



Волков Ю.А., Тараканов И.А.

Радиационно-  
индуцированная  
проводимость в кремнии и  
оксиде кремния. Времена  
релаксации

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Волков Ю.А., Тараканов И.А. Радиационно-индуцированная проводимость в кремнии и оксиде кремния. Времена релаксации // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2013. № 84. 27 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-84>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**Ю.А. Волков, И.А. Тараканов**

**Радиационно-индуцированная  
проводимость в кремнии  
и оксиде кремния.  
Времена релаксации**

**Москва — 2013**

**Волков Ю.А., Тараканов И.А.**

Радиационно-индуцированная проводимость в кремнии и оксиде кремния.  
Времена релаксации

Рассчитаны времена релаксации за счет электрон-фононного взаимодействия в кремнии и оксиде кремния. Времена релаксации включают в себя упругое рассеяние на акустических фононах и неупругое рассеяние на оптических фононах. Для сравнения с уже имеющимися результатами зависимость частоты рассеяния от энергии получена как в приближении параболической зоны, так и с использованием данных о плотности электронных состояний в зоне проводимости. Частоты рассеяния на заряженных примесях (в сильно легированном кремнии) получены в приближении Конвелл-Вайскопфа.

**Ключевые слова:** групповая скорость, плотность электронных состояний, акустические и оптические фононы, частота электрон-фононного рассеяния

**Yuri Aleksandrovich Volkov, Ilya Alekseevich Tarakanov**

Radiation-induced conductivity in silicon and silicon dioxide. Scattering rates

The scattering rates of the electron-phonon interaction have been calculated in silicon and dioxide of silicon. There are two main mechanism of the scattering of electrons: the elastic scattering associated with acoustic phonons and the non-elastic scattering associated with optical phonons. For comparison with previous results, there was calculated the dependence on energy of the scattering rate both in approximation of the parabolic band and with using of the density of states in the conductivity band. The scattering rate on the ionized impurities (in n-silicon) was calculated in the Konvel-Weiskopf approximation.

**Key words:** group velocity, density of states, acoustic-phonon and optical phonon frequencies

## Оглавление

1. Введение .....	3
2. Идеальный газ электронов и дырок.....	3
3. Неравновесные носители.....	8
4. Рассеяние носителей заряда в неидеальной решетке .....	10
5. Эффективные массы и групповые скорости.....	13
6. Времена релаксации .....	19
7. Выводы .....	22
Список литературы.....	27

## 1. Введение

Времена релаксации импульса и энергии играют ключевую роль в расчетах подвижности носителей заряда в полупроводниках и диэлектриках [1], [2]. Теоретические оценки частот рассеяния электронов и дырок в полупроводниках имеются в монографиях [3], [4] (см. также [7], [16]). Практический расчет времен релаксации требует задания большого количества параметров (констант потенциалов деформации), которые фактически можно найти только из экспериментальных данных. Кроме того, квазиклассическая плотность энергетических состояний, соответствующая приближению параболической зоны, далека от истинной плотности состояний. По этой причине желательно иметь плотность энергетических состояний как функцию энергии, например, рассчитанную по методу Хартри-Фока, как это было сделано в работе [5]. Цель данной работы состоит в том, чтобы получить эти зависимости в форме, удобной для решения задачи о радиационной проводимости в полупроводниках и диэлектриках методом частиц.

В разделе 2 рассматриваются некоторые свойства газа электронов (дырок), находящегося в равновесии с тепловыми колебаниями решетки кристалла. В разделе 3 вводятся уравнения переноса для носителей заряда в полупроводнике. Главные отличия от классических уравнений переноса связаны с тем, что роль массы квазичастиц выполняет эффективная масса, а вместо положительно заряженных ионов появляются «легкие» дырки. Эффективная масса электрона (дырки) носит тензорный характер и может меняться при движении электрона (дырки). Кроме того, в кристалле скорость электрона совпадает с его групповой скоростью. Анализ данных по групповым скоростям и эффективным массам носителей заряда проведен в разделах 4 и 5. В частности, определена их зависимость от энергии частиц. В разделах 6 и 7 рассматриваются частоты рассеяния электронов на неидеальностях решетки. Показано, что суммарная (по всем процессам) частота рассеяния количественно совпадает с результатами других авторов [1], [2], [10]-[13] и [16].

## 2. Идеальный газ электронов и дырок

В рамках зонной теории состояния электрона классифицируются его квазиимпульсом  $\mathbf{p}$ , который пропорционален волновому вектору  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ . При заданном  $\mathbf{k}$  уравнение Шредингера имеет бесконечное число решений, отвечающих бесконечному числу различных дискретных уровней энергии  $\varepsilon_s$ . Пронумеруем эти решения индексом  $s$  — индексом зоны, считая, что значения  $\varepsilon_s$  возрастают с увеличением  $s$ . Соответственно, различные ветви функции  $\varepsilon = \varepsilon_s(\mathbf{k})$  будем называть законом дисперсии в зоне  $s$ . Зафиксируем номер зоны  $s$ . Можно показать [4], [6], что энергия есть непрерывная функция волнового числа, а ее значения целиком заполняют интервал

$$\varepsilon_{s,\min} < \varepsilon(\mathbf{k}) < \varepsilon_{s,\max}$$

если значения  $\mathbf{k}$  лежат в зоне Бриллюэна. Величины  $\varepsilon_{s,\min}$  и  $\varepsilon_{s,\max}$  называют дном и потолком зоны  $s$ , соответственно. Если же зафиксировать  $\mathbf{k}$  и рассматривать зависимость энергии от  $s$ , то различные энергетические зоны (разрешенные значения энергии) отделены друг от друга запрещенными полосами, где нет электронных состояний.

