

Ge 中热空穴输运的格林函数方法

唐 刚

徐 婉 梦

(中国矿业大学数力系,江苏,徐州) (北京师范大学物理系)

1989年1月9日收到

1985年X. L. Lei (雷啸林)和C. S. Ting (丁秦生)提出了热电子输运的格林函数方法,本文则是把他们的方法推广应用到非球形的扭曲等能面的情况,计算了半导体Ge中的热空穴在晶格温度 $T = 77K, 190K$ 和 $300K$ 时,场强在 $20V \cdot cm^{-1} \leq E \leq 10^4 \cdot V \cdot cm^{-1}$,电场方向分别沿 $\langle 100 \rangle$ 方向和 $\langle 111 \rangle$ 方向的空穴漂移速度和热电子温度,得到了与实验比较相符的结果,并对重空穴能带的非二次性效应对漂移速度的影响也进行了初步的计算和讨论.

主题词 热电子及热空穴,热电子温度,漂移速度,分布函数,格林函数,统计算符,玻耳兹曼方程, Liouville-Von Neumann 方程

一、引言

在半导体的热电子(这里亦包含价带中的空穴)输运理论中,玻耳兹曼输运方程方法是一种经常被采用的方法,事实上,也似乎是早先唯一能够进行实际有效计算的方法,但玻耳兹曼方程本身是一非线性的积分微分方程,当系统远离平衡状态时,严格地求解玻耳兹曼方程将是十分困难的,人们不得不采用各种近似模型或者用数值计算的方法求解.

X. L. Lei 和 C. S. Ting 提出的格林函数方法^[1,2]是从把非线性输运条件下的电子系统的运动分解成为质心的漂移运动和相对于质心的无规热运动出发,由 Liouville-Von Neumann 方程求得相对运动电子系统及声子系统的统计算符(密度矩阵),最后利用格林函数理论得到在输运过程中,系统所满足的所谓力和能量的平衡方程(因此有时也称之为平衡方程方法),通过求解方程组得到热电子的有关输运特性.与传统的玻耳兹曼理论不同的是,在这里的格林函数方法中是用系统的统计算符代替了原来的分布函数,用导出的平衡方程组取代了原来的输运方程,使得热电子的输运理论建立在更加坚实的量子力学基础之上,因此,应该具有更大的适用范围,并且具有物理概念清晰,数学结构简单,计算量小的特点,使得热电子输运的理论计算更直接简便,并能原则上把玻耳兹曼方程方法中很难处理的电子-电子散射,很容易地考虑进去.

许多作者从 Lei 和 Ting 提出的方法出发,讨论真实半导体的输运特性,得到一系列有意义的结果^[3-6],本文则是把这一格林函数方法推广应用到具有非球型等能面模型情况,研究了 Ge 中热空穴漂移速度 v_s 和热空穴温度 T_s 对场强的依赖关系,并对重空穴能带非二次性效应对漂移速度的影响也进行了初步的计算和讨论,得到了与实验比较相符的结果.

二、理论框架

I. 单带的重空穴模型

半导体 Ge 的价带顶部附近有三个能带, 其中两个最高的在 $k = 0$ 处简并, 它们分别对应着重空穴和轻空穴能带, 第三个能带则因自旋-轨道相互作用而分裂开来, 它与价带顶部的距离用 Δ 表示, 见图 1, 由于 Δ 具有相当的数值, 所以该带的影响通常可以不考

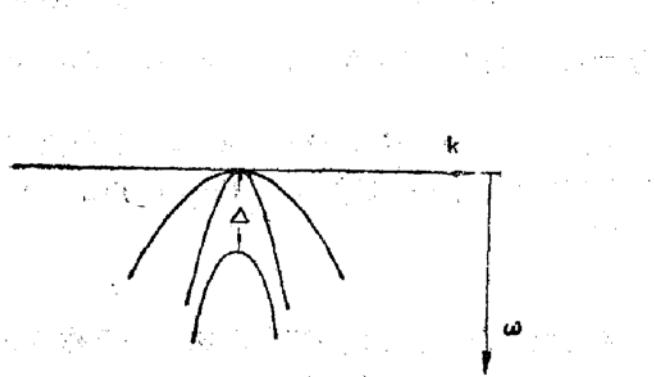


图 1 Ge 的价带结构 k 表示空穴波矢量, ω 为

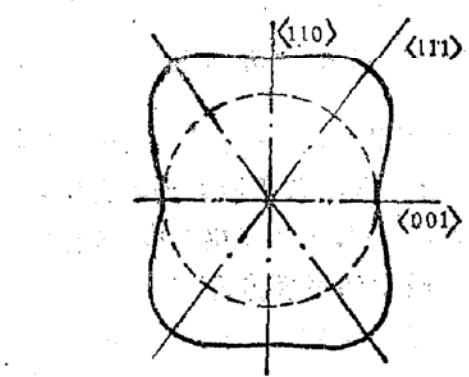


图 2 Ge 重空穴能带在(110)面上的等值线。内部的虚线圆表示球形等能面情况

虑。对于重空穴和轻空穴带, 因为绝大部分的空穴都分布在重空穴带中, 对输运过程起主要作用, 而轻空穴只对欧姆区域产生影响^[7,8], 因此, 作为一种近似, 可以只考虑重空穴的贡献, 并且取重空穴的波矢能量关系为^[9]:

$$\epsilon_k = (1 - \beta)ak^2 \{1 - [b^2 + c^2(\sin^4\theta \cdot \cos^2\varphi \cdot \sin^2\varphi + \sin^2\theta \cdot \cos^2\theta)]^{1/2}\} \quad (1)$$

