

鍺中隧道电流过程的理論(I)*

——杂质引起的隧道电流

甘 子 釗

(北京大学物理系)

摘 要

这工作是对鍺中杂质散射引起的隧道电流的理論分析。說明在高掺杂($\sim 10^{19}$ 厘米 $^{-3}$)时杂质散射隧道电流是重要的,可以与联系着声子的隧道电流比拟或更大。不同杂质的作用是不同的,As和P比Sb的强。鍺中杂质隧道过程主要是二級过程,由导带底穿入禁带的电子先被杂质場散射到对应于导带(0,0,0)处的电子状态,然后,再在結势壘場的作用下跃迁到价带。提出了这种过程的理論,得到杂质隧道电流的表达式,說明只有处在势壘区中一定区域(大致是20 Å左右厚度)中的杂质原子对这个过程有显著贡献。虽然导带底是各向异性的,但这过程的几率却几乎是各向同性的。在附录II中还提供了一个在任意形式位壘下直接隧道过程的普遍理論。

I. 引 言

最简单的隧道电流过程(以下簡称为直接过程)是由于导带底和价带頂的电子波函数由两方面穿入禁带,靠結电場的作用而发生的两者之間的跃迁^[1,18]。这种过程只适合于导带底与价带頂有相近的波矢 $\mathbf{k}$ 的情形。在Ge和Si的隧道二极管中,导带电子都集中在 $\mathbf{k}$ 值远离 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 的各导带底附近,它們要穿透到位于 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 的价带頂附近的空能級,必須有一很大的准动量改变。这情况下的隧道电流一般都解释为凱尔迪什(Кельдыш)^[1]所首先提出的一級声子-隧道电流过程,其中电子和声子的相互作用代替了直接过程中引起跃迁的結电場,过程中声子的发射或吸收适足以补偿电子的准动量改变。这过程实质上很类似于单声子的热复合(激发)过程。Si隧道二极管和用Sb掺杂的Ge隧道二极管的低温(液氮)伏安特性的測量結果,确实很好地証实了在隧道过程中伴随着声子的发射或吸收;它們的伏安曲綫随电压的增长在某些确定电压值,表现出明显的陡增(“阶梯”),直接对应于发射各不同支声子的“閾能”(eV = 声子能量 $\hbar\omega$);但类似的结构在掺As和P的Ge隧道二极管中,在最好的情况,也仅仅是隱約可辨^[3],說明联系着声子的隧道电流只占全部电流中較小的一部分。实验还表明^[4],在同样的掺杂浓度下,掺As的Ge隧道二极管比掺Sb的有較大的隧道电流密度,而且当杂质浓度增加时,前者电流密度的增长較后者为快。这些情况表明,除去声子-隧道电流以外,同时还存在另一种密切依赖于掺杂程度和性质的隧道电流过程(以下簡称为杂质-隧道过程);后者在有些情况(掺As和P的Ge隧道二极管),可以超过声子-隧道电流而成为隧道电流的主要部分。关于

* 1962年8月23日收到。

这种杂质-隧过程究竟如何产生,有人认为是由于掺杂严重地改变了锗的能带结构^[3,4],有人认为是倚靠杂质的散射作用^[2],但都属于一般揣测,还没有具体的分析.从高掺杂 Ge 的电学、磁导率、磁阻、压阻各方面的实验结果来看^[5,6],或者按照我们所进行的一般理论估计,Ge 能带发生上述揣测那样的严重改变的可能性很小.本文将具体分析杂质散射产生的隧道电流.本节将具体讨论考虑杂质散射作用的主要依据,然后进一步指出,由于 Ge 能带结构的特点,基于杂质散射的隧道电流在 Ge 隧道二极管中应该主要是一个二级过程,并对这种二级过程理论的要点作扼要的说明.以后各节再作详细的理论分析.

产生大的准动量改变的散射决定于杂质中心的近程作用.介电屏蔽的库仑场 $-e^2/\epsilon r$ 对产生这样大的准动量改变来说是太弱了,而且它完全不能反映出对不同杂质性质的显著依赖关系.施主杂质的近程的原子场与介电屏蔽库仑势的偏离是周知的事实(例如可参看[7]).它,在高掺杂的 Ge, Si 样品的迁移率中也有明显的反映.实验证明^[5,8],高掺杂的 *n* 型 Ge 和 Si 的电子迁移率,都低于按介电屏蔽库仑场散射得出的理论值,而且密切依赖于杂质的性质;在 Ge 和 Si 中,都得到 $\mu_{Sb} > \mu_P > \mu_{As}$. 这与隧道电流与各杂质性质的依赖关系显然一致,表明 As 和 P 产生大准动量改变的散射能力较 Sb 的强.能够比较直接表现出 Sb, P, As 等施主近程作用的这种散射作用的实验数据,是施主基态的谷轨道分裂值;在 Ge 和 Si 中的有关实验值见下表.

表 1 Ge 和 Si 施主基态的谷轨道分裂

元素	Ge 中 ^[10] (10^{-3}eV)	Si 中 ^[11] (10^{-3}eV)
P	3.0	10.6
As	4.1	19.8
Sb	0.57	9.1

我们知道,谷轨道分裂是反映了杂质的原子场与介电屏蔽库仑势不同,可以产生各个谷轨道之间的相当强的耦合^[12].如果我们粗略地以库仑场中的有效质量近似下的波函数作为基态的 0 级近似.用微扰方法计算近程作用所产生的分裂,就可以估计出近程作用 V 在不同能谷间的散射矩阵元^[13];对 Ge,可以得到谷轨道分裂值:

$$\Delta = 4 \int \psi_i(x) V(x) \psi_i(x) d\tau \approx 4 |\phi(0)|^2 \int \psi_{ki}(x) V \psi_{ki}(x) d\tau, \quad (1.1)$$

其中, ψ_i 是第 *i* 个谷轨道的波函数; $\phi(0)$ 是类氢的有效质量波函数在杂质中心的值; ψ_{ki} 是第 *i* 个谷的布洛赫函数.用[7]中考虑到有效质量各向异性的类氢波函数代入,我们可以得到矩阵元 $\lambda = \int \psi_{ki} V \psi_{ki} d\tau$ 的估计;它可以看成是对各施主原子场在产生大准动量改变的散射中作用强弱的一般估计.这样估计的矩阵元的值见表 2.

表 2 谷间矩阵元 λ 的估计值(Ge 中)

元素	P	As	Sb	介电屏蔽库仑作用
λ (尔格·厘米 ³)	3.6×10^{-84}	4.9×10^{-84}	0.9×10^{-84}	4×10^{-86}

可以看到, Sb 的作用远比 P 和 As 弱;这是与杂质-隧道电流的情况是一致的.同时,表中给出的介电屏蔽库仑作用 $\frac{e^2}{\epsilon r}$ 的谷间矩阵元的值说明,近程场与它的偏离是非常显著

的。在 Ge 中产生这样大的准动量改变的声子散射矩陣元的平方 $M^2\nu \sim 10^{-49}$ (指单位体积, 例如, 按 Ge 的間接光跃迁的实驗数据^[14], 可得到由导带底到导带 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 的声子散射矩陣元的平方 $M^2\nu \sim 8.2 \times 10^{-50}$)。与表 2 的估計对比, 我們可以看到, 掺杂到 10^{19} 厘米⁻³ 以上, 杂质的散射作用应可以与声子相比拟, 甚至更强。所以, 以上的分析說明, 在施主杂质散射作用的基础上来討論 Ge 隧道二极管的杂质-隧道电流是合适的。

很自然地会认为, 杂质場是通过完全类似于凯尔迪什所提出的一級声子-隧道的过程而产生一附加的隧道电流, 这时杂质場代替了直接过程中的結电場, 引起电子由导带状态跃迁到价带状态; 杂质的近程原子場作用产生必需的电子动量的改变。这是一个一級的跃迁过程。但是仔細的考虑一下 Ge 的能带結構的特点就会发现, 在 Ge 的情况, 下面提出的二級过程是更为重要的。

首先, 我們知道, 凯尔迪什提出声子-隧道过程是在江崎(Esaki)发现隧道二极管之前; 他所具体討論的是电子在大的反向电压下, 由充滿的价带向导带穿透的击穿电流。这时, 由价带頂穿透到导带 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 的直接过程是可能发生的。当时提出声子-隧道过程是认为, 通过这过程穿到不在 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 的导带底, 穿过的禁带比較窄, 因此穿透几率較直接过程大, 因而在击穿电流中占主要地位。实际上, Ge 的情况并不符合这种設想。因为穿透几率不仅与禁带宽有关, 而且依赖于相应的谷的能带結構 (相应的谷的有效质量值), Ge 的导带 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 谷比导带底高 0.14 eV, 然而 $(0, 0, 0)$ 谷的有效质量值为 $0.04 m_e$, 只有导带底最低有效质量 $0.08 m_e$ 的一半, 这足以抵消禁带稍宽的影响, 使直接穿透更为有利。摩尔根(Morgan)等^[2]确实观察到在掺杂 Sb 的 Ge 隧道二极管中, 当反向电压增加到可以发生直接过程时, 电流迅速地上升。

現在我們考虑隧道二极管的前向隧道电流; 这时, 如設想有一个电子在 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 处, 那末它应该比在导带底的电子更容易穿到价带頂的空能級。当然, 在实际的隧道二极管中, 前向电子的穿透都是从导带底出发的。但是, 可以首先由杂质原子把导带底穿透来的电子散射到导带 $(0, 0, 0)$ 的状态, 然后經过直接过程, 靠結电場的作用穿透到价带。这样一个二級过程保留了上述直接过程的有利特点 (导带 $(0, 0, 0)$ 处小的有效质量大大增加穿透几率), 因此, 比从导带底出发靠杂质散射到价带的一級过程更为有利。所以本文对 Ge 的隧道二极管中杂质-隧道电流所提出的理論便是这样一个二級过程的理論。

硅和鍺不同, 它的导带 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 很高, 所以一級过程应是主要的。一級过程的理論是比較直接了当的; 但是, 在实际的 Si 隧道二极管中, 杂质-隧道电流只占次要部分, 所以不另做討論。Si 中杂质大动量改变的散射矩陣元与 Ge 相近, 不同杂质作用的強弱的順序与 Ge 也相似。它的杂质-隧道电流較不重要, 看来可能是由于声子过程更强的原故。朗(Long)分析迁移率的实驗数据^[15], 德姆克(Dumke)分析 Si 的复合发射^[16], 都得到 Si 导带电子有很强的声子谷間散射的作用的結論。

显然, 以上关于 Ge 中二級过程更为重要的論証同样适用于声子过程。也就是說, Ge 中声子-隧道过程也与 Si 的不同, 不是象凯尔迪什所提出的一級过程, 而是一个二級过程。我們将在本文的第二部分討論这个問題。我們將看到, 相应于不同支的声子的声子-隧道电流的作用的強弱的实驗事实, 是和这个結論一致的。