Закон дисперсии  $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$  дает полное описание поведения электрона. По очевидным причинам универсальный вид дисперсионного соотношения установить нельзя. Тем не менее, из приближенных, полученных при некоторых ограничениях, дисперсионных соотношений получают ряд количественных характеристик реальных кристаллов — скорость и эффективную массу электрона в веществе; плотность электронных (дырочных) состояний; распределение электронов (дырок) по энергиям.

Сначала рассмотрим электроны в валентной зоне (см. рис.1). При температуре  $T \rightarrow 0$ , в соответствии с принципом Паули, электроны заполняют все состояния подряд (вырожденный газ). Квантовыми числами являются  $k_1, k_2, k_3$  — три составляющие волнового вектора  $\mathbf{k}$ , которым отвечает энергия  $\varepsilon(k_1, k_2, k_3)$ . Так как электронный газ подчиняется статистике Ферми-Дирака, то среднее число электронов в данном состоянии с энергией  $\varepsilon(k_1, k_2, k_3)$  при температуре  $T$ , равно [4], [6]

$$f(\varepsilon(k_1, k_2, k_3)) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(k_1, k_2, k_3) - \zeta}{\kappa_B T}\right) + 1} \quad (2.1)$$

Здесь  $\zeta$  — химический потенциал электронного газа или уровень Ферми,  $\kappa_B$  — константа Больцмана. Полное число электронов в единице объема

$$n = \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3} f(\varepsilon(k_{\ell_1}, k_{\ell_2}, k_{\ell_3})) = \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(k_{\ell_1}, k_{\ell_2}, k_{\ell_3}) - \zeta}{\kappa_B T}\right) + 1} \quad (2.2)$$

где суммирование ведется по всем квантовым состояниям электрона, которые нумеруются целыми индексами  $\ell_1, \ell_2, \ell_3$ . Равенство (2.2) неявно определяет химический потенциал электронного газа  $\zeta$  как функцию концентрации  $n$  и температуры  $T$ . Правая часть формулы (2.1) дает средние числа заполнения со-

стояний при температуре  $T$ , т.е.  $f(\varepsilon)$  является квантовой функцией распределения. Из нее можно получить обычную (квазиклассическую) функцию распределения, понимаемую как число электронов в единице объема с энергией в интервале  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$

$$n(\varepsilon)d\varepsilon = f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon,$$

где  $g$  — плотность состояний электронов, т.е.  $g(\varepsilon)d\varepsilon$  есть число квантовых состояний в единице объема в заданном интервале энергий  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ .

Из вида функции Ферми-Дирака ясно, что электроны заполняют всю или почти всю зону, если уровень Ферми расположен вблизи потолка валентной зоны,  $\zeta \approx \varepsilon_{v,\max}$ . Электронный газ вырожден полностью или частично, когда уровень Ферми лежит в рассматриваемой зоне. Так будет, если химический потенциал газа большой и положительный  $\zeta/k_B T \gg 1$ . В этой ситуации из всех переходов электронов с уровня  $\varepsilon$  на уровень  $\varepsilon'$  в зоне возможны только те переходы, при которых электроны меняются местами. Очевидно, такие переходы не изменяют состояния кристалла. Нас же интересует другая ситуация, когда по каким либо причинам возможны переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости. Именно эти переходы приводят к образованию электрон-дырочных пар. Такие состояния электронов (электроны проводимости) можно рассматривать как возбуждения над уровнем Ферми. Существенно, что в полупроводниках и диэлектриках даже ближайšie возбужденные состояния отделены энергетической щелью  $\varepsilon_g$ . Шириной энергетической щели в полупроводнике (диэлектрике) называют сумму  $\varepsilon_g = \varepsilon_{\min}^{(e)} + \varepsilon_{\min}^{(p)}$  наименьших значений энергии электрона и дырки. Из-за наличия щели почти все состояния в зоне проводимости свободны, и совокупность электронов проводимости можно рассматривать как классический газ. Аналогично, можно ввести газ дырок в валентной зоне, рассматривая их как возбуждения ниже уровня Ферми с избытком положительного заряда.

Равновесные концентрацию и плотность энергии электронов проводимости найдем следующим образом. Условимся отсчитывать энергию от потолка валентной зоны (рис.1),

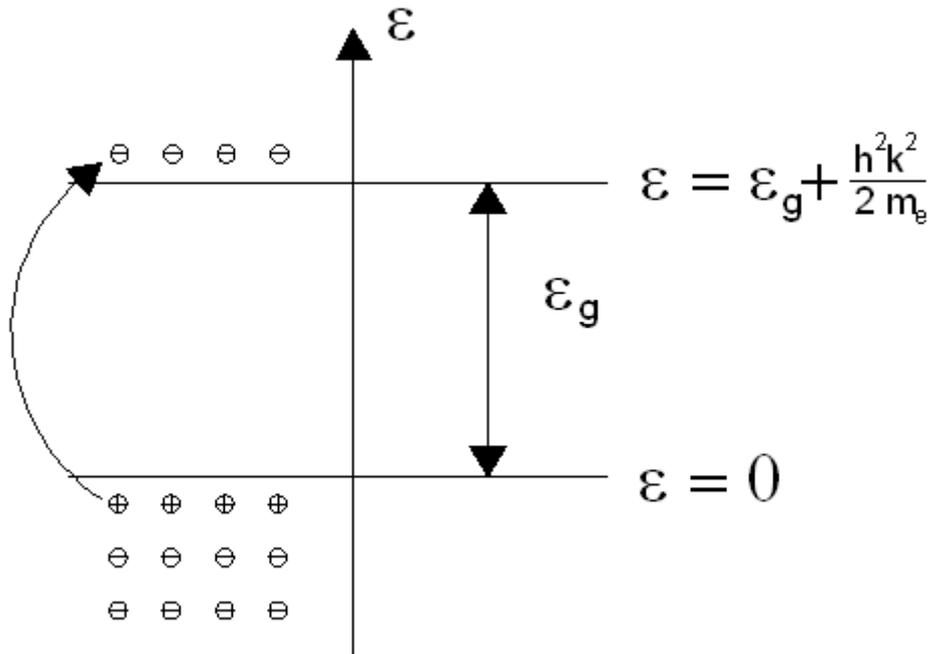


Рис. 1. Электроны и дырки. Энергетическая щель  $\varepsilon_g$  отделяет валентную зону от зоны проводимости