其中: $a = \frac{|A|}{2m_0}$, $b = \frac{|B|}{|A|}$, $c = \frac{|C|}{|A|}$, 取 ($h \approx 1$) m_0 为自由电子质量; A, B, C 为有关的带参数(其值见表 1); θ, φ 表示 k 相对于晶轴方向的方位角, β 为一可调参数, 通过它的改变可以得到不同的有效质量值, 从而把重空穴能带的非二次效应考虑进去^[8]。图 2 给出了(1)式所给出的重空穴能带在(110)平面上的 γ 值线^[10]。

II. 散射机制

这里我们考虑高纯度的半导体 Ge (杂质浓度 $< 10^{10} \text{ cm}^{-3}$), 在晶格温度不是太低的情况下, 对于单带的重空穴模型, 主要的散射机制应当是声学声子和非极性光学声子引起的带内散射, 但为了理论推导的完整性, 在下面的推导过程中, 也包括了由电离杂质所引起的散射。

如果不考虑外电场对散射过程的影响, 并且仅仅考虑双粒子间的散射, 则各散射机制的散射矩阵元为^[11,14]:

声学声子(声学形变势):

$$M(q, \lambda)_{AC} = \frac{E_1^{02} \cdot q}{2V\rho S} \quad (2)$$

非极性光学声子:

$$M(q, \lambda)_{OP} = \frac{(D_t K)^2}{2V\rho\theta_{OP}} \quad (3)$$

电离杂质:

$$u(q)_i = \frac{Z^e \cdot e^4}{V \cdot \epsilon_0^2 \epsilon_r^2 (q^2 + \lambda^{-2})} \quad (4)$$

这里 V, ρ, ϵ_r 分别是晶体体积, 密度和相对介电常数; s 为声子速度, 对于非球形等能面取 $s = \frac{1}{3}s_e + \frac{2}{3}s_s$ 平均值, s_e, s_s 分别表示纵波声子和横波声子的速度; θ_{OP} 为光学声子的能量, 这里假定其与 q -声子波矢量无关; E_i^0 和 $D_t K$ 分别为晶体声学和光学形变势常数; 在电离杂质散射矩阵元中, Z 为电离杂质上的电荷数, $\lambda = (e^2 \cdot n / T \epsilon_0 \epsilon_r)^{-1/2}$ (n 为载流子浓度, T 为晶格温度) 为德拜屏蔽常数。

III. 哈密顿和平衡方程

价带中的重空穴可以被看作为 N 个带正电的粒子系统, 粒子间存在着库仑相互作用, 空穴与声子相互耦合, 并被 n_i 个随机分布的杂质离子散射, 使用单带的有效质量模型, 则在均匀外电场 \mathbf{E} 的作用下的系统哈密顿可表示为:

$$\begin{aligned} H = & \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i,a} \mu(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_a) \\ & - \sum_{i,i} \mathbf{u}_i \cdot \nabla v_i(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i) + \sum_b \frac{P_b^2}{2M_b} \\ & + \sum_{i,a} V(\mathbf{R}_b - \mathbf{R}_a) - e \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i = -i\nabla_i$ 表示第 i 个空穴的坐标和动量; e, m 分别表示其电量值和有效质量; $P_b^2/2M_b$ 和 $V(\mathbf{R}_b - \mathbf{R}_a)$ 表示格点的振动动能和势能, 其对应着声子系统的哈密顿; $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 表示处在第 i 个正常格点 \mathbf{R}_i 处离子产生的势, \mathbf{u}_i 表示 \mathbf{R}_i 处杂质原子产生的势, 它是随机分布的, 式(5)右边第二项则表示粒子间的相互作用势。