为了便于了解以下各节的理论分析,这里先对理论分析给出的图象作一扼要的介紹。导带底的电子进入禁带后,经历两个阶段,在前一阶段,是作为一个对应于导带底状态的电子穿行禁带;然后在遇到一个杂质中心时,被散射成为一个对应于导带 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 附近状态的电子;在这以后,它将完全象一个原来是从 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 谷出发的电子一样地,通过直接过程穿透到价带顶。整个过程的几率决定于两阶段中电子波函数在禁带中的衰减以及杂质中心的散射矩阵元。在每一点的衰减决定于电子能量在相应的带底下面多少,以及相应的带底的有效质量。它们愈小,衰减愈慢。在前一阶段,电子刚从导带底进入禁带时,联系着导带底的状态是有利的。这是因为这时它与导带底的能量差比起与 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 谷的能量差小得多,所以它处在第一阶段要衰减得慢一些。但随着穿进的深度的增加,距导带底和 $(0, 0, 0)$ 谷的能量差对比已不是那样悬殊,这时导带底状态较大的有效质量对穿透的不利影响转而成为主要的,这时电子如转入联系着 $(0, 0, 0)$ 谷的状态的第二阶段,则将更为有利。这就是說,电子在进入 $P-N$ 结的某一确定深度时发生两阶段的交替将最有利于穿透。所以,正是位于这个深度附近的杂质(它们的散射使电子由导带底状态转到 $(0, 0, 0)$ 谷的状态)对杂质隧道电流贡献最大。在下面各节中我们将给出以上过程的详细理论。第二节将给出电子在穿透过程中发生两阶段的交替的理论形式。第三节是在准古典近似下处理这种交替,并给出二级穿透几率的一般表示式。第四节是在一个类似于 Ge 的能带模型下把第三节的结果具体化,并给出总的杂质-隧道电流的表达式。最后我们把它和在本文的第二部分得到的声子-隧道电流加以比较。在这些理论分析中,我们必须把直接过程的理论作进一步的改进(过去的直接过程理论^[1,18]都是就结电场是常数进行的)。在附录 II 中我们给出一个在任意位垒下直接过程的理论,并且在这理论中只要用到有效质量波函数,这很有利于理论分析。在附录 III 中我们对杂质中心与穿透的电子、空穴的库仑作用对这过程的影响作了一些估计,说明这影响不是很大。

II. 势垒场中杂质散射的电子波函数

在隧道问题中,势垒场不仅是可引起电子带间跃迁的微扰,而首先必须考虑有关的电子波在势垒场中的传播。在一般的直接过程中,首先必须求出在势垒场中导带和价带电子进入禁带的衰减波函数,然后才考虑势垒场的带间作用,计算它们之间的跃迁几率。在我们的问题中,导带底的电子波入射到 $P-N$ 结势垒中很快地反射和衰减。由于势垒场的改变比起晶体原子场来说总是很缓慢的,所以穿透入禁带中的电子波仍然基本上是由导带底附近的布洛赫波所组成的。价带顶穿透进禁带的电子状态也同样是由价带顶附近的布洛赫波组成的。由于杂质近程作用的散射,在原来基本上由导带底附近的布洛赫波组成的入射波中,掺进一些远离导带底的布洛赫波的成分。其中处在 $(0, 0, 0)$ 谷附近的成分就可以靠结电场的作用跃迁到价带顶附近的空状态去。入射波与散射波都是在位垒场中传播的。本节就是要导出 $(0, 0, 0)$ 谷附近这部分散射波的行为。在下节再讨论势垒场的带间作用所引起的跃迁。所以在本节中我们略去势垒和杂质场的带间作用¹⁾,势垒中导带电子波函数可以只用导带的布洛赫函数来组成:

1) 杂质场的带间作用引起一级杂质-隧道过程。所以今后也不考虑。

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} a(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (2.1)$$

其中,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (2.2)$$

是導帶波矢為 $\mathbf{k}$ 的布洛赫函數, V 是晶體體積.

如令 $\phi(\mathbf{x})$ 代表結勢壘; $U(\mathbf{x})$ 表示雜質原子場的總和:

$$U(\mathbf{x}) = \sum_i v(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i), \quad (2.3)$$

其中 $v(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ 是位於 $\mathbf{x}_i$ 的雜質原子的原子場, 則 $a(\mathbf{k})$ 所滿足的方程是

$$\begin{aligned} [E - E(\mathbf{k})]a(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | \phi | \mathbf{k}' \rangle a(\mathbf{k}') - \\ - \sum_{\mathbf{k}''} \langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k}'' \rangle a(\mathbf{k}'') = 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

$E(\mathbf{k})$ 是導帶電子能量表達式, E 是電子能量. 我們把能量零點選在導帶底, 則 E 就是電子在入射到勢壘區前的動能. 把雜質場 U 看作微擾, 波函數按微擾逐級展開:

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi^{(0)}(\mathbf{x}) + \phi^{(1)}(\mathbf{x}) + \dots \quad (2.5)$$

令

$$\begin{aligned} \phi^{(0)}(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k}} a^{(0)}(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \\ \phi^{(1)}(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k}} a^{(1)}(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.6)$$

代入(2.4)得到下列各級方程:

$$[E - E(\mathbf{k})]a^{(0)}(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | \phi | \mathbf{k}' \rangle a^{(0)}(\mathbf{k}') = 0, \quad (2.7)$$

$$[E - E(\mathbf{k})]a^{(1)}(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | \phi | \mathbf{k}' \rangle a^{(1)}(\mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{k}''} \langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k}'' \rangle a^{(0)}(\mathbf{k}''), \quad (2.8)$$

.....

0 級方程是沒有雜質原子場的位置中電子的運動方程. 由於勢壘場的改變是緩慢的, 類似於一般有效質量近似的理論, 由導帶底附近穿入的電子波函數, 基本上是由導帶底附近的布洛赫波組成的. 設導帶底在 $\mathbf{k} = \mathbf{K}_j$ 處, $a^{(0)}(\mathbf{k})$ 只有對在 $\mathbf{K}_j$ 附近的 $\mathbf{k}$ 有值. 引入 $\mathbf{k} = \mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j$, $E(\mathbf{k})$ 在 $\mathbf{k} = \mathbf{K}_j$ 附近的近似表達式 $E_j(\mathbf{k}_j)$:

$$E(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j) \approx E_j(\mathbf{k}_j), \quad (2.9)$$

在這近似下, $a^{(0)}(\mathbf{k})$ 所滿足的方程是

$$(E - E_j(\mathbf{k}_j))a^{(0)}(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j) - \sum \langle \mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j | \phi | \mathbf{K}_j + \mathbf{k}'_j \rangle a^{(0)}(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}'_j) = 0, \quad (2.10)$$

$\mathbf{k}_j$ 和 $\mathbf{k}'_j$ 都比較小時, 按一般有效質量近似的理論, 在(2.10)中, 矩陣元: $\langle \mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j | \phi | \mathbf{K}_j + \mathbf{k}'_j \rangle$ 近似表達為¹⁾

1) 這近似相當於略去帶間項, 可參看附錄 II.

$$\langle \mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j | \phi | \mathbf{K}_j + \mathbf{k}'_j \rangle \approx \frac{1}{V} \int \phi(\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{k}_j - \mathbf{k}'_j) \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}. \quad (2.11)$$

解出(2.10)代入到(2.8)式之右端,就得到散射波所满足的方程。由于我們所关心的只是(0,0,0)谷邻近的成分,考虑到势垒场的改变是缓慢的,引入 $E(\mathbf{k})$ 在 $\mathbf{k} = (0,0,0)$ 附近的近似表达式¹⁾ $E(\mathbf{k}) \approx E_0(\mathbf{k}) + \Delta$ (Δ 较小); $E_0(0) = 0$, Δ 是(0,0,0)极值的能量(注意已选导带底为能量零点),则 $a^{(1)}(\mathbf{k})$ 对(0,0,0)附近的 $\mathbf{k}$ 的近似表达式 $a_0^{(1)}(\mathbf{k})$ 满足方程:

$$\begin{aligned} (E - E_0(\mathbf{k}) - \Delta) a_0^{(1)}(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | \phi | \mathbf{k}' \rangle a_0^{(1)}(\mathbf{k}') &= \sum_{\mathbf{k}''} \langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k}'' \rangle a^{(0)}(\mathbf{k}'') = \\ &= \sum_{\mathbf{k}_j} \langle \mathbf{k} | U | \mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j \rangle a^{(0)}(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j), \end{aligned} \quad (2.12)$$

其中

$$\langle \mathbf{k} | \phi | \mathbf{k}' \rangle \approx \frac{1}{V} \int \phi(\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad (2.13)$$

$$\langle \mathbf{k} | U | \mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j \rangle = \sum_i e^{i(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}_i} \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j}(\mathbf{x}). \quad (2.14)$$

由于 $\mathbf{K}_j \gg \mathbf{k}, \mathbf{k}_j$, 可以近似地认为矩阵元 $\int d\mathbf{x} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j}(\mathbf{x})$ 是一常数 λ , 与 $\mathbf{k}, \mathbf{k}_j$ 无关; 这样(2.12)的右边就成为

$$\sum_i \frac{\lambda}{V} \sum_{\mathbf{k}_j} a^{(0)}(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j) e^{i(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}_i} = \sum_i \frac{\lambda}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i} f^{(0)}(\mathbf{x}_i), \quad (2.15)$$

其中

$$f^{(0)}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}_j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{x}} a^{(0)}(\mathbf{K}_j + \mathbf{k}_j) \quad (2.16)$$

称做 0 级解的“有效质量波函数”。从(2.10)与(2.11)可见,可以直接得到 $f^{(0)}(\mathbf{x})$ 满足的“有效质量方程”:

$$(E - E_j(-i\nabla)) f^{(0)}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{K}_j \cdot \mathbf{x}} - \phi(\mathbf{x}) f^{(0)}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{K}_j \cdot \mathbf{x}} = 0. \quad (2.17)$$

同样引入一级解的有效质量波函数:

$$f_0(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} a_0^{(1)}(\mathbf{k}). \quad (2.18)$$

从(2.12)(2.13)与(2.15)可以得到它所满足的方程是

$$[E - \Delta - E_0(-i\nabla)] f_0(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x}) f_0(\mathbf{x}) = \lambda \sum_i f^{(0)}(\mathbf{x}_i) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i). \quad (2.19)$$

这方程有明显的涵义,它是联系着(0,0,0)谷的有效质量方程的格林(Green)函数(源函数)的方程。每一杂质中心是一个“源”,它从原来的入射波中散射出(0,0,0)谷的散射波,这散射波再在位垒中传播。这个“源”的“强度”正比于入射到它上面的入射波。以后我们将求这个散射波到价带顶的直接跃迁。很容易看出,这是一个二级跃迁过程。杂质场散

1) 为了处理直接穿透的问题,我们这个近似表达式必须比通常有效质量抛物型的近似表达要复杂一些。它要表现导带和价带的 $E(k)$ 是同一解析函数的两叶,但我们知道,当禁带宽度较窄小得多,这解析函数的分支点很接近实轴的情形,还可以类似于一般的有效质量近似,用有效质量参量来给出导带(0,0,0)谷和价带(0,0,0)顶的近似表达式。

射电子到(0,0,0)谷的中間态,再靠結电場跃迁到末态(价带頂的空状态)。其实,如果我们知道算符 $E(-i\nabla) + \Delta + \phi(\mathbf{x})$ 的本征函数 $\varphi_{0\epsilon}(\mathbf{x})$ (ϵ 是标志其本征值是 ϵ), 則显然(2.19)的解是

$$f_0(\mathbf{x}) = \sum_i \lambda f^{(0)}(\mathbf{x}_i) \sum_{\epsilon} \frac{\varphi_{0\epsilon}^*(\mathbf{x}_i)}{E - \epsilon} \varphi_{0\epsilon}(\mathbf{x}), \quad (2.20)$$