т.е. положим, что энергия электрона в зоне проводимости имеет вид

$$\varepsilon = \varepsilon_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

Предположение о том, что газ электронов проводимости классический, эквивалентно следующим условиям на химический потенциал

$$\zeta - \varepsilon_g < 0, \quad \exp\left(-(\zeta - \varepsilon_g)/\kappa_B T\right) \gg 1$$

Тогда из (2.1) следует, что распределение электронов проводимости имеет вид распределения Максвелла [6]

$$f_e = \exp\left(\frac{\zeta}{\kappa_B T}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\kappa_B T}\right) = \exp\left(\frac{\zeta - \varepsilon_g}{\kappa_B T}\right) \exp\left(-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e \kappa_B T}\right) \quad (2.3)$$

У большей части состояний числа заполнения ожидаемо оказались малы. Используя (2.3) и выполнив интегрирование по энергиям, для концентрации электронов проводимости получим

$$n_e = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\zeta - \varepsilon_g}{\kappa_B T}\right) \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\kappa_B T}\right) d\varepsilon = 2 \left( \frac{m_e \kappa_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\zeta - \varepsilon_g}{\kappa_B T}\right) \quad (2.4)$$

Плотность энергии газа электронов проводимости

$$E_e = \int_0^\infty \varepsilon f_e(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{3}{2} n_e \kappa_B T \quad (2.5)$$

Покидая валентную зону, электрон оставляет вакансию – дырку с избыточным положительным зарядом. Дырка определяется как отсутствие электрона, поэтому при тех же предположениях об уровне Ферми

$$f_p = 1 - f_e = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \zeta}{\kappa_B T}\right) + 1} \approx \exp\left(\frac{\varepsilon - \zeta}{\kappa_B T}\right)$$

Действуя так же, как при выводе (2.4), для концентрации дырок в валентной зоне получим

$$n_p = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_p}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\zeta}{\kappa_B T}\right) \int_{-\infty}^0 (-\varepsilon^{1/2}) \exp\left(\frac{\varepsilon}{\kappa_B T}\right) d\varepsilon = 2 \left( \frac{m_p \kappa_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\zeta}{\kappa_B T}\right) \quad (2.6)$$

Так как электроны и дырки рождаются парами, то, приравнивая (2.4) и (2.6), получим

$$n_e^{(0)} = n_p^{(0)} = 2 \left( \frac{\sqrt{m_e m_p} \kappa_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_g}{2\kappa_B T}\right) \quad (2.7)$$

где индекс 0 обозначает равновесные концентрации при температуре  $T$ . Из соотношений (2.4) и (2.7) найдем химический потенциал

$$\zeta = \frac{1}{2} \varepsilon_g + \frac{3}{4} \kappa_B T \ln\left(\frac{m_p}{m_e}\right) \quad (2.8)$$

Полагая  $m_p \approx m_e$ , получим  $\zeta = \varepsilon_g/2$ , т.е. уровень Ферми лежит в середине запрещенной полосы и равноудален как от электронов проводимости, так и от дырок валентной зоны. При температуре  $T = 300\text{K}$ , характерная величина щели

в полупроводнике лежит в диапазоне  $\varepsilon_g = 0.5 - 1.5$  эВ,  $\kappa_B T \approx 1/40$  эВ,  $(\varepsilon_g - \zeta)/\kappa_B T \approx \varepsilon_g/2\kappa_B T \gg 1$ , что оправдывает исходные предположения.

### 3. Неравновесные носители

Ранее электроны проводимости и дырки валентной зоны рассматривались как идеальный газ свободно движущихся частиц. Теперь учтем, что электроны и дырки, как заряженные частицы, взаимодействуют друг с другом по кулоновскому закону, т.е. образуют электрон-дырочную плазму. В этой ситуации уже нельзя считать функцию распределения зависящей только от энергии носителей заряда, как в (2.1). Здесь главную роль играет представление о функции распределения как функции времени, положения и квазиимпульса  $f = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p})$ . Макроскопические параметры среды являются интегралами от функции распределения:

$$n = \int f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad \mathbf{j} = e \int \mathbf{v} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.1)$$

дают концентрацию и плотность тока, соответственно. Аналогично, интегралы

$$E = \int \varepsilon(\mathbf{p}) f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad \mathbf{J} = \int \mathbf{v} \varepsilon(\mathbf{p}) f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.2)$$

дают плотность энергии и плотность потока энергии. Строго говоря, интегралы берутся по зоне Бриллюэна, но в силу быстрого убывания функции распределения возможно распространить интегрирование на все  $\mathbf{p}$ -пространство. В термодинамическом равновесии распределение частиц максвелловское (2.3) и потоки в (3.1), (3.2) обращаются в нуль, а концентрация и плотность энергии совпадают с их равновесными значениями (2.4), (2.5).