根据 Lei 和 Ting 提出的理论推导方法^[1,2]: 通过引入载流子系统的质心坐标和动量, 以及相对运动的坐标和动量, 把载流子系统的运动分解成为系统的质心运动和相对质心的无规热运动, 在二次量子化的表象中把系统的哈密顿表示出来, 考虑相对运动载流子-声子系统对杂质散射和声子散射的线性响应, 得到系统统计符的表示式以及系统力学量的统计平均值的格林函数表示式, 计算系统质心运动总动量以及相对载流子系统的能量随时间变化的统计平均值, 根据在稳定输运过程中二者均为零的条件, 并利用有关的格林函数技术就可以得到形式上与文献[2]中完全相同的力及能量平衡方程:

$$N \cdot e \cdot \mathbf{E} + F(v_d) = 0 \quad (6)$$

和

$$N \cdot e \cdot v_d \cdot \mathbf{E} = W(v_d) \quad (7)$$

其中:

$$\begin{aligned}
 F(v_s) = & n_i \sum_q |u(q)|^2 \cdot q_E \hat{\pi}_2(q, \omega_0) \\
 & + 2 \sum_{q \neq 1} |M(q, \lambda)|^2 q_1 \hat{\pi}_2(q, \omega_0 + Qq\lambda) \\
 & \cdot [n(Qq\lambda/T) - n((\omega_0 + Qq\lambda)/2T)] \quad (8)
 \end{aligned}$$

表示系统质心运动因杂质和声子散射而受到的摩擦阻力:

$$\begin{aligned}
 W(v_s) = & 2 \sum_{q \neq 1} |M(q, \lambda)|^2 \hat{\pi}_2(q, \omega_0 + Qq\lambda) \\
 & \cdot [n(Qq\lambda/T) - n((\omega_0 + Qq\lambda)/\alpha T)] \quad (9)
 \end{aligned}$$

表示声子系统的耗散功率; v_s 表示载流子也即质心运动的漂移速度, q_E 为声子系统波矢量 q 在电场方向的投影, 并且:

$$\begin{aligned}
 \omega_0 &= q_E \cdot v_s \quad (10) \\
 \hat{\pi}_2(q, \omega) &= I_m \hat{\pi}(q, \omega)
 \end{aligned}$$

$$= \frac{\pi_2(q, \omega)}{[1 - v_c(q)\pi_1(q, \omega)]^2 + [\nu_c(q)\pi_2(q, \omega)]^2} \quad (11)$$

$$\pi_1(q, \omega) = 2 \sum_k f(\varepsilon_k, T_e) \left[\frac{1}{\omega - \varepsilon_{k+\sigma} + \varepsilon_k} - \frac{1}{\omega + \varepsilon_{k+\sigma} - \varepsilon_k} \right] \quad (12)$$

$$\pi_2(q, \omega) = 2\pi \sum_k [f(\varepsilon_k, T_e) - f(\varepsilon_{k+\sigma}, T_e)] \cdot \delta(\omega + \varepsilon_{k+\sigma} - \varepsilon_k) \quad (13)$$

$n(x/T)$ 和 $f(\varepsilon_k, T_e)$ 分别为玻色和费米函数,

$$n(x/T) = \frac{1}{e^{x/T} - 1} \quad (14)$$

$$f(\varepsilon_k, T_e) = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_k - \varepsilon_f)/T_e] + 1} \quad (15)$$

$\nu_c(q)$ 为库仑势在动量空间的表示式, T_e 为热载流子温度, $\alpha = T_e/T$, 在这里 $M = \sum m_i$ 表示系统质心的质量, ε_k 则取(1)式。

如果把(2—4)式所表示的散射矩阵元代入到(8)式和(9)式中去, 并且给定晶格温度 T , 电场强度 E 以及相应的费米能约 ε_f 的值, 原则上, 就可以通过式(6)及(7)所表示的平衡方程组得到载流子的漂移速度 v_s 和热载流子温度 T_e .

考虑到载流子的浓度不是很高, 我们略去了载流子之间的相互作用, 则 $\hat{\pi}_2(q, \omega)$ 可以由 $\pi_2(q, \omega)$ 代替, 并且考虑非简并情况, 取 $f(\varepsilon_k, T_e) = \exp[(\varepsilon_f - \varepsilon_k)/T_e]$. 对于声学声子和光学声子分别取以下的色散关系:

声学声子 $Q_{a1} = Sq$ (德拜模型)

光学声子: $Q_{a1} = Q_0, Q_0 = O_{OP}$ (光学声子能量).

在散射过程中, 载流子的动量满足关系式 $k' = k + q$, 其中 k 和 k' 分别表示散射

前后的波矢量, 可忽略 $|\mathbf{k}'|$ 和 $|\mathbf{k}|$ 之间的差异, 取

$$q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| = \sqrt{2k(1 - \cos\theta')^{1/2}} = 2k \sin^2 \frac{\theta'}{2} \quad (16)$$

并由 $q_E = k'_E - k_E (k'_E, k_E$ 分别表示 \mathbf{k}' 和 \mathbf{k} 在 E 方向上的分量) 得到:

$$q_E = -2k \sin \frac{\theta'}{2} \left(\cos \theta \cdot \sin \frac{\theta'}{2} + \cos \frac{\theta'}{2} \cdot \cos \varphi' \cdot \sin \theta \right) \quad (17)$$

