кристаллах четная часть тока обращается в ноль, если поле направлено по одной из кристаллографических осей [5].

Заметим, что в слабых полях четная по полю часть тока начинается с квадратичных по ξ_i (то есть по полю) поправок. В пределе сильных полей $j \sim \xi^{1/2}$. Оценки показывают, что 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 ФГЭ, который выражается через амплитуду переменного поля теми же формулами с коэффициентом 1/2. Интересно, что квадратичная поправка к току, вообще говоря, не связана с разогревом электронов. Действительно, она оказывается конечной в случае отсутствия фононного рассеяния в отличие от кубического члена в токе, определяемого релаксацией энергии электронов. Более того, в пирозлектрике электрическое поле может привести к остыванию электронного газа. Из уравнения для средней энергии электронов получим

$$\langle e \rangle = (3/2)T(1 - \alpha' \gamma_i \xi_i + \xi_i^2). \quad (12)$$

Из уравнения (12) видно, что при малом x и $\gamma_i \xi_i > 0$ изменение энергии электрона в электрическом поле отрицательно [5]. При увеличении поля изменение энергии становится положительным из-за обычного разогрева электронов. Физическая причина остывания заключается в ФГЭ. Приложение электрического поля приводит к сдвигу аргумента функции распределения по импульсам на ве-

личину пропорциональную электрическому полю. Из-за различия вероятностей рассеяния из состояний p и $-p$ этот сдвиг неодинаков для разных групп электронов. В результате поверхности $f_p = \text{const}$ деформируются, сжимаясь или расширяясь в зависимости от направления поля, что приводит к изменению средней энергии электронов.

ВЫВОДЫ

В работе сделан вывод изменения температуры электронов, нечетной по приложенному полю. Это дает пример линейного скалярного отклика на векторную обобщенную силу. Четные отклики высших порядков приводят к возможности стационарного тока при воздействии двух световых волн с частотами ω и 3ω .

ЛИТЕРАТУРА

1. Glass A.M., Linde D., Auston D.H., Negran T.J. 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 10.6 m and 1.06 m //Proceeding Intern. Conf. on Phys. Semiconductors (Stuttgart). – 1974. – P. 1257-1261.

3. Баскин Э.М., Магарилл Л.И., 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//Сб. ст. к 100-летию со дня рождения А.Ф. Йоффе. – 1980. – С. 275-293.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1989. – 340 с.

LITERATURA

1. Glass A.M., Linde D., Auston D.H., Negran T.J. 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 10.6 m and 1.06 m //Proceeding Intern. Conf. on Phys. Semiconductors (Stuttgart). – 1974. – P. 1257-1261.
3. Baskin E.M., Magarill L.I., Entin M.V. Fotogalvanicheskij effekt v kristallah bez centra inversii//FTT.- 1978. - T. 20, № 8. – S. 2432-2436.
4. Ivchenko E.L., Pikus G.E. Fotogalvanicheskie efekty v poluprovodnikah. Problemy sovremennoj fiziki//Sb. st. k 100-letiyu so dnya rozhdeniya A.F. Joffe. – 1980. – S. 275-293.
5. Landau L.D., Lifshic E.M. Kvantovaya mehanika. Nerelyativistskaya teoriya. – М.: Nauka, 1989. – 340 с.