В том случае, когда газ электронов проводимости невырожден, при описании процессов переноса заряда оказываются пригодными методы, традиционные для газовой плазмы. Различия носят в основном количественный характер, например, роль массы квазичастиц выполняет эффективная масса, вместо тяжелых положительно заряженных ионов появляются «легкие» дырки. Главные же отличия состоят в следующем: эффективная масса электрона (дырки) носит тензорный характер и может меняться при движении электрона. Кроме того, в кристалле скорость электрона совпадает с его групповой скоростью

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}$$

где  $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$  — закон дисперсии для данного вещества.

Уравнение на функцию распределения получим, взяв полную производную по времени и пренебрегая (пока) процессами рассеяния частиц

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{x}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \dot{\mathbf{p}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (3.3)$$

Рассматривая (3.3) как сдвиг функции распределения вдоль квазиклассических траекторий частиц, окончательно получим уравнения [6]

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{x}} - e \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{x}} + e \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (3.5)$$

Электромагнитные поля в (3.4), (3.5) могут быть как внешними, так и внутренними, т.е. вызванными объемным зарядом и движением самих частиц. Уравнения (3.4) и (3.5) следует дополнить уравнениями Максвелла на потенциалы электромагнитного поля

$$\Delta \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = -4\pi e \left( \int f_p(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} - \int f_e(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \right) \quad (3.6)$$

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi e}{c} \left( \int \mathbf{v} f_p(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} - \int \mathbf{v} f_e(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \right) \quad (3.7)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \Phi, \quad \mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A} \quad (3.8)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями.

Так как скорость электронов проводимости гораздо меньше скорости света,  $v/c \ll 1$ , можно пренебречь релятивистскими поправками для потенциалов и, в большинстве случаев, магнитным полем. В этом простом случае система уравнений (3.4)-(3.8) примет вид

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{x}} - e \mathbf{E} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{x}} + e \mathbf{E} \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (3.10)$$

$$\Delta \Phi = -4\pi e \left( \int f_p(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} - \int f_e(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \right) \quad (3.11)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi \quad (3.12)$$

Даже в пределах одной зоны закон дисперсии для электронов может иметь несколько ветвей. Это означает, что в кристалле одновременно могут существовать несколько типов электронов (дырок), отличающихся друг от друга эффективной массой. Например, в валентной зоне кремния различают три типа дырок [6]: тяжелые дырки  $m_{p1}/m = 0.49$ , и два сорта легких дырок  $m_{p2}/m = 0.16$ ,  $m_{p3}/m = 0.245$ . В этом случае нужно вводить функцию распределения  $f_\lambda$  для каждого типа квазичастиц с зарядом  $e_\lambda = \pm e$  и эффективной массой  $m_\lambda$ . Система уравнений (3.9)-(3.12) приобретает общий вид

$$\frac{\partial f_\lambda}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_\lambda}{\partial \mathbf{x}} - e_\lambda \nabla \Phi \frac{\partial f_\lambda}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad (3.13)$$

$$\Delta \Phi = -4\pi \sum_\lambda e_\lambda \int f_\lambda(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.14)$$

Отметим, что в правой части (3.14) могут также стоять концентрации заряженных примесей — акцепторов и доноров.

#### 4. Рассеяние носителей заряда в неидеальной решетке

Для определенности будем считать, что рассматривается функция распределения электронов. Полное кинетическое уравнение должно учитывать рассеяние электронов на неидеальностях решетки

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - e \nabla \Phi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I[f, f] \quad (4.1)$$

Левая или «полевая» часть полного кинетического уравнения совпадает с (3.13). Правая часть уравнения (4.1) описывает изменение функции распределения за счет рассеяния. Здесь  $I[f, f]$  — квадратичный оператор, действующий на функцию распределения по переменной квазиимпульса (переменные  $\mathbf{x}$  и  $t$  являются параметрами и мы их не указываем)

$$I[f, f] = \int \{W(\mathbf{p}', \mathbf{p})f(\mathbf{p}')(1 - f(\mathbf{p})) - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')f(\mathbf{p})(1 - f(\mathbf{p}'))\} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \quad (4.2)$$

Величина  $W(\mathbf{p}', \mathbf{p})$  есть скорость реакции перехода из состояния  $\mathbf{p}'$  в состояние  $\mathbf{p}$ , ее размерность есть  $\tilde{m}^3/\tilde{h}$ . Первый член в фигурных скобках дает приход в состояние  $\mathbf{p}$  из всех других состояний, при условии, что состояние  $\mathbf{p}$  свободно. Аналогично, второй член в фигурных скобках описывает уход из состояния  $\mathbf{p}$  в любое другое состояние  $\mathbf{p}'$  со скоростью  $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ , если оно свободно. Полное число частиц при всех переходах, очевидно, не изменяется, так как из формы записи интеграла рассеяния прямо вытекает

$$\int d\mathbf{p} I[f, f] = 0$$

В термодинамическом равновесии интеграл столкновений должен обращаться в нуль. Тогда и подинтегральное выражение обращается в нуль

$$W(\mathbf{p}', \mathbf{p})f_0(\mathbf{p}')(1 - f_0(\mathbf{p})) - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')f_0(\mathbf{p})(1 - f_0(\mathbf{p}')) = 0 \quad (4.3)$$

где  $f_0$  — равновесное распределение. Подставляя в (4.3) распределение Ферми-Дирака (2.1), получим связь скоростей прямой и обратной реакции

$$\frac{W(\mathbf{p}', \mathbf{p})}{W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')} = \exp \frac{\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p})}{\kappa_B T} \quad (4.4)$$

Соотношение (4.4) представляет собой принцип детального равновесия. Приход и уход частиц уравниваются не суммарно, а детально, для каждой пары состояний. Из (4.4) вытекает, что вероятность перехода с увеличением энергии мала по сравнению с переходом в сторону уменьшения энергии. Меньшая вероятность перехода с уровней меньшей энергии на уровни с большими энергиями компенсируется большей заселенностью этих уровней.