其中: θ, φ 表示 \mathbf{k} 的方位角, 而 θ', φ' 则表示 \mathbf{k}' 在以 \mathbf{k} 为 z' 轴的一给定坐标系中的方位角, θ' 也即为散射角。最后再对式(16)和(17)中的 q 及 q_E 取散射角机率分布的平均值, 得到:

$$q = \bar{q} = 2k \sin \frac{\theta'}{2} = \frac{136}{105} k \quad (18)$$

和

$$q_E = \bar{q}_E = -2k \cos \theta \cdot \sin^2 \frac{\theta'}{2} = -k \cos \theta \quad (19)$$

并且取“小扭曲近似”^[8]即取 $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = k^{12}/2m_h$, 其中 m_h 为重空穴球形等能面情况下的有效质量。

如果把 $F(\nu_d)$ 和 $\omega(\nu_d)$ 分别写成如下的表达式:

$$F(\nu_d) = F_{AC} + F_{OP} + F_i \quad (20)$$

$$\omega(\nu_d) = \omega_{AC} + \omega_{OP} \quad (21)$$

其中下标 AC, OP 和 i 分别表示声学声子, 光学声子和杂质离子散射的贡献, 并做如下变换:

$\sum_k \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}$ 及 $\sum_q \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q}$ 则有下面的结果:

$$F_{AC} = \frac{E_1^{12} \cdot m_h^{3/2}}{2^{5/2} \pi^4 \rho s} \int d\mathbf{k} \exp \left(\frac{\epsilon_f - \epsilon_k}{T_e} \right) \bar{q} \cdot \bar{q}_E \times \frac{[-\exp \left(\frac{\nu_d \cdot \bar{q}_E + s\bar{q}}{T_e} - \frac{s\bar{q}}{T} \right)]}{1 - \exp \left(-\frac{s\bar{q}}{T} \right)} \cdot (\epsilon_k - \nu_d \cdot \bar{q}_E - s\bar{q})^{1/2} \quad (22)$$

$$F_{OP} = \frac{(D_r k)^2 \cdot m_h^{3/2}}{2^{5/2} \pi^4 \rho \theta_{OP} \left[1 - \exp \left(-\frac{\Omega_0}{T} \right) \right]} \int d\mathbf{k} \exp \left(\frac{\epsilon_f - \epsilon_k}{T_e} \right) \cdot \bar{q}_R \times \left[1 - \exp \left(\frac{\nu_d \cdot \bar{q}_E + \Omega_0 - \frac{\Omega_0}{T}}{T_e} \right) \right] \cdot (\epsilon_k - \nu_d \cdot \bar{q}_E - \Omega_0)^{1/2} \quad (23)$$

$$F_i = \frac{n_i \cdot Z^2 e^4 \cdot m_h^{3/2}}{2^{5/2} \pi^4 \cdot \epsilon_0^2 \epsilon_r^2} \int d\mathbf{k} \exp \left(\frac{\epsilon_f - \epsilon_k}{T_e} \right) \cdot \frac{\bar{q}_E}{(\bar{q}^2 + \lambda^{-2})^2} \cdot (\epsilon_k - \nu_d \cdot \bar{q}_E)^{1/2} \quad (24)$$

$$W_{AC} = \frac{E_1^{02} \cdot m_h^{3/2}}{2^{5/2} \pi^4 \rho} \int dk \exp\left(\frac{\epsilon_f - \epsilon_b}{T_e}\right) \bar{q}^2 \cdot \frac{1 - \exp\left(\frac{V_d \cdot \bar{q}_E + s\bar{q}}{T_e} - \frac{s\bar{q}}{T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{s\bar{q}}{T}\right)} \times (\epsilon_b - v_d \cdot \bar{q}_E - s\bar{q})^{1/2} \quad (25)$$

和

$$W_{OP} = \frac{(D_t k)^2 Q_0 m_h^{3/2}}{2^{5/2} \pi^4 \rho \theta_{OP} \left[1 - \exp\left(-\frac{Q_0}{T}\right)\right]} \int dk \exp\left(\frac{\epsilon_f - \epsilon_b}{T_e}\right) \cdot \left[1 + \exp\left(\frac{v_d \cdot \bar{q}_E + Q_0}{T_e} - \frac{Q_0}{T}\right)\right] (\epsilon_b - v_d \cdot \bar{q}_E - s\bar{q})^{1/2} \quad (26)$$

把式(20—26)代入到平衡方程(6)式和(7)式中, 就可以通过解非线性的积分方程组得到热空穴的漂移速度 v_d 和温度 T_e .

应当指出, 当 $E/\langle 100 \rangle$ 方向时, 取 E 方向为 k 的坐标系之 z 轴方向, ϵ_b 有(1)式的表达式, 但如果 $E/\langle 111 \rangle$ 方向, 为简单起见, 仍取 E 为 k 之 z 轴方向, 则 ϵ_b 的表达式必须根据具体坐标系做相应的改变.