求和遍及所有的本征函数。注意到前面对 $v(\mathbf{x})$ 的矩陣元做的近似, $\lambda f^{(0)}(\mathbf{x}_i) \varphi_{0\epsilon}^*(\mathbf{x}_i)$ 其实就是 $\psi^{(0)}$ 与 $\varphi_{0\epsilon}$ 所对应的电子状态之間的矩陣元。由此可見,对(2.19)的解求跃迁是和一般的二級跃迁理論一致的,中間态是原来在(0,0,0)谷入射来的电子波函数。不过用(2.19)的解本身就对所有的中間态求过和了,这避免了用通常的方法的困难。因为始态、末态与中間态,还有它們之間的矩陣元,都只能有一个相当复杂的近似形式,对中間态的求和是困难的,并难以看出其总的近似程度。而且用这里的方法能給过程以明显的物理图象。

現在先忽略去势垒場的变化,簡單考察一下(0,0,0)谷散射波的特点。令

$$E - (\Delta + \phi) = -\Delta', \quad \Delta' > 0 \quad (2.21)$$

是一常数,表示电子能量在(0,0,0)极值以下多少,如果 $E_0(k) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$, 則得

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{x}) &= -\lambda \sum_i f^{(0)}(\mathbf{x}_i) \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\Delta' + \frac{\hbar^2}{2m}k^2} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)} \\ &= \lambda \sum_i f^{(0)}(\mathbf{x}_i) \frac{m}{\pi \hbar^2} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \exp \left\{ - \left(\frac{2m\Delta'}{\hbar^2} \right)^{1/2} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i| \right\}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

它表明入射波在每一杂质原子处散射出一圈(0,0,0)谷电子状态的散射波,它随与杂质原子之距离而指数衰减,范围大致是 $(\hbar^2/2m\Delta')^{1/2}$; 当 $\Delta' = 0.14\text{eV}$, $m = 0.04m_e$ 时,这长度大致是 $25 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ 厘米}$)左右。

III. 准古典近似解和穿透几率的計算

我們首先求出散射波在位垒中传播的近似表达式,然后再求它跃迁到价带空状态去的几率。由于杂质原子的分布是无規的,不同的杂质原子散射出来的散射波間的相干效应互相抵消;所以我們可以先求出每一杂质原子的散射波,和它到价带的跃迁几率。总的杂质-隧道跃迁几率是位于各处的杂质原子产生的跃迁几率的总和。选取結电場的方向为 x 方向,則势垒 $\phi(\mathbf{x})$ 只是 x 座标的函数。杂质原子处在 (x_i, y_i, z_i) 处。杂质場散射出的(0,0,0)谷的波在位垒中传播不会改变它的 y 方向和 z 方向的准动量。所以引入

$$f_{0c}(x k_y k_z) = \sum_{k_x} \frac{1}{L_x^{1/2}} e^{ik_x x} a_0^{(1)}(k_x k_y k_z), \quad (3.1)$$

L_x 是晶体 x 方向的綫大小,它可以叫做横向波矢为 k_y, k_z 的散射波的有效質量波函数。从(2.12)(2.13)和(2.15)可以得到它所滿足的波动方程是

$$\left(E - \Delta - E_0 \left(-i \frac{\partial}{\partial x}, k_y, k_z \right) \right) f_{0c}(K, k_y, k_z) - \phi(x) f_{0c}(x, k_y, k_z)$$

$$= \left(\frac{1}{L_y L_z} \right)^{1/2} \lambda f^{(0)}(x_i, y_i, z_i) e^{-ik_y y_i - ik_z z_i} \delta(x - x_c), \quad (3.2)$$

(3.2) 是一常微分方程的格林函数的方程。相应的常微分方程是

$$\left[E - \Delta - E_0 \left(-i \frac{\partial}{\partial x}, k_y, k_z \right) \right] \varphi(x, k_y, k_z) - \phi(x) \varphi(x, k_y, k_z) = 0, \quad (3.3)$$

它是横向波矢为 k_y, k_z , 能量为 E 的电子波在位垒中传播的方程。如果 $E_0(k_x, k_y, k_z)$ 对 k_x 是一般的抛物綫型的形式, 那么和通常位垒穿透的問題一样, 当位置場 $\phi(x)$ 改变得比較緩慢时, 一般有准古典的(或称 W-K-B)的近似。但是如同凱尔迪什^[1]所首先認識到的, 要正确地反映直接隧道过程这样是不够的, $E_0(k_x, k_y, k_z)$ 作为 k_x 的函数必須有更为复杂的形式, 要能够反映出导带与价带作为同一多值解析函数的两叶的特点。凱尔迪什^[1]和凱因(Kane)^[18]都在結电場是常数的模型下解过这个方程, 他們的解實質上也是准古典的解(凱因曾指出这点)。在一个一般的 $E_0(\mathbf{k})$ 和任意的(但满足 W-K-B 近似的要求)位垒时, 我們在附录 I 中証明仍然可以有准古典近似的解。(3.3) 的两个相互独立的准古典近似解是

$$[\partial E_0 / \partial k_x(x)]^{-1/2} \exp \{ i \int^x k_x(x) dx \}, \quad (3.4)$$

$$[\partial E_0 / \partial k_x(x)]^{-1/2} \exp \{ -i \int^x k_x(x) dx \}. \quad (3.5)$$

$k_x(x)$ 是由准古典条件

$$E_0(k_x(x), k_y, k_z) + \Delta + \phi(x) - E = 0 \quad (3.6)$$

确定的。我們約定 $k_x(x)$ 的虛部取正值。(3.4) 是齐次方程(3.3) 当 $x \rightarrow +\infty$ 时趋于零的解的近似; (3.5) 是 $x \rightarrow -\infty$ 时趋于零的解的近似。从一般格林函数的定理(例如可参看[17])可知当 $x > x_i$ 时, (3.2) 的解是(3.3) 的 $x \rightarrow +\infty$ 时趋于零的解; 当 $x < x_i$ 时, 是(3.3) 的 $x \rightarrow -\infty$ 时趋于零的解。可以作出(3.2) 的近似的解¹⁾为

$$f_{0c}(x, k_y, k_z) = \frac{\lambda f^{(0)}(\mathbf{x}_i)}{(L_y L_z)^{1/2}} \frac{1}{2} e^{-ik_y y_i - ik_z z_i} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{|k_x(x_i)|} \frac{(\partial E_0 / \partial k_x(x_i))^{1/2}}{(\partial E_0 / \partial k_x(x))^{1/2}} \cdot \exp \left\{ - \left| \int_{x_i}^x \text{Im} k_x(x) dx \right| \right\}, \quad (3.7)$$

其中

$$\frac{1}{m} = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_0(k)}{\partial k_x^2} \right)_{k_x=0}$$

是(0, 0, 0)谷有效質量。对于能量小于 Δ 的电子來說, 在整个空間都沒有古典“返回点”($E - \Delta - \phi(x) = 0$ 的点); (3.4)(3.5) 的近似性是比较好的。故(3.7) 的近似也是較好的。

(3.7) 的涵义是比较明显的, 位于 (x_i, y_i, z_i) 处的杂质原子散射出的横向波矢为 k_y, k_z 的(0, 0, 0)谷电子波, 它始終是处在禁带中的; 因此向前和向后传播都是衰減的(見图 1)。散射波的强度²⁾正比于“源强度”(入射波的强度与散射矩陣元的平方的乘积); 反比于散射波在这点的速度。

1) 在作出这个解时, 我們是用了二阶常微分方程的格林函数(即把 $E_0(\mathbf{k})$ 展开到 k_x 的二次方)的表达式, 所以(3.7) 是(3.2) 的近似的格林函数, 即是在相当平滑的(二次微商以上是可以忽略的)函数族上才是好的近似。如果把(3.2) 变成一非齐次积分方程就会較清楚看到这种近似性。

2) 强度指波函数的振幅的平方。

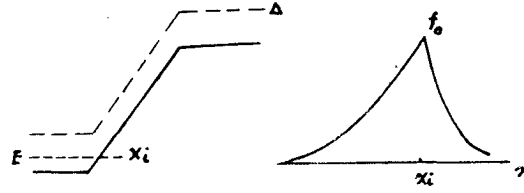


图1 散射波的传播

总的散射波是把不同的横向波矢的散射波叠加起来：

$$f_0(xyz) = \sum_{k_y, k_z} \frac{1}{L_y L_z} \frac{m}{\hbar^2} \frac{\lambda f^{(0)}(\mathbf{x}_i)}{|k_x(\mathbf{x}_i)|} \frac{(\partial E_0 / \partial k_x(\mathbf{x}_i))^{1/2}}{(\partial E_0 / \partial k_x(\mathbf{x}))^{1/2}} \exp \left\{ - \left| \int_{x_i}^x \text{Im} k(x) dx \right| \right\} \times \exp \{ i k_y(y - y_i) + i k_z(z - z_i) \}. \quad (3.8)$$

在了解(3.8)时要注意到,按(3.6), $k_x(x)$ 也是 k_y, k_z 的函数; 在写(3.8)时为了书写简便而没有标明这个依赖关系。

在附录 II 中, 我們发展了一个在任意位垒形式下, 結电场引起的直接跃迁的理論。現在我們具体运用那里的結果来求散射波(3.7)(3.8)到价带的直接过程几率。按照附录 II, 如果把导带 $(0, 0, 0)$ 谷和价带頂的能量函数 $E_0(\mathbf{k})$ 和 $E'_0(\mathbf{k})$ 表达为同一解析函数的两叶, 連結这两叶的分支点 k_q ,

$$E_0(k_q, k_y, k_z) = E'_0(k_q, k_y, k_z), \quad (3.9)$$

$$\text{Im} k_q = q. \quad (3.10)$$

設穿入位垒的导带电子有效质量波函数是

$$f_0 = \sum_{\mathbf{k}} a_0(\mathbf{k}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad (3.11)$$

价带电子有效质量波函数是

$$f'_0 = \sum_{\mathbf{k}} a'_0(\mathbf{k}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad (3.12)$$

則直接过程矩陣元是

$$M = \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}_1 f_0(x) \frac{\phi(x) - \phi(x_1)}{x - x_1} \cdot \frac{\pi}{2} e^{-q|x-x_1|} f'_0(x_1). \quad (3.13)$$

直接过程的单位時間跃迁几率为

$$p = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2. \quad (3.14)$$

从(3.13)可見始态与末态的横向动量必須是相同的。

在用这些結果去討論散射波(3.8)到价带的直接跃迁过程之前, 先把附录 II 中所証明的, 由导带 $(0, 0, 0)$ 谷到价带頂的直接隧道过程的准古典图象, 簡略分析一下, 这有助于了解下面的討論。