Для упругого рассеяния скорости прямой и обратной реакций совпадают  $W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ . В этом случае интеграл рассеяния упрощается

$$I[f, f] = \int W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})) \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \quad (4.5)$$

т.е. становится линейным и совпадает с интегралом столкновений в классическом газе.

В качестве рассеивателей электронов в полупроводнике выступают:

- а) акустические колебания решетки (длинноволновые фононы);
- б) ионы примесей (дефекты структуры);
- с) оптические колебания (оптические фононы).

Каждый элементарный процесс рассеяния описывается в терминах скорости рассеяния  $W^{(i)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ ,  $i = a, b, c, \dots$  для реакции  $\mathbf{p} \leftrightarrow \mathbf{p}'$ . Ее можно вычислить по правилу Ферми

$$W^{(i)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{p} | \mathbf{H}_s^{(i)} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p})) \quad (4.6)$$

где  $H_s^{(i)}$  — гамильтониан для  $i$ -того процесса рассеяния,  $\langle \mathbf{p} | \mathbf{H}_s^{(i)} | \mathbf{p}' \rangle$  — матричный элемент взаимодействия.  $\delta$ -функция в правой части (4.6) означает, что переходы происходят только между состояниями с одинаковой энергией. Если учитываются сразу несколько элементарных процессов, то полная скорость переходов является суммой по всем процессам  $W = \sum_i W^{(i)}$ . Далее, скорость перехода отлична от нуля только при сохранении квазиимпульса, т.е.

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' = -\hbar\mathbf{q}$$

в случае поглощения фонона и

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' = \hbar\mathbf{q}$$

в случае испускания фонона. Испусканию или поглощению фонона с квазиимпульсом  $\hbar\mathbf{q} = \pm(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$  соответствует уменьшение или увеличение энергии электрона как раз на величину  $\hbar\omega$

$$\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p}) = \pm\hbar\omega((\mathbf{p} - \mathbf{p}')/\hbar)$$

Верхний и нижний знаки относятся к испусканию или поглощению фонона, соответственно.

## 5. Эффективные массы и групповые скорости

Текущее состояние электрона определяется его квазиимпульсом. Наличие  $\delta$ -функции в формуле (4.6) означает, что на практике гораздо удобнее классифицировать электроны не по квазиимпульсам, а по их энергиям. Главную роль здесь играют изоэнергетические поверхности  $\varepsilon = \text{const}$ . Для описания числа состояний введем функцию  $g(\varepsilon)$  — плотность состояний, т.е.  $g(\varepsilon)d\varepsilon$  есть число квантовых состояний в единице объема в заданном интервале энергий  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ . Пусть уравнение  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_1 = \text{const}$  определяет некоторую поверхность  $S$  в  $\mathbf{p}$ -пространстве. Вместо квазиимпульсов  $p_1, p_2, p_3$  введем новые переменные  $\eta_1, \eta_2, \eta_3$  и выберем их так, чтобы на поверхности  $S$  выполнялось  $\eta_1 = \text{const}$ . Оставшиеся «угловые» переменные  $\eta_2, \eta_3$  описывают элемент площади этой поверхности  $ds = J d\eta_2 d\eta_3$ , где  $J$  — якобиан замены переменных. Из выбора «радиальной» координаты  $\eta_1$  вытекает, что  $d\varepsilon/d\eta_1 = |\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon|$  и тогда функцию  $g(\varepsilon)$  можно вычислить по формуле [4]

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int_S \frac{ds}{|\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon|} \quad (5.1)$$

Для изотропного закона дисперсии поверхности  $S$  являются сферами радиуса  $\eta_1 = p$ , а переменные  $\eta_2, \eta_3$  — полярный  $\theta$  и азимутальный  $\phi$  углы, соответственно,  $ds = p^2 \sin\theta d\theta d\phi$ ,  $\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon = p/m$ , и тогда формула (5.1) дает

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p^2}{p/m} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \quad (5.2)$$

Тогда для электронов, находящихся вблизи дна зоны проводимости (рис.1), в приближении эффективной массы имеем

$$\varepsilon = \varepsilon_c + \frac{p^2}{2m_e}, \quad g_e(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} \quad (5.3)$$

Соотношения (5.3) определяют эффективную массу  $m_e$  электрона и плотность состояний у края зоны проводимости в параболическом приближении. У потолка валентной зоны для дырок, аналогично, получим

$$\varepsilon = \varepsilon_v - \frac{p^2}{2m_p}, \quad g_p(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_p}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon_v - \varepsilon} \quad (5.4)$$

где  $m_p$  — эффективная масса дырки в валентной зоне. Распространение соотношений (5.3), (5.4) на всю зону приведет к тому, что эффективная масса сама окажется зависящей от энергии электрона (дырки). Кейн показал, что в рамках приближения скалярной эффективной массы можно учесть эффект непараболичности зоны. Для этого вводится эффективная масса, зависящая от энергии

$$\varepsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e(1 + \alpha\varepsilon)}, \quad \alpha = \frac{1}{\varepsilon_g} \left( 1 + \frac{m_e}{m} \right)^2 \quad (5.5)$$

где  $\varepsilon_g$  — энергетическая щель между проводящей и валентной зонами. Из (5.5) следует, что групповая скорость связана с квазиимпульсом  $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m_e(\varepsilon)$ , а эффективная масса линейно растет с увеличением энергии

$$m_e(\varepsilon) = m_e(0)(1 + 2\alpha\varepsilon) \quad (5.6)$$

В данной работе также принимается приближение скалярной эффективной массы с поправкой на ее зависимость от энергии. Анализ имеющихся данных по кремнию и оксиду кремния показал, что эффективную массу можно найти, приравняв квазиклассическую плотность состояний к усредненной по углам плотности состояний  $g(\varepsilon)$ .

