

半导体输运的平衡方程理论

雷啸霖

(中国科学院上海冶金所, 上海 200050)

[关键词] 半导体输运, 平衡方程, 热载流子

随着半导体器件尺寸变小, 大量的载流子聚集在微小的空间区域, 它们受到的电场也迅速增强。在这种情况下, 半导体材料中的传导电流与电场的关系不再服从人们熟悉的线性欧姆定律, 而是呈现复杂的非线性行为。由于同时往往伴随电子温度的升高(超过环境温度), 强电场下的输运常称为热电子输运。

半导体中热载流子输运的研究已有几十年的历史, 主要的理论方法是基于非平衡分布函数概念的玻耳兹曼方程方法。虽然分布函数原则上包含输运的全部信息, 但它的求解是十分困难的, 需用计算量很大的纯数值的, 例如蒙特-卡罗方法。这对分析实验和器件设计不利。

在实际情况下, 为了计算最有用的一些输运物理量, 并不一定要先得到包含完全信息的分布函数, 只要获得一部分信息就可以了。但另一方面, 却往往要求能够仔细地考虑实际系统的各种散射和多载流子间的相互作用。半导体输运的平衡方程理论抓住漂移速度是决定非线性输运最主要的物理量这一特征, 以平均漂移速度而不是以电场作为基本参量, 使热电子输运的描述可以借助于将整体运动的分离而大为简化。

人们用物体的位置、速度、动能等描述它的机械运动。这些物理量总是相对于某个参考系而言的。容器内气体分子的速度满足麦克斯韦分布。这一表述是在容器为静止的参考系中才成立。如果把容器放到一个运动的列车中, 从地面的观察者来看, 其中的气体分子显然不满足通常形式的麦克斯韦速度分布率。与此类似, 我们通常说大量粒子组成的体系平衡时遵从统计力学规律, 是在没有整体运动的参考系中观察的。一个由大量粒子构成的体系如果有整体运动, 比较好的办法是将整体运动先分离出去, 也就是在相对于整体运动是静止的参考系中来看组成体系的各个粒子的运动——我们称之为相对运动。

考虑由 N 个电子组成的系统。为了描述这个系统, 通常我们是列举每一个电子的坐标 \mathbf{r}_i 和动量 $\mathbf{p}_i (i=1, \dots, N)$, 总共 $6N$ 个变数。为了便于把整体运动与相对运动分开, 我们引入体系质心的坐标 \mathbf{R} 和动量 \mathbf{P} :

$$\mathbf{R} = \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{r}_i, \quad \mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i$$

以及每一个电子相对于质心的坐标 \mathbf{r}'_i 和动量 \mathbf{p}'_i :

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}, \quad \mathbf{p}'_i = \mathbf{p}_i - \mathbf{P}/N$$

当有一个电场加到这个体系上的时候, 电场的作用只是产生一个势能

本文于 1996 年 4 月 22 日收到。

$$-e\mathbf{E} \cdot \sum_i \mathbf{r}_i = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{R}$$

(e 代表单个电子的电荷)。这就是说,电场只作用于质心,相对电子完全不感受到电场。在这个意义上我们的系统有点像是行进着的列车:质心相当于列车的整体,它在电场的拉力和摩擦阻力作用下运动;相对电子好像是车内的乘客,他们通过观察地面上物体的后移可以感觉到列车的运动,但不知道有多大的拉力作用于列车上。

由此可见,在电场作用下,相互耦合的大量载流子组成的体系的运动尽管十分复杂,但基本上可以分成两种性质不同的运动,即由质心代表的整体的漂移运动和由相对电子代表的多粒子的无规的统计运动。前者服从单粒子的经典力学规律,后者几乎服从平衡态的统计力学规律。半导体输运的平衡方程理论就是在这样的思想指导下发展起来的,先后进行了下面一系列研究工作:

(1) 提出了分离质心的力学运动与相对电子的统计运动,选择最捷径初态等一系列物理思想,发展了非线性电子输运的平衡方程,包括动量和能量平衡方程。这些方程被首先用于研究三维半导体系统的输运。

(2) 将平衡方程推广到二维系统。借助这一工具,首次系统计算了 GaAs 异质结及超晶格中强电场下定态、瞬态及高频热电子输运性质,研究了低维系统中的噪声和非平衡声子效应。

(3) 导出和建立了电场和磁场同时存在情况下的热载流子输运方程,并用它研究了三维及二维系统的高场磁阻;首次研究了霍尔平台中的热效应。

(4) 推导和建立了空间非均匀系统的输运平衡方程,用其计算了低维系统的热电势。

(5) 论述了载流子的关联和弛豫在输运中的重要作用,指出载流子强和弱二个耦合极限下电阻率表达式是不同的,通常的玻耳兹曼电阻率代表弱耦合极限,而平衡方程理论给出的电阻率代表强耦合极限。

(6) 用平衡方程方法研究了无序引起的弱局域化,发现并研究了电场对局域化电阻率的影响。

(7) 提出了超晶格子带输运的解析理论,首次得到与实验结果相符的漂移速度随电场及峰值速度和临界电场随带宽和温度变化的理论曲线。

BALANCE-EQUATION THEORY FOR ELECTRONIC TRANSPORT IN SEMICONDUCTORS

Lei Xiaolin

(Shanghai Institute of Metallurgy, CAS, Shanghai 200050)

Key words electronic transportation semiconductors, balance equations, hot carriers