由导带 $(0, 0, 0)$ 谷穿透到禁带中的电子状态的有效质量波函数是(准古典近似下):

$$\frac{1}{(L_y L_z)^{1/2}} e^{i(k_y y + k_z z)} \frac{(\partial E_0 / \partial k_x)_\infty^{1/2}}{(\partial E_0 / \partial k_x(x))^{1/2}} \exp \left\{ - \int_{x_c}^x \text{Im} k_x(x) dx \right\}, \quad (3.15)$$

$$E_0(k_x(x) k_y k_z) + \phi(x) + \Delta = E, \quad (3.16)$$

$$E_0(0, k_y, k_x) + \phi(x_c) + \Delta = E. \quad (3.17)$$

价带有同样横向波矢的电子状态的有效质量波函数是

$$\frac{1}{(L_y L_z)^{1/2}} e^{i(k_y y + k_x x)} \frac{(\partial E'_0 / \partial k_x)_{+\infty}^{1/2}}{(\partial E'_0 / \partial k_x(x))^{1/2}} \exp \left\{ - \int_x^{x_v} \text{Im} k'_x(x) dx \right\}, \quad (3.18)$$

$$E'_0(k'_x(x), k_y, k_x) + \phi(x) + \Delta = E, \quad (3.19)$$

$$E'_0(0, k_y, k_x) + \phi(x_v) + \Delta = E, \quad (3.20)$$

x_c, x_v 就是相应的古典“返回点”。引入准古典波矢 $k_x(x)$ 等于分支点 k_q 的点 x_q , 它叫做“轉換点”:

$$E_0(k_q, k_y, k_x) + \phi(x_q) + \Delta = E. \quad (3.21)$$

很明显, 在 x_q 点之左, (3.16) 能给出准古典波矢, x_q 之右, (3.19) 能给出准古典波矢. 就象在轉換点以前, 电子状态由导带状态组成, 到 x_q 点以后就转变为由价带状态来组成. 附录 II 中証明 (3.15) 与 (3.18) 間的跃迁矩陣元是

$$-\frac{i\pi^2}{4} \left(\frac{\partial E_0}{\partial k_x} \right)_{-\infty}^{1/2} \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k_x} \right)_{+\infty}^{1/2} \exp \left\{ - \int_{x_c}^{x_q} \text{Im} k_x(x) dx - \int_{x_q}^{x_v} \text{Im} k'_x(x) dx \right\}. \quad (3.22)$$

注意到 $E_0(k)$ 与 $E'_0(k)$ 是同一解析函数之两叶, 故 (3.16) 与 (3.19) 实际上是同一方程, 在每一个 x 给出确定的一个 $k_x(x)$, x_q 点以左是 (3.16), 以右是 (3.19). 因此, (3.22) 中的指数項可統一表示为

$$\exp \left\{ - \int_{x_c}^{x_v} \text{Im} k_x(x) dx \right\}. \quad (3.23)$$

这样附录 II 就証明了通常位垒穿透的准古典图象: 进入禁带中的电子有复的波矢, 在轉換点 x_q 轉換到另一个带 (相应于由 $E(k)$ 的一叶到另一叶). 可以用同样的方法, 用 (3.13) 来求散射波 (3.8) 到价带横向波矢是 k_y, k_x 的电子状态 (相应于 (3.19)) 的跃迁矩陣元; 当 x_i 离 x_q 尚远时, 容易得到

$$M = A \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k_x} \right)_{+\infty}^{1/2} \left(\frac{1}{L_y L_z} \right)^{1/2} \frac{\pi^2}{4} \exp \left\{ - \int_{x_i}^{x_v} \text{Im} k_x(x) dx \right\}, \quad (3.24)$$

$$A = \frac{m}{\hbar^2} \frac{\lambda f^{(0)}(\mathbf{x}_i)}{|k_x(\mathbf{x}_i)|} \left(\frac{\partial E_0}{\partial k_x(\mathbf{x}_i)} \right)^{1/2} \exp [i(k_y y_i + k_x x_i)]. \quad (3.25)$$

所以, 由于在 (x_i, y_i, z_i) 处一杂质原子的散射, 电子由导带底出发经过二級杂质-隧道过程, 跃迁到价带的一个能量是 E_v , 横向波矢是 k_y, k_x 的状态去的几率是

$$\delta(E - E_v) \frac{2\pi}{\hbar} |A(x_i)|^2 \frac{1}{L_y L_z} \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k_x} \right)_{+\infty} \frac{\pi^4}{16} \exp \left\{ - 2 \int_{x_i}^{x_v} \text{Im} k_x(x, k_y, k_x) dx \right\}. \quad (3.26)$$

由导带底穿进禁带的电子状态的有效质量波函数 $f^{(0)}$, 在准古典近似下, 是

$$|f^{(0)}(\mathbf{x}_i)|^2 = \frac{1}{L_y L_z} \left(\frac{\partial E_j}{\partial k_{jx}} \right)_{-\infty} \left[\frac{\partial E_j}{\partial k_{jx}(x)} \right]^{-1} \exp \left\{ - 2 \int_{x_c}^{x_i} \text{Im} k_{jx}(x, k_{jy}, k_{jz}) dx \right\}, \quad (3.27)$$

$$E_j(k_{jx}(x), k_{jy}, k_{jz}) + \phi(x) = E, \quad (3.28)$$

$$E_j(0, k_{jy}, k_{jz}) + \phi(x_c) = E. \quad (3.29)$$

把这代入 (3.26), 就会得到在跃迁几率中有一与 x_i 有关的指数因子:

$$\exp \left\{ - 2 \int_{x_c}^{x_i} \text{Im} k_{jx}(x, k_{jy}, k_{jz}) dx - 2 \int_{x_i}^{x_v} \text{Im} k_x(x, k_y, k_x) dx \right\}. \quad (3.30)$$

它正是代表了杂质-隧道过程的电子在两个阶段的衰减. 前一阶段 $x_c - x_i$ 按与导带底

相联系的波矢衰减, 后一阶段 $x_i - x_0$ 按与 $(0, 0, 0)$ 相联系的波矢衰减. 在图 2 中我们结合 Ge 的情况, 示意地画出 $\text{Im}k_{ix}(x)$ 和 $\text{Im}k_x(x)$ 在隧道过程中变化的情况. 电子刚进入

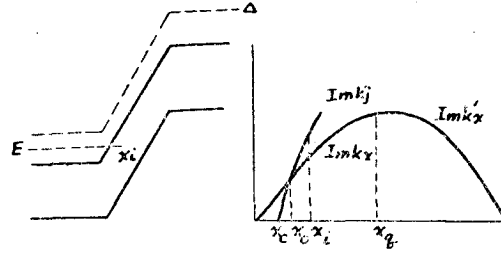


图 2 二级杂质-隧道过程

禁带时, 能量接近导带底, 所以 $\text{Im}k_{ix}(x)$ 很小; 而这时电子能量至少也在 $(0, 0, 0)$ 极值下 Δ , 所以 $\text{Im}k_x(x)$ 已有一定的值, 大于 $\text{Im}k_{ix}(x)$. 然而由于导带底的有效质量较大, $\text{Im}k_{ix}(x)$ 随 $\phi(x) - E$ 的增加较陡, 以致在到达 x_0 处时, $\text{Im}k_{ix}(x)$ 与 $\text{Im}k_x(x)$ 相等; 大于 x_0 时, $\text{Im}k_x(x) < \text{Im}k_{ix}(x)$. x_i 是标志该处有一杂质, 它对隧道过程的贡献是这样的, 从 x_c 到 x_i 按 $\text{Im}k_{ix}(x)$ 衰减, x_i 到 x_0 按 $\text{Im}k_x(x)$. 由 (3.30) 与图 2 明显看到, 不同地点的杂质贡献是不同的; 正好在 x_0 处的杂质, 在各点都是按 $\text{Im}k_{ix}(x)$ 与 $\text{Im}k_x(x)$ 中较小的一个衰减, 它的贡献最大. 离 x_0 愈远, 贡献愈小.

(3.26) 是一个能量为 E , 横向波矢是 $K_{iy} + k_{iy}$, $K_{iz} + k_{iz}$ 的导带电子, 由于 x_i 处杂质的散射, 经过二级过程到能量为 E_v , 横向波矢是 k_y, k_z 的价带电子状态的几率. 把不同地点的杂质的贡献总加起来得到这个电子经杂质隧道过程到这个价带状态, 总的单位时间跃迁几率是

$$\delta(E - E_v) \rho L_y L_z \frac{1}{L_y L_z} \frac{\pi^2}{16} \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k'_x} \right)_{+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_i |A(x_i)|^2 \exp \left\{ -2 \int_{x_i}^{x_v} \text{Im}k_x(x, k_y, k_z) dx \right\}, \quad (3.31)$$

ρ 是杂质浓度, $L_y L_z$ 是结面积. 代入 (3.27), 得

$$\begin{aligned} & \delta(E - E_v) \rho L_y L_z \frac{\pi^5}{8\hbar} \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k'_x} \right)_{+\infty} \left(\frac{\partial E_j}{\partial k_{zx}} \right)_{-\infty} \frac{1}{(L_y L_z)^2} \frac{m^2}{\hbar^4} \lambda^2 \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dx_i \frac{(\partial E_0 / \partial k_x(x_c))}{|k_x(x_i)|^2} \frac{1}{(\partial E_j / \partial k_j(x_i))} \exp \left\{ -2 \int_{x_c}^{x_i} \text{Im}k_{ix}(x) dx - 2 \int_{x_i}^{x_v} \text{Im}k_x(x) dx \right\}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

(3.32) 的被积函数中有两个指数因子, 一随 x_i 的增大而减小, 一随 x_i 的增大而增加, 故积分可用鞍点法近似求积¹⁾. 这从对图 2 的讨论看得非常清楚. 鞍点 x_0 由

$$\text{Im}k_{ix}(x_0, k_{iy}, k_{iz}) = \text{Im}k_x(x_0, k_y, k_z) \quad (3.33)$$

决定, 正是图 2 的 x_0 点. 令 $\alpha(x)$ 为

$$\alpha(x) = \left(\frac{\partial k_{ix}(x, k_{iy}, k_{iz})}{\partial x} - \frac{\partial k_x(x, k_y, k_z)}{\partial x} \right)^{1/2}, \quad (3.34)$$

得到几率 (3.32) 的近似表达式是

1) 实际上, 这里在鞍点两旁被积函数下降不是十分陡的, 故鞍点法是较粗略的, 但它给过程以很明显的物理图象.

$$\rho L_y L_z \frac{\pi^5}{8\hbar} \delta(E - E_V) \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k_x} \right)_{+\infty} \left(\frac{\partial E_j}{\partial k_{ix}} \right)_{-\infty} \left(\frac{1}{L_y L_z} \right)^2 \frac{m^2}{\hbar^4} \lambda^2 \frac{\pi^{1/2}}{\alpha(x_0)} \times \\ \times \frac{(\partial E_0 / \partial k_x(x_0))}{|k_x(x_0)|^2} \frac{1}{(\partial E_z / \partial k_{ix}(x_0))} \exp \left\{ -2 \int_{x_c}^{x_0} \text{Im} k_{ix}(x) dx - 2 \int_{x_0}^{x_v} \text{Im} k_x(x) dx \right\}. \quad (3.34)$$

这实际上是說, 虽然各个地方的杂质原子都会散射出 \$(0, 0, 0)\$ 谷的波, 但对二級隧道过程有显著贡献的只是那些位于 \$x_0\$ 点附近, 大致分布在 \$\frac{1}{\alpha(x_0)}\$ 范围中的杂质原子. 对錯, 估計出 \$\frac{1}{\alpha(x_0)}\$ 大約是 \$20 \text{ \AA}\$ 左右. 这就是說, Ge 的 \$P-N\$ 結势垒区内大約 \$20 \text{ \AA}\$ 厚的一层杂质原子是对杂质-隧道过程起决定性作用的.

以上的分析实际上也說明了, 在 Ge 的情况, 由导带底出发的一級杂质-隧道过程是远較二級过程小的, 这是因为一級过程中, 从 \$x_0\$ 右方到散射入价带状态这一段相应于更大的 \$\text{Im} k_{ix}(x)\$.