$$\frac{m_{e(p)}(\varepsilon)}{m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi^2 g_{e(p)}}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{2/3} \quad (5.7)$$

Здесь  $m$  — масса свободного электрона. Зависимость  $g(\varepsilon)$  для оксида кремния была получена в работе [5]. Тогда для энергии и групповой скорости носителей заряда сохраняются простые соотношения

$$\varepsilon_{e(p)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_{e(p)}(\varepsilon)} \quad (5.8)$$

Соотношения (5.7), (5.8) значительно упрощают вычисления по методу частиц, так как явным образом определяют связь энергии с квазиимпульсом, и,

что еще более важно, однозначно связывают потери квазиимпульса с потерями энергии при неупругом рассеянии носителей заряда.

При таком выборе эффективной массы, очевидно, что плотность состояний получается точно. Сравнение групповых скоростей показывает, что приближение (5.7) работает даже лучше, чем формула Кейна (см. рис.2-3 и рис.5-б)

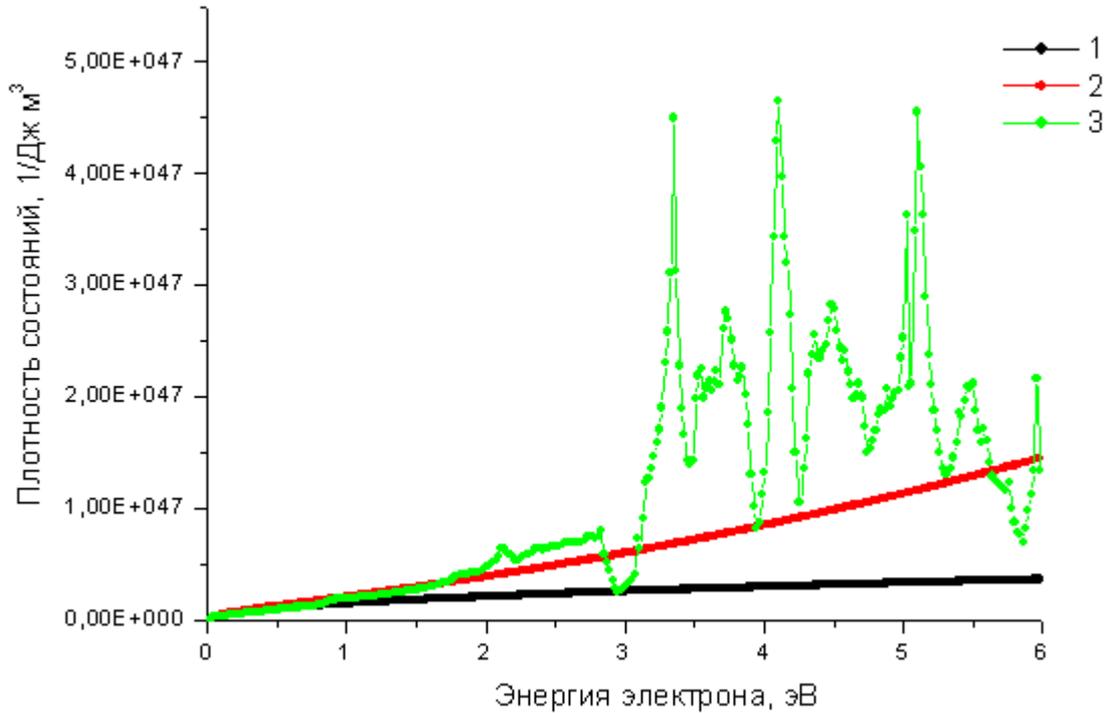


Рис. 2. Зависимость плотности состояния диоксида кремния от энергии электрона в различных приближениях. 1 — параболическое приближение с  $m_e = 0.5 \cdot m$ , 2 — плотности состояний учёт эффективной массы по Кейну, 3 — плотность состояний, полученная по методу DFT [5].