三、数值计算及与实验结果的比较

数值计算是对 Ge 中的重空穴进行的, 并且仅考虑了声子的散射, 有关 Ge 的各种参数, 列于表 1 中, 作为实际计算的第一步, 并没有考虑重空穴能带的非二次性效应, 即在(1)式中, 只取 $\beta = 0$, 计算了电场分别沿 $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ 晶轴方向, 晶格温度 $T = 77K$, $190K$ 和 $300K$ 时, Ge 空穴漂移速度 v_d 以及热空穴温度 T_e 随电场的变化关系, 场强的变化范围在 $20V \cdot cm^{-1} \leq E \leq 10^4 V \cdot cm^{-1}$, 为了便于比较, 我们把这里的计算结果和由 L. Reggiani^[8,13] 等用飞行时间测量技术测得的结果一并在图 3 和图 4 中给出.

表 1 Ge 的参数值^[14]

参 数	数 值	单 位
A	-13.38	-
B	8.48	-
C	13.14	-
△	0.295	eV
ρ	5.32	g · cm ⁻³
θ _{OP}	430	K
S _e	5.4 × 10 ¹¹	cm · s ⁻¹
S _t	3.2 × 10 ¹¹	cm · s ⁻¹
E ₁ ⁰²	4.6	eV
D _t K	9.0 × 10 ¹¹	eV · cm ⁻¹
ε _r	15.98	-

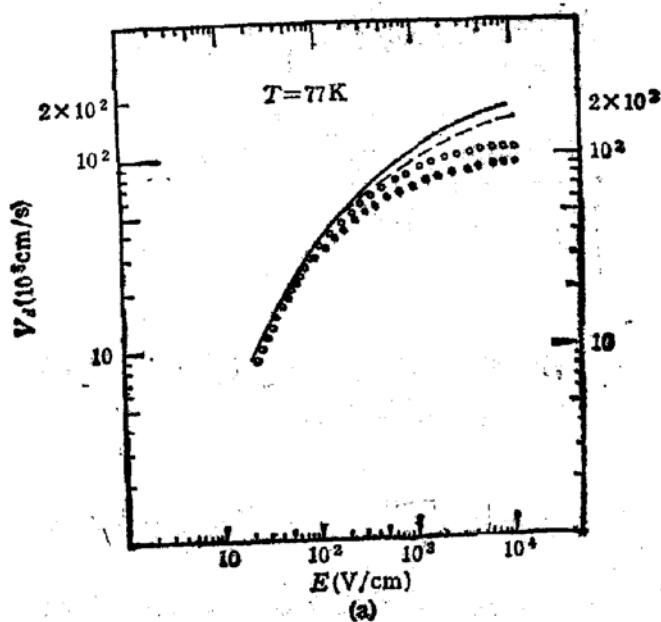


图 3(a) $T = 77\text{K}$ 时, Ge 空穴漂移速度 v_d 随场强 E 的变化关系

○, ● 分别表示 $E/\langle 100 \rangle$ 和 $E/\langle 111 \rangle$ 方向的实验值, 实线和虚线则分别表示其相应的理论计算值

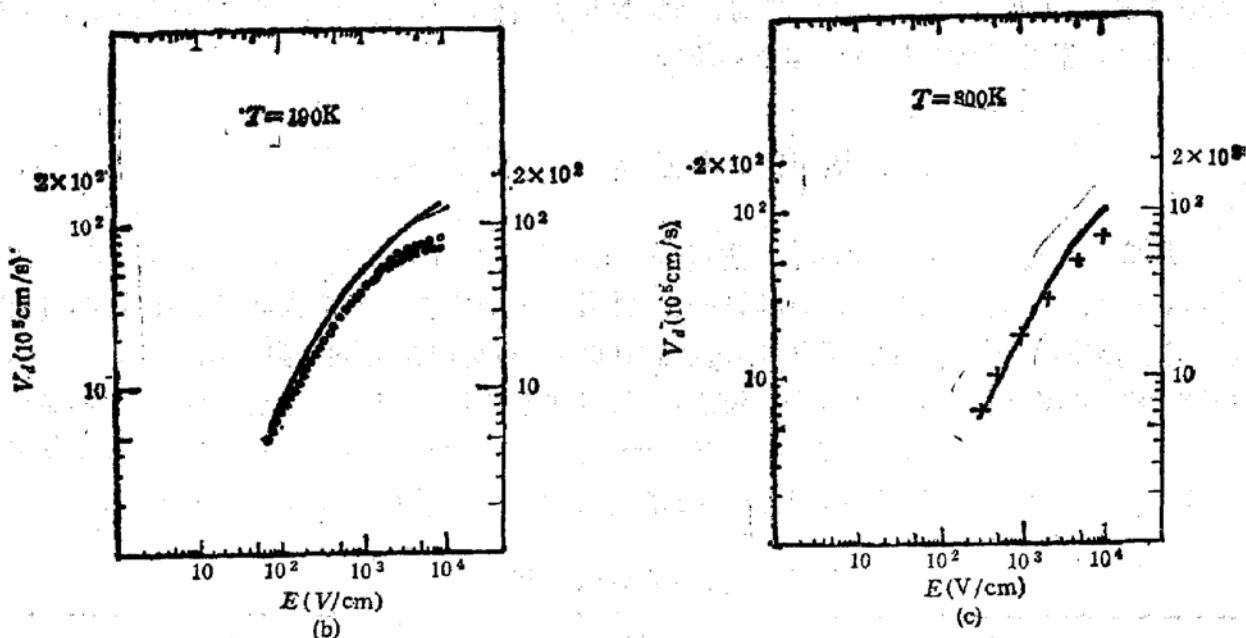
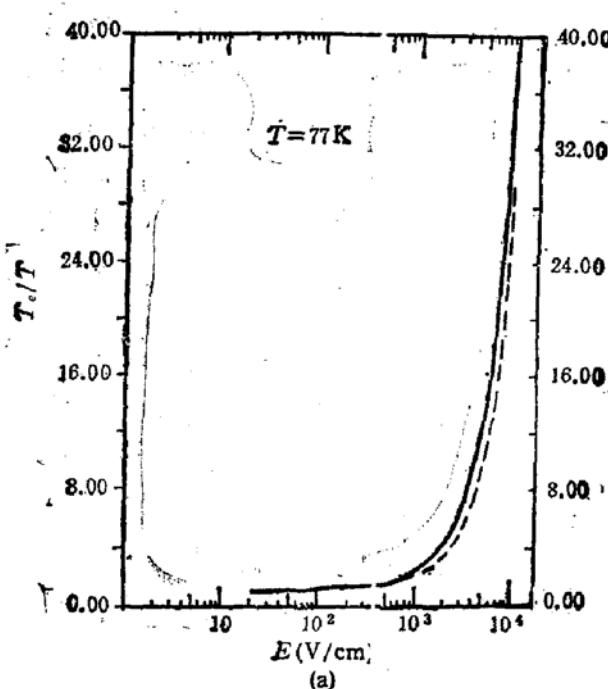