IV. 总的杂质-隧道电流

(3.34) 給出了由初态 \$(E, K_{iy} + k_{iy}, K_{iz} + k_{iz}, \text{导带电子})\$ 到終态 \$(E_V, k_y, k_z, \text{价带空状态})\$ 的跃迁几率. 乘以相应的分布函数, 对初态与末态求和, 就得到总的杂质-隧道电流(从导带底 \$j\$ 出发的):

$$I = \rho L_y L_z \frac{m^2 \lambda^2}{2^7 \pi^{1/2} \hbar^5} \int dE (f_c(E) - f_v(E)) \int dk_{iy} dk_{iz} dk_y dk_z \frac{(\partial E_0 / \partial k_x(x_0))}{(\partial E_z / \partial k_{ix}(x_0))} \times \\ \times \frac{1}{\alpha(x_0)} \frac{1}{|k(x_0 k_y k_z)|^2} \exp \left\{ -2 \int_{x_c}^{x_0} \text{Im} k_{ix}(x, k_{iy}, k_{iz}) dx - 2 \int_{x_0}^{x_v} \text{Im} k_x(x, k_y, k_z) dx \right\}, \quad (4.1)$$

其中 \$f_c(E)\$, \$f_v(E)\$ 是 \$n\$ 区导带与 \$p\$ 区价带的电子分布函数. 在利用 (4.1) 計算电流时, 一般說, 可以略去被积函数中指数前的因子与 \$E, k_{iy}, k_{iz}, k_y, k_z\$ 的关系而提出积分号外. 其次, 指数項是随 \$k_{iy}, k_{iz}, k_y, k_z\$ 的增大而迅速下降的. 因此可以把指数上的因子对它們展开, 使对它們的积分可以近似积出.

現在假設下列能帶模型, 它很接近于 Ge 的导带与輕空穴价带的情况:

$$E_0(\mathbf{k}) = \frac{E_G}{2} \left(1 + \frac{2}{m} \frac{\hbar^2 k^2}{E_G} \right)^{1/2} - \frac{E_G}{2}, \quad (4.2)$$

$$E'_0(\mathbf{k}) = -\frac{E_G}{2} \left(1 + \frac{2}{m} \frac{\hbar^2 k^2}{E_G} \right)^{1/2} - \frac{E_G}{2}, \quad (4.3)$$

这是同一解析函数之两叶. 我們知道, Ge 的导带 \$(0, 0, 0)\$ 谷有效质量是各向同性的, 等于 \$0.038 m_e\$; 輕空穴带之有效质量是 \$0.042 m_e\$. (4.2) 与 (4.3) 相当于认为它們是同样的, 并完全略去了輕空穴带的扭曲性. 导带底的有效质量是各向异性的. 为簡單起見, 設結場沿有效质量张量的一个主軸方向:

$$E_j(\mathbf{k}_j) = \frac{\hbar^2}{2m_x} k_{jx}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y} k_{jy}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z} k_{jz}^2, \quad (4.4)$$

从 (3.16), (3.28), 得到

$$\text{Im} k_x(x) = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{E_G} \right)^{1/2} \{ [E_G - (\phi(x) + \Delta - E)] [\phi(x) + \Delta - E] +$$

$$+ E_G E_{\perp i}\}^{1/2}, \quad (4.5)$$

$$\text{Im} k_{jx}(x) = \left(\frac{2m_x}{\hbar^2} \right)^{1/2} (\phi(x) + E_{\perp i} - E)^{1/2}, \quad (4.6)$$

其中

$$E_{\perp} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + k_z^2), \quad (4.7)$$

$$E_{\perp i} = \frac{\hbar^2}{2m_y} k_{iy}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_x} k_{iz}^2. \quad (4.8)$$

代入(3.33)得到 x_0 点由下列方程决定:

$$\phi(x_0) + \Delta - E = \frac{E_G}{2} \left\{ \left[(K-1)^2 + \frac{4K}{E_G} \Delta + \frac{4}{E_G} (E_{\perp i} - KE_{\perp i}) \right]^{1/2} - (K-1) \right\}, \quad (4.9)$$

其中 $K = m_x/m$ 是导带底有效质量与 $(0, 0, 0)$ 谷有效质量的比. 把(4.9)式对 $E_{\perp}, E_{\perp i}$ 展开到一級, 得到

$$\phi(x_0) + \Delta - E \approx V + b(E_{\perp} - KE_{\perp i}), \quad (4.10)$$

其中

$$V = \frac{E_G}{2} \left\{ \left[(K-1)^2 + \frac{4K\Delta}{E_G} \right]^{1/2} - (K-1) \right\}, \quad (4.11)$$

$$b = \left((K-1)^2 + \frac{4K}{E_G} \Delta \right)^{-1/2}. \quad (4.12)$$

表 III 列出对于不同的 K 按 (4.11)(4.12) 计算得的 V 与 b 的值. $V - \Delta$ 是表示一横向波矢为 0 的电子, 在穿入禁带多深后就转变为 $(0, 0, 0)$ 谷的态. 计算时选用相应于 Ge 的参数: $E_G = 0.8\text{ev}$ $\Delta = 0.14\text{ev}$.

表 3 V, b , 与 $V - \Delta$ 的值

K	b	$V (10^{-1}\text{ev})$	$V - \Delta (\text{ev})$
2	0.646	2.22	0.082
4	0.291	1.74	0.034
6	0.185	1.62	0.022
8	0.135	1.56	0.016
10	0.106	1.52	0.012

K 的不同取值, 其实代表了不同的晶体方向. 从表 3 看到, 在 Ge 的导带底, 如选有效质量最小的方向 $K = 2$, 穿入禁带不到 0.1 ev 就到达 x_0 点. K 愈大, x_0 点相应于禁带中的深度愈浅.

把(4.5)、(4.6)、(4.10)代入(4.1), 略去指数前各因子与 $E, k_{iy}, k_{iz}, k_x, k_y$ 的关系, 利用(4.7)、(4.8)把对 k_{iy}, k_{iz}, k_y, k_x 的积分换为对 $E_{\perp}, E_{\perp i}$ 的积分, 得到

$$I = L_y L_z \rho \lambda^2 \frac{\pi^{3/2}}{2^{6-\frac{1}{4}}} \frac{m^{7/4} (m_y m_x)^{1/2}}{\hbar^{13/2} (V - \Delta)^{3/4}} \cdot \frac{1}{K^{5/4}} \frac{E_G}{E_G - 2V} \cdot \left[\frac{KE_G}{(K-1)E_G + 2V} \right]^{1/2} \times \\ \times \left(\frac{d\phi(x_0)}{dx} \right)^{-1/2} \int dE [f_c(E) - f_v(E)] P(E, E_{\perp}, E_{\perp i}) dE_{\perp} dE_{\perp i}, \quad (4.13)$$

$$P(E, E_{\perp}, E_{\perp i}) = \exp \left\{ -2 \int_{x_0}^{x_0} \text{Im} k_{jx}(x, k_{iy}, k_{iz}) dx - 2 \int_{x_0}^{x_0} \text{Im} k_x(x, k_y, k_z) dx \right\}. \quad (4.14)$$

如果我们认为势垒电场是常数, $\frac{d\phi(x)}{dx} = F$. 把(4.5)、(4.6)代入(4.14), 得到

$$P(E, E_{\perp}, E_{\perp z}) = \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2}}{\hbar F} m^{1/2} \left[K^{1/2} \int_{E-E_{\perp j}}^{\phi(x_0)} (\phi + E_{\perp j} - E)^{1/2} d\phi + \int_{\phi(x_0)}^{\phi(x_0')} \left\{ \frac{1}{E_G} \times \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times (E_G - \Delta + E - \phi)(\Delta + \phi - E) + E_{\perp} \right\}^{1/2} d\phi \right] \right\}. \quad (4.15)$$

完成这些积分, 并把它們对 $E_{\perp}, E_{\perp j}$ 展开到一次, 得到

$$P(E, E_{\perp}, E_{\perp z}) = \exp \left\{ -\frac{m^{1/2}}{\hbar F} \cdot \left[\frac{4}{3} \sqrt{2} K^{1/2} (V - \Delta)^{3/2} + \frac{E_G^{3/2}}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{2} + \sin^{-1} \frac{E_G - 2V}{E_G} \right) \right] \right\} \exp(-E_{\perp z}/\bar{E}_{\perp z}) \exp(-E_{\perp}/\bar{E}_{\perp}), \quad (4.16)$$

$$\bar{E}_{\perp j}^{-1} = \frac{2\sqrt{2}}{\hbar F} m^{1/2} \left\{ bK \left(\frac{E_G}{4} - \left(\frac{E_G}{2} - V \right)^2 \frac{1}{E_G} \right)^{1/2} + \frac{2}{3} (1 - bK) (V - \Delta)^{1/2} \right\}, \quad (4.17)$$

$$\bar{E}_{\perp}^{-1} = \frac{2\sqrt{2}}{\hbar F} m^{1/2} \left\{ \frac{2}{3} b(V - \Delta)^{1/2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2} + \sin^{-1} \frac{E_G - 2V}{E_G} \right) E_G^{1/2} - b \left(\frac{E_G}{4} - \left(\frac{E_G}{2} - V \right)^2 \frac{1}{E_G} \right)^{1/2} \right\}. \quad (4.18)$$

代入电流表达式(4.13), 得到

$$I = L_y L_z \rho \lambda^2 \frac{\pi^{3/2}}{2^{6-1/4}} \frac{m^{7/4} (m_y m_z)^{1/2}}{\hbar^{13/2} (V - \Delta)^{3/4}} \frac{1}{K^{5/4}} \frac{E_G}{E_G - 2V} \left(\frac{KE_G}{(K-1)E_G + 2V} \right)^{1/2} \frac{D}{F^{1/2}} \times \\ \times \int dE [f_c(E) - f_v(E)] \exp \left\{ -\frac{E_{\perp j}}{\bar{E}_{\perp j}} - \frac{E_{\perp}}{\bar{E}_{\perp}} \right\} dE_{\perp j} dE_{\perp}, \quad (4.19)$$

其中

$$D = \exp \left\{ -\frac{m^{1/2}}{\hbar F} \left(\frac{4}{3} \sqrt{2} K^{1/2} (V - \Delta)^{3/2} + \frac{E_G^{3/2}}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{2} + \sin^{-1} \frac{E_G - 2V}{E_G} \right) \right) \right\}. \quad (4.20)$$

按与表 3 同样的参量, 计算得 D 指数上的因子, 和 $\bar{E}_{\perp j}, \bar{E}_{\perp}$ 的值列于表 4. 其中, 令 $D = \exp(-A/F)$, $\bar{E}_{\perp j} = BF$, $\bar{E}_{\perp} = CF$. 为计算方便起见, 在表中 A 的值是相应于 F 取绝对单位的. B, C 的值是相应于 F 取电子伏/厘米的单位和 $\bar{E}_{\perp j}, \bar{E}_{\perp}$ 取电子伏为单单位.

表 4.