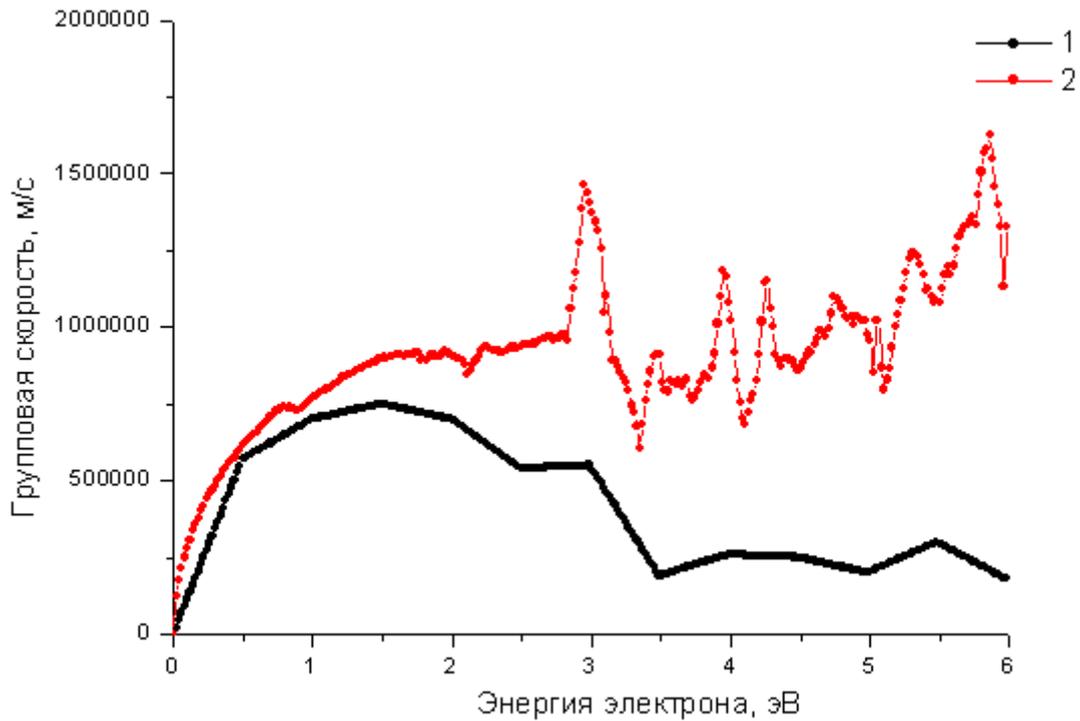


Рис. 3. График зависимости групповой скорости от энергии электрона для  $\text{SiO}_2$ . 1 — групповая скорость [5], 2 — вычисленная по плотности состояний.

В кремнии энергетический спектр электронов состоит из 6 эллипсоидов вращения [4]

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{(k_1 - k_{1s})^2}{m_1} + \frac{(k_2 - k_{2s})^2}{m_2} + \frac{(k_3 - k_{3s})^2}{m_3} \right) \quad (5.9)$$

симметрично расположенных в зоне Бриллюэна ( $\Delta$ -долин). Каждой из 6 эквивалентных долин отвечает свой минимум энергии  $(k_{1s}, k_{2s}, k_{3s})$ . Изоэнергетическая поверхность (рис.4) в данном случае представляет собой совокупность всех эллипсоидов (5.9). В этом случае понятие эффективной массы модифицируют следующим образом.

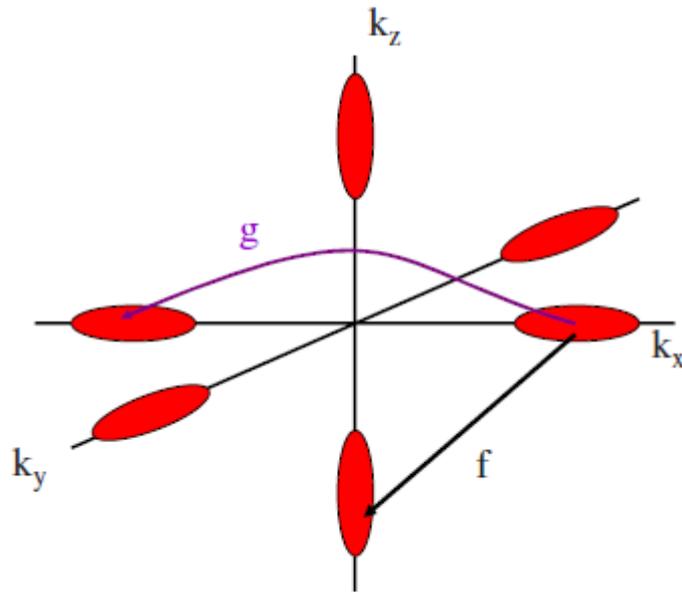


Рис. 4. Схема расположения  $\Delta$ -долин в чистом кремнии.

Введем новые координаты  $\xi_1 = (k_1 - k_{1s})\sqrt{m_1}$ ,  $\xi_2 = (k_2 - k_{2s})\sqrt{m_2}$ ,  $\xi_3 = (k_3 - k_{3s})\sqrt{m_3}$  и воспользуемся тем, что в новых переменных  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  изоэнергетические поверхности станут сферами. Если в зоне Бриллюэна имеются  $\beta$  эквивалентных минимумов энергии, то плотность состояний увеличивается в  $\beta$  раз

$$\beta \frac{dk_1 dk_2 dk_3}{(2\pi)^3} = \beta (m_1 m_2 m_3)^{1/2} \frac{d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3}{(2\pi)^3}$$

Отсюда следует, что эффективная масса электрона

$$m_e = \beta^{2/3} (m_1 m_2 m_3)^{1/3} \quad (5.10)$$

Для кремния  $m_1/m = m_2/m = 0.19$ ,  $m_3/m = 0.98$ ,  $\beta = 6$  и формула (5.10) дает значение эффективной массы  $m_e/m = 1.06$ . Более точные исследования (с учетом температурной зависимости) предписывают  $m_e/m = 1.09$  при температуре  $T = 300\text{K}$  и именно это значение эффективной массы следует подставлять в (5.8). Результаты расчетов для кремния показаны на рис.5-6