图 3(b) $T = 190\text{K}$ 时, Ge 空穴漂移速度 v_d 随场强 E 的变化关系 图中符号意义与图 3(a) 相同

图 3(c) $T = 300\text{K}$ 时, Ge 空穴漂移速度 v_d 随场强 E 的变化曲线 + 表示 $E/\langle 110 \rangle$ 方向实验值, 实线表示 $E/\langle 100 \rangle$ 方向的理论计算值

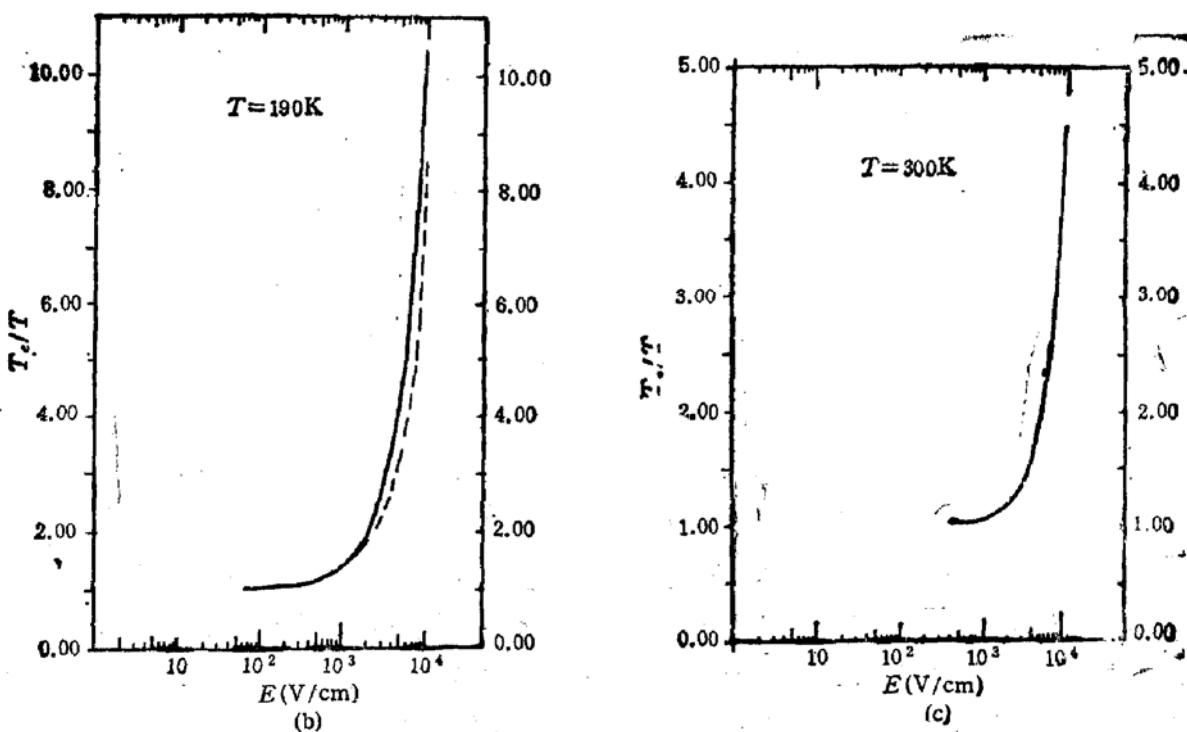
图 3 表示出了漂移速度的理论计算值和实验值, 从中可以发现, 当场强较弱时, v_d 随场强作线性变化, 计算结果与实验值比较相符, 当场强较强时, v_d 表现出明显的非线性, 计算结果与实验值也出了偏差。图 4 则表示了 T_c 的理论计算结图, 当 v_d 进入非线性区域后, T_c 也随电场急剧增大, 出现非线性的原因是原来的声子系统的耗散功率已不能即时地把电场提出给载流子系统的能量耗散掉, 只有通过提高载流子的平均能量, 来提高耗散功率, 从而使系统处于稳定状态, 此时系统已远离平衡状态。