K	A	B	C
2	6.68×10^{-6}	1.06×10^{-7}	6.31×10^{-3}
4	6.64×10^{-6}	1.17×10^{-7}	5.43×10^{-3}
6	6.67×10^{-6}	1.27×10^{-7}	5.16×10^{-3}
8	6.66×10^{-6}	1.30×10^{-7}	5.10×10^{-3}
10	6.66×10^{-6}	1.33×10^{-7}	4.68×10^{-3}

由此可见, 电流各参量随 K 的变化是很小的. 这就是说, 虽然导带底的各向异性是严重的, 但二级杂质-隧道过程却是几乎各向同性的, 其物理原因是很明显的, 在表 1 中我們已

看到, K 愈大, x_0 点愈浅, 即杂质-隧道的电子以导带底的态来穿行禁带的阶段愈短; 而我們知道 $(0, 0, 0)$ 谷是各向同性的。

利用(4.19), 在绝对零度时, 如 $\rho = 10^{19}$ 厘米 $^{-3}$, $\lambda = 2.5 \times 10^{-31}$, 可估計得电流密度 $J \sim 3.5$ 安培/厘米 2 , 这符合一般实验值的数量级。在本工作的第 II 部分中¹⁾, 我們得到 Ge 中声子-隧道电流的表达式。它与杂质-隧道电流的比是

$$\frac{J_{\text{声}}}{J_{\text{杂}}} \approx \frac{1}{4} \frac{c^2 Q}{\rho \lambda^2} \frac{(n+1)D^+ + nD^-}{D},$$

其中 $c^2 Q$ 是电子声子作用矩阵元的平方, n 是平均声子密度, D^+ , D^- 的定义可看(II), 大致上 $\frac{(n+1)D^+ + nD^-}{D}$ 是一个与 1 同数量级的数。因此, $J_{\text{声}}/J_{\text{杂}}$ 主要决定于 $\frac{c^2 Q}{\rho \lambda^2}$ 。象在引言中已指出的, 当掺杂浓度达到 10^{19} 厘米 $^{-3}$ 时, 这个比接近于 1 或大于 1。所以掺杂达到 10^{19} 后, 声子-隧道电流与杂质-隧道电流可比拟。不同的杂质, λ^2 不同, 杂质-隧道电流的比重不同。象在引言中已指出的, As 和 P 的 λ^2 值可能比 Sb 的大 1—2 个数量级, 所以掺 As 和 P 的隧道二极管中杂质-隧道电流成为主要的。

V. 結 語

在这项工作中, 我們先是从实验事实的分析说明, 鍺中可能存在着相当显著的由于杂质散射而引起的隧道电流。它联系着杂质的近程原子场, 不同种类的杂质的这个作用是显著不同的; As 最强, P 次之, Sb 最弱。

其次我們说明鍺中杂质-隧道过程是一个二级过程, 在第 II 和第 III 节提供了处理它的理論方法; 分析了过程的物理图象; 以及确定了对这过程有贡献的杂质的分布范围。在第 IV 节中就一个具体模型的电流计算说明, 这部分电流几乎是各向同性的; 当掺杂达到 10^{19} 厘米 $^{-3}$ 后, 它与声子-隧道电流可以比拟。

为了处理这个过程, 我們在附录 II 中给出了直接隧道过程理論的一个新形式。它严格证明了跃迁的观点与准古典位垒穿透的观点的一致性。并且作为理論方法本身有很大的方便。

本工作是在黄昆教授指导下完成的, 韓汝琦, 强元桀, 张綺香等同志曾参加討論这项工作, 作者在此一并致謝。

附录 I. 一般势场与一般能量表示式下的准古典近似解

在这附录中, 給出一般的能量动量关系式下, 在任意形式的位场中准古典近似的論証。当能量对动量的关系是抛物綫型的二次式时, 一般量子力学教科书中对任意位垒作了証明。在任意形式的 $E(k)$, 但势场是綫性的情况下, 凱因⁽¹⁸⁾也已經証明了它。

在以布洛赫波为基的表象上, 略去势场的带間作用, 薛丁格方程是(一維的):

$$(E - E(k))a(k) - \sum_q \langle k | \phi | k - q \rangle a(k - q) = 0, \quad (\text{I.1})$$

近似地,

1) 見本期“Ge 中隧道电流过程的理論(II)——声子-隧道电流”一文。在本文中用(II)表示它。

$$\langle k|\phi|k-q\rangle = \phi(q) = \frac{1}{v} \int e^{-iq \cdot x} \phi(x) dx. \quad (\text{I.2})$$

当位场变化是缓慢的时候, $\phi(q)$ 只对较小的 q 有显著的值¹⁾. 令

$$a(k) = e^{-is(k)}, \quad (\text{I.3})$$

代到(I.1)中, 并由于 q 较小, 作下列展开:

$$S(k-q) = S(k) - q \frac{ds}{dk} + \frac{1}{2} q^2 \frac{d^2s}{dk^2} \quad (\text{I.4})$$

逐级近似解(I.1). 零级近似只取到 q 的一次项, 得到

$$e^{-is(k)} \left(E - E(k) - \sum_q \phi(q) e^{i \frac{ds(k)}{dk} q} \right) = 0 \quad (\text{I.5})$$

按(I.4)

$$\sum \phi(q) e^{iq \frac{ds}{dk}} = \phi \left(\frac{ds}{dk} \right), \quad (\text{I.6})$$

$\phi \left(\frac{ds}{dk} \right)$ 是在 $\phi(x)$ 中把 x 代以 $\frac{ds}{dk}$ 之意. 这样得到

$$E - E(k) - \phi \left(\frac{ds}{dk} \right) = 0, \quad (\text{I.7})$$

解(I.7)得到 ds/dk 作为 k 的函数, 记作

$$\frac{ds}{dk} = x(k), \quad (\text{I.8})$$

则零级解是

$$a^{(0)}(k) = e^{-i \int^k x(k) dk} \quad (\text{I.9})$$

进一步近似, 把(I.4)之二次项代入, 作下面近似:

$$\sum_q \phi(q) e^{iq \frac{ds}{dk}} e^{-i \frac{1}{2} \frac{d^2s}{dk^2} q^2} \approx \sum_q \phi(q) e^{iq \frac{ds}{dk}} \left(1 - \frac{i}{2} \frac{d^2s}{dk^2} q^2 \right), \quad (\text{I.10})$$

注意 $\phi''(x)$ 之傅氏分量是 $-q^2 \phi(q)$, 则(I.10)等于

$$\phi \left(\frac{ds}{dk} \right) + \frac{i}{2} \frac{d^2s}{dk^2} \phi'' \left(\frac{ds}{dk} \right), \quad (\text{I.11})$$

代入(I.1), 得到

$$E - E(k) - \phi \left(\frac{ds}{dk} \right) - \frac{i}{2} \frac{d^2s}{dk^2} \phi'' \left(\frac{ds}{dk} \right) = 0. \quad (\text{I.12})$$

令 $ds/dk = x(k) + \frac{ds^{(1)}}{dk}$, $x(k)$ 是(I.8)求出的. 再根据 $\phi(x)$ 变化缓慢, ϕ'' 很小,

$\phi'' \left(\frac{ds}{dk} \right) \approx \phi''(x(k))$, 代入(I.12)得到

1) 对我们的问题, 位垒场总可取成这样, 当 $x < 0$ 时, $\phi(x) = 0$; $x > 0$ 时, $\phi(x)$ 不为 0, 逐渐变到一常数 V_0 .

这样的位垒的 $\phi(q)$ 一般可以表达为 $\phi(q) = \frac{V_0}{2\pi i} \frac{1}{q - i\varepsilon} + v(q)$, $\varepsilon \rightarrow +0$. 其中第一项是一方形势垒, $x < 0$ 时为 0, $x > 0$ 时是 V_0 . 第二项是实际势垒与这方形势垒的差别. 我们实际上是要求 $v(q)$ 只对较小的 q 有显著值. 第一项在解积分方程(I.1)时是容易归并到等式左边第一项中的, 用奇性积分方程的方法很易论证这点. $v(q)$ 只对 q 较小时有显著值相当于要求 $\phi(x)$ 随 x 改变是缓慢的.

$$\frac{ds^{(1)}}{dk} = -\frac{i}{2} \frac{dx(k)}{dk} \frac{d}{dx} \ln(\phi'(x(k))), \quad (\text{I.13})$$

解之,得到一級解為

$$a(k) = \frac{1}{[\phi'(x(k))]^{1/2}} e^{-i \int^k x(k) dk}, \quad (\text{I.14})$$

相應的有效質量波函數為

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} \frac{1}{[\phi'(x(k))]^{1/2}} e^{-i \int^k x(k) dk} dk. \quad (\text{I.15})$$

用鞍點法近似求積,鞍點是由

$$x(k) = x \quad (\text{I.16})$$

決定。這相當說鞍點的 $k(x)$ 是滿足

$$E - E(k) - \phi(x) = 0 \quad (\text{I.17})$$

的准古典波矢。按(I.7)可見

$$\frac{dx(k)}{dk} = -\frac{dE(k)}{dk} (\phi'(x(k)))^{-1}. \quad (\text{I.18})$$

代入(I.15)之鞍點積分,并把 $\int^k x(k) dk$ 分部積分,就得到

$$f(x) = \frac{A\pi^{-1/2}}{(\partial E(k)/\partial k(x))^{1/2}} \exp \left\{ i \int^x k(x) dx \right\}. \quad (\text{I.19})$$

$k(x)$ 由(I.17)決定, A 由相應邊界值要求決定。例如,如要求電子在 $x \rightarrow -\infty$ 時是一個平面波,則

$$f(x) = \frac{(\partial E/\partial k)_{-\infty}^{1/2}}{(\partial E/\partial k(x))^{1/2}} \exp \left(i \int^x k(x) dx \right). \quad (\text{I.20})$$

我們以(4.2)、(4.3)的帶模型為例看一下准古典解的性質。 $E(k) = -\frac{E_G}{2} \pm \frac{E_G}{2} \times \left(1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{mE_G} \right)^{1/2}$ 。當用導帶布洛赫組成狀態時,取這函數的正葉。准古典波矢 $k(x)$ 滿足方程:

$$\frac{E_G}{2} \left(1 + \frac{4}{E_G} E_{\perp} + \frac{2\hbar^2}{mE_G} k_x^2 \right)^{1/2} - \frac{E_G}{2} + \phi(x) = E, \quad (\text{I.21})$$

它只有當 $\phi(x) \leq \frac{E_G}{2} + E$ 時是有解的。 $\phi(x) - E = \frac{E_G}{2}$ 處,准古典波矢是

$$k_x = i \left(\frac{mE_G}{2\hbar^2} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{4E_{\perp}}{E_G} \right)^{1/2}, \quad (\text{I.22})$$

正是 $E(k_x)$ 函數的連結兩葉的分支點。當 $\phi(x) - E > \frac{E_G}{2}$ 時,只有取另一葉(即負葉)才有解。這就是說,在轉換點的左邊,是用導帶來組成准古典解的,在右邊是用價帶來組成准古典解的。在這意義下,這兩個准古典解甚至沒有重迭,所以處理這兩個准古典解之間的躍遷必須用附錄 II 的方法。

附录 II. 直接隧道跃迁的一般理论新形式

这里导出一在任意形状位场下直接隧道跃迁的理论。过去凯尔迪什^[1]和凯因^[18]都是在线性位场下得到的,并且都是在动量空间波函数上进行的。这里将用有效质量波函数来表达它。

在位场 $\phi(x)$ 下,晶体中电子运动的薛丁格方程是

$$[E - H_0 - \phi(\mathbf{x})]\psi(\mathbf{x}) = 0, \quad (\text{II.1})$$

H_0 是电子在晶体周期场中之哈密顿量。以后认为 $\phi(\mathbf{x})$ 只是 x 坐标的函数。我们用亚丹姆斯(Adams)^[19]所提出的准动量表象,即以所有带的全部布洛赫函数为基的表象。每个基有两个标号, n 标志所属的带, $\mathbf{k}$ 标志其波矢。在这表象中, H_0 是对角算符, $E(\mathbf{k})\delta_{nn'}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, x 在这表象中成为算符:

$$x = \hat{x} + \hat{X}, \quad (\text{II.2})$$

其中

$$\hat{x} = -i \frac{\partial}{\partial k_x} \delta(k - k') \delta_{nn'}, \quad (\text{II.3})$$

$$\hat{X} = \delta_{kk'} X_{nn'}(k), \quad (\text{II.4})$$

$$X_{nn'}(k) = \int_{\Omega} d\tau u_{n'k}^* i \frac{\partial}{\partial k_x} u_{nk}, \quad (\text{II.5})$$

u_{nk} 是布洛赫函数之周期部分。亚丹姆斯在[19]中采用时序算符的方法,展开了任一函数 $f(x)$ 在准动量表象中的形式。在这里利用他的方法来求带间跃迁问题。设

$$\phi(x) = \sum_q \phi(q) e^{iqx}, \quad (\text{II.6})$$

展开 e^{iqx} :

$$\begin{aligned} e^{iqx} &= e^{iq(\hat{x} + \hat{X})} \\ &= \left[1 + i \int_0^1 ds e^{iqs\hat{x}} q \hat{X} e^{-iqs\hat{x}} + \frac{(i)^2}{2} \int_0^1 ds \int_0^s ds' e^{iqs'\hat{x}} q \hat{X} e^{-iqs'\hat{x}} \right. \\ &\quad \left. \cdot e^{iqs\hat{x}} q \hat{X} e^{-iqs\hat{x}} + \dots \right] e^{iq\hat{x}}, \end{aligned} \quad (\text{II.7})$$

只取到一级的带间项,得到

$$e^{iqx} \approx e^{iq\hat{x}} + i \int_0^1 ds q \hat{X} (k - sq) e^{iq\hat{x}}. \quad (\text{II.8})$$

这样,在准动量表象中,方程(II.1)的零级方程(0—级是指略去势场的带间作用,即 $e^{iqx} \approx e^{iq\hat{x}}$)是

$$\left(E - E_n(k) - \sum_q \phi(q) e^{iq\hat{x}} \right) a_n(k) = 0, \quad (\text{II.9})$$

或

$$(E - E_n(k)) a_n(k) - \sum_q \phi(q) a_n(k - q) = 0. \quad (\text{II.10})$$

具体说,对导带和价带是

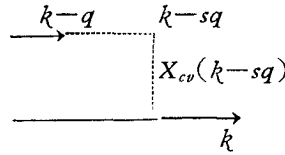
$$(E - E_0(k)) a_0(k) - \sum_q \phi(q) a_0(k - q) = 0, \quad (\text{II.11})$$

$$(E - E'_0(k))a'_0(k) - \sum_q \phi(q)a'_0(k-q) = 0, \quad (\text{II.12})$$

這兩個方程的近似解是附錄 I 中討論過的。現在我們考慮一級的帶間項，把它當做微擾來求位壘場所引起的帶間躍遷。由(II.6)與(II.8)得到位場 $\phi(x)$ 的一級帶間項是

$$-i \sum_q \phi(q) \int_0^1 q X_{cv}(k-sq) ds e^{iqk}, \quad (\text{II.13})$$

它有很明顯的物理意義，注意到 e^{iqk} 作用到 $a(k)$ 上是把它變到 $a(k-q)$ ，則(II.13)可以圖示如下：



$$(\text{II.13}')$$

導帶電子在導帶中由 $k-q$ 變到 $k-sq$ ，經帶間作用到價帶，然後在價帶中由 $k-sq$ 變到 k 。對 s 的積分是相應於對所有可能的帶間過渡點求和。由(II.13)可得帶間躍遷矩陣元：

$$M = -i \sum_q \phi(q) q \int_0^1 ds \sum_k a_0^*(k) X_{cv}(k-sq) a'_0(k-q). \quad (\text{II.14})$$

引入“有效質量波函數”：

$$f_0(x) = \sum_k a_0(k) e^{ikx}, \quad (\text{II.15})$$

$$f'_0(x) = \sum_k a'_0(k) e^{ikx}, \quad (\text{II.16})$$

代入(II.14)，得到

$$M = -i \sum_q q \phi(q) \int dx dx' f_0^*(x) f'_0(x') \int_0^1 ds e^{iqx' + isq(x-x')} \times \\ \times \sum_k X_{cv}(k-sq) e^{i(k-sq)(x-x')}, \quad (\text{II.17})$$

定義

$$X_{cv}(x) = \sum_k e^{ikx} X_{cv}(k), \quad (\text{II.18})$$

代入(II.15)，就得到

$$M = -i \int dx dx' f_0^*(x) f'_0(x') X_{cv}(x-x') \sum_q \phi(q) q e^{iqx'} \int_0^1 ds e^{isq(x-x')} \\ = -i \int dx dx' f_0^*(x) f'_0(x') X_{cv}(x-x') \frac{1}{x-x'} \sum_q \phi(q) (e^{iqx} - e^{iqx'}) \\ = -i \int dx dx' f_0^*(x) X_{cv}(x-x') \frac{\phi(x) - \phi(x')}{x-x'} f'_0(x'). \quad (\text{II.19})$$

(II.19)是一普遍的表达式，它沒有對 $\phi(x)$ 作任何限制，也沒有對 f_0, f'_0 的近似有什麼要求。它所要用到的只是有效質量波函數，這是對解決具體問題很方便的。

設想 $X_{cv}(k)$ 是一與 k 無關的常數 X ，則

$$X_{cv}(x) = X\delta(x), \quad (\text{II.20})$$

代入得

$$M = -i \int dx f_0^*(x) X \frac{d\phi}{dx} f_0'(x'), \quad (\text{II.21})$$

这是一个最容易想到的形式。

但正如凯尔迪什^[1]所强调指出的，要正确反映直接过程不能不考虑 $X_{cv}(k)$ 随 k 的变化。他从布洛赫函数的解析性出发，证明了当把导带与价带看作解析函数 $E(k)$ 的不同的叶时，联结这两叶的分支点 k_q 是 $X_{cv}(k)$ 的极点，一般是一阶极点；在 k_q 点近旁：

$$X_{cv}(k) \approx \frac{1}{4} \frac{1}{k - k_q}. \quad (\text{II.22})$$

假使容许带宽度大大大于禁带宽度，分支点 k_q 很靠近实轴，并且根据 k 与 k^* 上的性质应是一样的。我们可以近似地认为¹⁾

$$X(k) = \frac{1}{2} \frac{q}{k^2 + q^2}, \text{ 其中 } k_q = iq, \quad (\text{II.23})$$

则得

$$X_{cv}(x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{q}{q^2 + k^2} dk = \frac{\pi}{2} e^{-q|x|}, \quad (\text{II.24})$$

代入得

$$M = -i \int dx dx' \frac{\pi}{2} e^{-q|x-x'|} \frac{\phi(x) - \phi(x')}{x - x'} f_0^*(x) f_0'(x'). \quad (\text{II.25})$$

把附录 I 中解得的准古典波函数(I.19), (I.20)代入：

$$M = -i \left(\frac{\partial E_0}{\partial k_x} \right)_{-\infty} \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k_x} \right)_{+\infty} \int dx dx' \frac{1}{\left(\frac{\partial E_0}{\partial k(x)} \right)^{1/2} \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k'_x(x')} \right)^{1/2}} \times \\ \times \frac{\phi(x) - \phi(x')}{x - x'} \frac{\pi}{2} e^{-q|x-x'|} \exp \left\{ - \int_{x_c}^x \text{Im} k(x) dx - \int_{x'}^{x_v} \text{Im} k'(x) dx \right\}. \quad (\text{II.26})$$

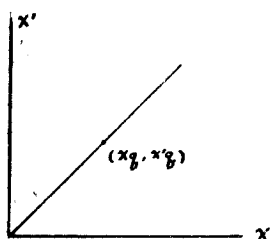


图 II.1

这个二重积分，可用鞍点法近似求积，引入转换点 x_q ，它是满足

$$E - E_0(k_q) - \phi(x_q) = 0 \quad (\text{II.27})$$

的点。它的具体涵义在正文第三节中谈过了。

$$x = x' = x_q \quad (\text{II.28})$$

是这二重积分的鞍点（见图 II.1）。在这点展开指数上的项，注意到附录 I 末尾所谈到的情况，积分只对 $x - x'$ 平面的一半进行（ $-\infty < x < x_q$ $x_q < x' < +\infty$ ）。利用

$$\frac{dk(x)}{dx} = - \frac{d\phi(x)}{dx} / \frac{\partial E}{\partial k(x)},$$

1) 为了验证这假设是否较近似，让我们对 Ge 的情况具体验证一下，应用(4.2)和相应的参量。可得由价带顶到导带(0,0,0)极值之偶极矩阵元， $|P_{cv}(0)|^2 = \left| \frac{m}{\hbar} E_{GXCv}(0) \right|^2 \approx 1.5 \times 10^{-38}$ ，而迴旋共振定得的参量^[20]： $F = \frac{\hbar^2}{m_e^2} \frac{|P_{cv}(0)|^2}{E_G}$ ，在 Ge 中是 $28.6 \frac{\hbar^2}{2m}$ ，从而估计得 $|P_{cv}(0)|^2 \approx 1.67 \times 10^{-38}$ ，与上面的估计符合得相当好。

則可求得躍遷矩陣元：

$$M \approx -i \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{\partial E_0}{\partial k_x} \right)_{-\infty}^{1/2} \left(\frac{\partial E'_0}{\partial k'_x} \right)_{+\infty}^{1/2} \exp \left\{ - \int_{x_c}^{x_q} \text{Im} k(x) dx - \int_{x_q}^{x_v} \text{Im} k'(x) dx \right\}. \quad (\text{II.29})$$

如同在正文第二節所討論的，這結果就象一般准古典位壘穿透的觀點一樣。

附錄 III. 雜質對穿透電子、空穴的庫倫作用的影响的估計

首先說明這作用的來源，我們知道 $P-N$ 結勢壘是由電離雜質中心的庫倫作用產生的。但我們在處理時是把電離雜質看作是均勻分布的體電荷。所以實際上位壘是庫倫作用的長程作用的平均效果。每一雜質中心還有“短程的”庫倫作用。平均說，可以認為位壘作用是庫倫勢中大于平均半徑 $r_s \left(\left(\frac{4}{3} \pi r_s^3 \right)^{-1} = \rho \right)$ 的長距離作用而產生的。每一雜質中心實際是一“庫倫穴”，可以表達其位場如下（以這個雜質作座標原點）：

$$\begin{aligned} v &= \frac{A}{r} - \frac{A}{r_s} + \phi(x), \quad r < r_s, \\ &= \phi(x), \quad r > r_s, \end{aligned} \quad (\text{III.1})$$

其中 $A = \frac{\pm e^2}{\epsilon}$ 對空穴取正號，對電子取負號。這作用將會影响在雜質近旁的電子波函數。因此對雜質短程原子場的散射会有影响。它对導帶穿來的電子有吸引作用；對價帶穿進來的空狀態（空穴）有排斥作用。這里想對這影响作一粗略的估計，估計結果說明它是不大的。

首先估計由於這個作用使雜質中心處波函數的值的改變。也就是估計考慮這個作用時 $r=0$ 處波函數與未考慮這個作用時的波函數的比 A_0 ，然後再估計這作用在二級過程中的影响。

略去勢壘在 $r \leq r_s$ 內的变化，為簡單起見，設 $E(k)$ 是二次拋物綫性的，有效質量各向同性。則得到 $r < r_s$ 時，電子波動方程是

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \left(\phi(0) - \frac{A}{r_s} \right) + \frac{A}{r} \right\} \psi(r) = E \psi(r), \quad (\text{III.2})$$

引入

$$q = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (\phi(0) - E) \right]^{1/2}, \quad (\text{III.3})$$

$$q' = \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\phi(0) - E - \frac{A}{r_s} \right) \right]^{1/2}, \quad (\text{III.4})$$

可得

$$\psi(r) = \sum_l A_l P_l(\cos \theta) \frac{1}{r} \text{Re}(r), \quad (\text{III.5})$$

其中

$$\text{Re}(r) = r^{l+1} e^{-q'r} F \left(l+1 + \frac{mA}{\hbar^2 q'} \mid 2l+2 \mid 2q'r \right), \quad (\text{III.6})$$

$F(a \mid b \mid z)$ 是退化超比級數。注意到

$$\left(\frac{1}{r} \text{Re}(r) \right)_{r=0} = 0, \quad l > 0; \quad \left[\frac{1}{r} \text{Re}(r) \right]_{r=0} = 1, \quad (\text{III.7})$$

可見只要定出 A_0 就可以定出 A .