在 P. Hu^[4] 的计算中, 因为只考虑了简单球形等能面情况, 所以没有得到 v_d 以及



(a)

图 4(a) $T = 77\text{K}$ 时 Ge 热空穴温度 T_e 随场强 E 变化的理论计算结果
实线和虚线分别表示 $E/\langle 100 \rangle$ 和 $E/\langle 111 \rangle$ 的结果



(b)

(c)

图 4(b) $T = 190\text{K}$ 时, Ge 热空穴温度 T_e 随场强 E 变化的理论计算结果 图注与图 4(a) 相同

图 4(c) $T = 300\text{K}$ 时, Ge 热空穴温度 T_e 随场强 E 的变化的理论计算结果. $E/\langle 100 \rangle$ 和 $E/\langle 111 \rangle$ 的结果相同

T_e 具有各向异性的结果来(在强场情况下,其理论计算值也略高于实验值), 在这里因考虑了等能面的扭曲效应, 所以得到了在 $T = 77\text{K}$ 和 190K 时, ν_d 以及 T_e 在非线性范围内具有各向异性的结果, 使理论计算更接近于实际情况, 同时也证实了 L. Reggiani^[8] 等提出的各向异性的结果来源于能带等能面的扭曲效应, 载流子沿不同方向具有不同的

有效质量。至于 $T = 300\text{K}$ 时, \mathbf{E} 沿 $\langle 100 \rangle$ 方向和 $\langle 111 \rangle$ 方向的计算结果相同, 原因是在本文所考虑的场强范围内, 对于该温度系统仍处在线性区域内, 各向异性仍未显露出来, 此外, 在文献中也没有发现 $T = 300\text{K}$ 时, $v_{d(100)}$ 和 $v_{d(111)}$ 的实验结果。

关于能带的非二次效应, 严格的计算有赖于在给定状态下, (1)式中的 β 能取正确的值, 即严格的 $\beta \sim (T, E)$ 关系, 但目前还没有找到这样的关系。在我们的计算中是假定载流子平均能量 $\langle \epsilon \rangle$ 与 T_c 有关系式: $\langle \epsilon \rangle = \frac{3}{2}k_B T_c$, 根据文献[13]中所给出的 β

与 $\langle \epsilon \rangle$ 之间的关系曲线, 找到 β 与 T_c 的近似关系曲线, 来计算能带非二次效应对漂移速度的影响, 图 5 给出了 $T = 77\text{K}$, $\mathbf{E} // \langle 100 \rangle$ 方向时的计算结果, 从计算结果与实验事实的比较可以发现非二次效应主要是对非线性部分有贡献, 使得强场时的计算结果有了更进一步的改善。原因是在场强较弱时, 载流子主要分布在布里渊区中心, $\beta = 0$, 而当场强增大时, 载流子取大 $|\mathbf{k}|$ 的机会增多, β 取值增大, 使得载流子有效质量增大, 结果导致漂移速度 v_d 计算值的降低。

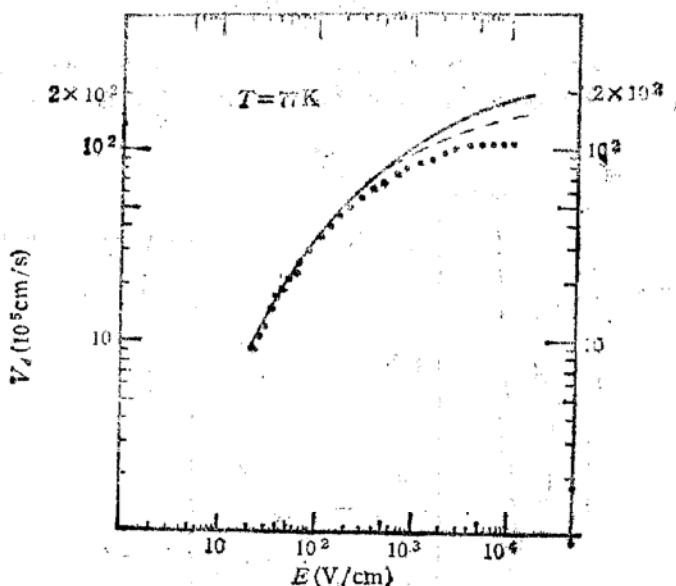


图 5 Ge 重空穴带非二次效应对漂移速度的影响, 黑点●●表示实验结果
实线和虚线分别表示 $\beta = 0$ 和 $\beta \neq 0$ 时的计算结果