$r > r_s$ 时, 有一入射波与一庫仑穴的散射波, 入射波在 $r \approx r_s$ 附近的近似表达式为

$$\psi_{\text{入射}} = e^{-qr \cos \theta}, \quad (\text{III.8})$$

它在 $r = 0$ 时等于 1, 这样定出的 A_0 就是 A .

散射波的边界条件是 $r \rightarrow \infty$ 时趋于零. 取入射波与散射波的 s 波,

$$\psi_{\text{散}}^{(s)} = \frac{1}{2qr} e^{qr} - \frac{b}{2qr} e^{-qr}, \quad (\text{III.9})$$

q 的定义見(III.3), b 待定. 球內的 s 波是

$$\psi_{\text{球}}^{(s)} = A_0 e^{-q'r} F(1 + \alpha |2|2q'r), \quad (\text{III.10})$$

其中

$$\alpha = mA/\hbar^2 q'. \quad (\text{III.11})$$

用 $r = r_s$ 处波函数及其微商連續的条件, 得到

$$A = A_0 = \frac{2q}{\frac{f_3}{f_1} \left(q + \frac{1}{r_s} \right) + \frac{f'_3}{f_1}}, \quad (\text{III.12})$$

其中

$$f_1 = \frac{e^{qr_s}}{2qr_s}, \quad (\text{III.13})$$

$$f_3 = e^{-q'r_s} F(1 + \alpha |2|2q'r_s), \quad (\text{III.14})$$

$$f'_3 = -q'f_3 + q'(1 + \alpha)e^{-q'r_s} F(2 + \alpha |3|2q'r_s). \quad (\text{III.15})$$

下表給出 A_0 的估計值, 計算中用了魏伯(Webb)的退化超比級数的数值表^[21]插值, 大致可估計誤差发生在第二位上. 由于估計說明影响不大, 所以我們也沒兴趣作更准确的計算了.

表 III.1 A_0 值 ($x = 2q'r_s$, A_0^+ 是 $\alpha = |\alpha|$ 的值, A_0^- 是 $\alpha = -|\alpha|$ 的值)

x	1	2	3	4	5	6	8
$ \alpha = 0.1$							
A_0^-	1.07	1.09	1.17	1.21	1.26	1.26	1.27
A_0^+	0.93	0.90	0.85	0.82	0.80	0.81	0.71
$ \alpha = 0.2$							
A_0^-	1.13	1.22	1.31	1.36	1.43	1.52	1.42
A_0^+	0.89	0.84	0.78	0.76	0.72	0.71	0.65
$ \alpha = 0.35$							
A_0^-	1.31	1.59	1.84	1.98	2.23	2.49	2.52
A_0^+	0.78	0.66	0.60	0.55	0.51	0.47	0.41

在我們的問題中, 可估計得 $|\alpha|$ 一般小于 0.3. x 大致是 2—5 之間, 由此可見, A 值对电子来說是 1~2 之間; 对空穴是 0.5~1 之間; 浓度愈大 (r_s 愈小) 或穿进禁带愈深, A 愈接近于 1.

下面估計对二級过程的影响. 要考虑的是方程(見(2.19))是

$$\left[E - \left(\frac{p^2}{2m} + \phi(0) - \frac{A}{r_s} + \frac{A}{r} \right) \right] \psi(r) = B\delta(\mathbf{r}), \quad r < r_s,$$

$$\left[E - \left(\frac{p^2}{2m} + \phi(0) \right) \right] \psi(r) = 0, \quad r \gtrsim r_s, \quad (\text{III.16})$$

$\psi(r)$ 用球函数展开. 注意只有 s 波的方程是非齐次的. 引入 $R = \frac{1}{r} R_0$, 則問題成为要解

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} - q'^2 R - \frac{2mA}{\hbar^2} \frac{1}{r} R &= \frac{2m}{\hbar^2} B \frac{\delta(r)}{r^2}, \quad r < r_s, \\ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} - q^2 R &= 0, \quad r \gtrsim r_s, \end{aligned} \quad (\text{III.17})$$

q, q' 的定义如(III.3)(III.4). 我們关心的是它在 $r > r_s$ 时的解. 按照一般作格林函数的方法^[17], 我們的问题归结为求齐次方程的两相互独立的解 $u_1(r)$ 和 $u_2(r)$. u_1 当 $r \rightarrow \infty$ 时趋于零. u_2 满足 $u_2(0)$ 有限. 而(III.17)的解是

$$R = \frac{u_2(0)u_1(r)}{(r^2 \Delta(u_1 u_2))_{r \rightarrow 0}} \cdot \frac{2mB}{\hbar^2}, \quad (\text{III.18})$$

其中 $\Delta(u_1, u_2)$ 是 u_1, u_2 的伏朗基(Wronskian)行列式. 从(III.17)可見

$$\Delta(u_1(r), u_2(r)) = \frac{r_0^2}{r^2} \Delta(u_1(r_0), u_2(r_0)). \quad (\text{III.19})$$

(III.17)的齐次方程在 $r > r_s$ 时有两个独立的解: $\frac{e^{-qr}}{2qr}$ 和 $\frac{e^{qr}}{2qr}$. 所以伏朗基行列式是

$\Delta(r) = \frac{1}{r^2} (r \geq r_s)$, 利用(III.19), 代入(III.18), 得到

$$R = \frac{2m}{\hbar^2} B u_1(r) u_2(0), \quad (\text{III.20})$$

$u_1(r)$ 是当 $r > r_s$ 时, 等于 $\frac{e^{-qr}}{2qr}$ 的解. u_2 是 $r \rightarrow 0$ 时有限的解. 当沒有“庫仑穴”存在时, $u_2(0) = 1$. 有“庫仑穴”时 $u_2(0)$ 的值就是前面估計过的 A . 所以, “庫仑穴”对散射出来的 $(0, 0, 0)$ 谷波的修正是乘上两个因子, 一是导带底穿透进来的波由于“庫仑穴”而引起的修正 (u_2 的修正). 一是用 $(0, 0, 0)$ 谷的态組成的向四周衰减的波 [(2.22)] 由于“庫仑穴”的修正. 从前面的估計看出这两个修正都是在 1—2 之間.

現在, 我們比較一下“庫仑穴”作用对一級杂质-隧道与二級杂质-隧道的影响. 对一級过程, 牽涉到的乃是穿到杂质上的电子波函数与空穴波函数. “庫仑穴”修正对电子的因子大于 1, 对空穴小于 1. 对二級过程, 如前所述, 两个因子都是对电子的, 都大于 1. 这就是說这作用有利于二級过程. 不过, 从前面数值估計看到, 这种有利影响是不大的, 是一个 1~4 的因子, 不是一个数量級的差別.

参 考 文 献

- [1] Кельдыш, Л. В., Ж.Э.Т.Ф., **33** (1957), 994; **34** (1958), 962.
- [2] Morgan, J. V. 等, *Phys. Rev. Lett.*, **3** (1959), 466.
- [3] Holonyak, N. 等, *Phys. Rev. Lett.*, **3** (1959), 167.
- [4] Furukawa, Y., *J. Phys. Soc. Japan*, **15** (1960), 730, 1130.
- [5] Furukawa, Y., *J. Phys. Soc. Japan*, **16** (1961), 687.
- [6] Bowers, R., *Phys. Rev.*, **108** (1957), 683.
- Pollock, M., *Phys. Rev.*, **111** (1958), 798.

- Goldberg, C., *Phys. Rev.*, **110** (1958), 1035.
 [7] Kohn, W., *Solid State Physics*, Vol. V. 257.
 [8] Журкий, Б. Г., *Физ. Тв. Тела.*, **III** (1961), 3509.
 [9] Logan, R. A., *J. Appl. Phys.*, **32** (1961), 130.
 [10] Fritzche, H., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 1120.
 [11] Custner, T. G., *Phys. Rev. Lett.*, **8** (1962), 14.
 [12] Price, P. J., *Phys. Rev.*, **104** (1956), 1223.
 [13] Weinreich, G., *Phys. Rev.*, **114** (1959), 33.
 [14] Mclean, T. P., *Progress in Semiconductors*, Vol. 5, 53.
 [15] Long, D., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 2025.
 [16] Dumke, W. P., *Phys. Rev.*, **118** (1959), 938.
 [17] Morse, P. M., Feshbach, H., *Method of theoretical physics*, part I.
 [18] Kane, E. O., *J. Phys. Chem. Solids*, **12** (1959), 181.
 [19] Adams, E. N., *J. Chem. Phys.*, **21** (1953), 2013.
 [20] Dresselhaus, G., *Phys. Rev.*, **98** (1955), 368.
 [21] Webb, H. A., *Phil. Mag.*, **36** (1918), 141.

THEORY OF TUNNELLING PROCESSES IN GERMANIUM TUNNEL DIODES (I)—IMPURITY-INDUCED CURRENT

KAN TZE-CHAO

(Department of Physics, Peking University)

ABSTRACT

A theory is proposed for the impurity-induced tunnelling current which apparently constitutes the major part of the current observed in As and P doped germanium tunnel diodes. The experimental valley-orbit splittings of various donors in germanium show that the short range atomic fields of As and P are many times stronger than that of Sb and, for doping levels above $10^{19}/\text{cm}^3$, can be equally or more effective in scattering than phonons. The possible mechanisms for tunnelling caused by impurity scattering are examined; it is found that owing to a special feature of the germanium band structure, namely, (0, 0, 0) conduction band minimum not too high and associated with a particularly small effective mass, a second order process via the (0, 0, 0) minimum should be the dominant process. A method for treating such a second order process is developed, which gives a clear quasi-classical picture of the tunnelling process: an electron tunnelling from a conduction band minimum, when reaching an optimum depth, is scattered into (0, 0, 0) states and proceeds thereon to the valence band maximum much as in direct tunnelling. An explicit expression for the current is obtained; the magnitude of the current is estimated and a comparison with a similar phonon-assisted current (see accompanying paper II) is made. It is also shown that despite the anisotropic nature of the conduction band minima, the second order current should be nearly direction-independent.