对于计算结果与实验值在强场范围内出现差异的原因, 我们分析有以下几个: 一个是在解析推导过程中所采取的对散射机率分布求平均值近似, 因为近似的本质是认为相应于某一状态 K 只发生某一种散射角的散射, 在低场情况下, 声子散射较弱, 近似本身与实际情况比较相符, 但随着电场强度的增大, 声子散射也增强, 这样也许就不能以某一个散射角的散射代替了, 因此导致计算结果与实验值的偏差。第二个原因就是对费米能级的取值, 在计算中我们发现 ϵ_f 的取值对计算结果有很显著的影响, 考虑到 $|\epsilon_f|/T_c \gg 1$ 的事实, 我们取了以下近似^[2] $e^{-|\epsilon_f|/T_c} = \frac{n}{2} \left[\frac{2\pi}{mT_c} \right]^{3/2}$ 其中 m 为载流子的有效质量, $n = n(T)$ 为载流子密度, 这种近似能带来多大的误差, 还有待于进一步的研究。此外, 在前面我们已近似考虑了能带的非二次效应对计算结果的影响, 但这种近似能否把非二次效应

充分地考虑进去, 也还无法确定。

四、结 束 语

本文将 X. L. Lei 和 C. S. Ting 提出的热电子输运的格林函数方法推广应用到扭曲等能面模型情况, 计算了 Ge 空穴的漂移速度和热载流子温度值, 并对重空穴能带的非二次性效应进行了计算和讨论, 得到了与实验比较相符的结果, 这说明我们推广的方法是可行的, 关于理论计算值与实验值的偏差, 通过分析可以看出来, 主要来源于能带的近似模型, 理论推导和数值计算中所做的近似处理, 计算结果的进一步改善有赖于更完整的模型和更简单合理的近似。

参 考 文 献

- [1] X. L. Lei and C. S. Ting, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **18**, 77 (1985).
- [2] X. L. Lei and C. S. Ting, *Phys. Rev.*, **B32**, 1112 (1985).
- [3] X. L. Lei, Joseph L. Birman, and C. S. Ting, *J. Appl. Phys.*, **58**, 2270 (1985).
- [4] P. Hu and C. S. Ting, *Phys. Rev.*, **B34**, 7003 (1986).
- [5] D. Y. Xing and C. S. Ting, *Phys. Rev.*, **B**, **35**, 3971 (1986).
- [6] W. T. Xu and C. S. Ting, *Communication in Theoretical Physics*, **10**, 1 (1988).
- [7] S. Bosi, C. Jacoboni and L. Reggiani, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **12**, 1525 (1979).
- [8] L. Reggiani, C. Canali, F. Nava, and G. Ottaviani *Phys. Rev. B*, **16**, 2781 (1977).
- [9] G. Ottaviani, L. Reggiani, C. Canali, F. Nava, and A. Alberigi-Quaranta: *Phys. Rev.*, **B** **12**, 3318 (1975).
- [10] L. Reggiani; *J. Phys. Chem. Solids*, **37**, 293 (1976).
- [11] C. Jacoboni and L. Reggiani, *Advances in Phys.*, **28**, 493 (1970).
- [12] J. P. Naugier and M. Rolland, *Phys. Rev. B*, **8**, 5728 (1973).
- [13] G. Gagliani and L. Reggiani, *Nuovo Cimento B*, **30**, 207 (1975).
- [14] L. Reggiani, *Hot-Electron Transport in Semiconductors* (Springer-Verlag, Berlin, 1985).

Green's Function Approach to Hot Hole Transportation in Germanium

Tang Gang

(Department of Mathematics and Mechanics, China University of Mining & Technology, Xuzhou, China)

Xu Wantang

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing, China)

Abstract

The Green's function approach developed by X. L. Lei and C. S. Ting has been extended to a single warped heavy-hole band model. The drift velocities and temperature of hot-hole in high-purity Ge have been calculated for the lattices temperatures of 77 K, 190 K and 300 K respectively, and fields ranging from $20 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ to $10^4 \text{ V} \cdot \text{cm}^{-1}$ applied parallel to $\langle 100 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ orientations. The agreement between the numerical results and the experimental data shows that the extended Green's function approach is successful. The nonparabolic effect of the heavy-hole band on drift velocity and temperature of hole has also been cosidered and discussed briefly.

Key words hot-electron and hot hole, hot-electron temperature, drift velocity, distribution function, Green's function, statistical operator, Boltzmann equation, Liouville-Von Neumann equation