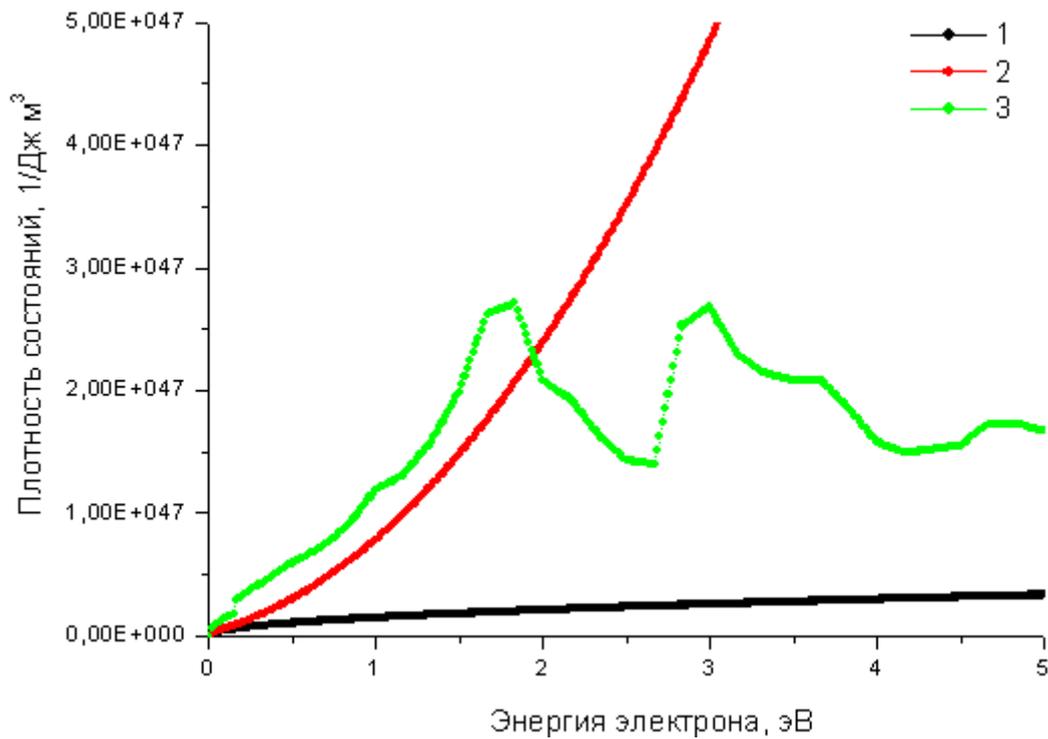


Рис. 5. Сравнение плотностей состояний для кремния. 1 – параболическое приближение, 2 – по формуле Кейна, 3 – по методу DFT [5].

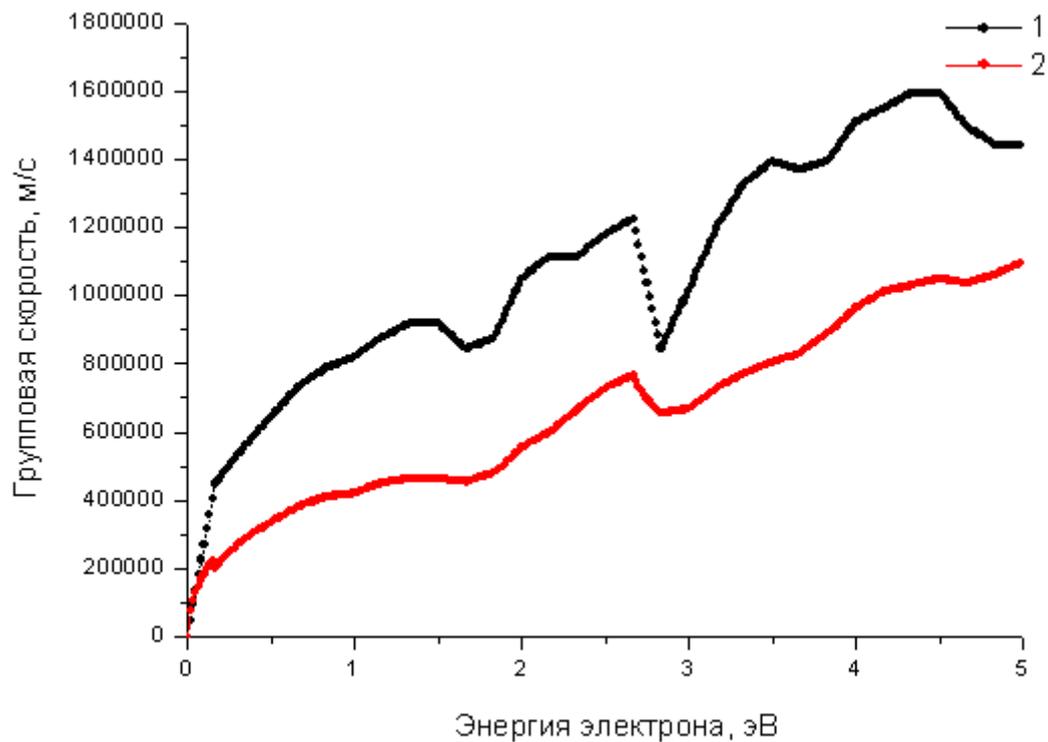


Рис.6. График зависимости групповой скорости от энергии для Si. 1 — групповая скорость [5], 2 — вычисленная по плотности состояний.

## 6. Времена релаксации

Каждая частица характеризуется своим (не зависящим от других частиц) временем свободного пробега  $\tau(\varepsilon)$

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \sum_i \frac{1}{\tau_i(\varepsilon)}$$

где суммирование идет по всем процессам, включая рекомбинацию. Интеграл рассеяния включает в себя следующие процессы:

1. Упругое рассеяние на акустических фононах (АС-фононы);
2. Упругое рассеяние на заряженных примесях (для сильно легированных полупроводников);
3. Неупругое рассеяние на полярных оптических фононах (ЛО-фононы);
4. Неупругое рассеяние на неполярных оптических фононах (ТО-фононы).

Перед тем как выписать формулы, определяющие времена  $\tau_i$ , приведем некоторые общие замечания и соображения. Рассеяние означает переход электрона из состояния с квазиимпульсом  $\mathbf{p}'$  и энергией  $\varepsilon'$  в состояние с квазиимпульсом  $\mathbf{p}$  и энергией  $\varepsilon$ . Полярная ось совпадает с направлением  $\mathbf{p}'$ ,  $\mu$  — косинус угла рассеяния,  $\mu = \mathbf{p}\mathbf{p}'/pp'$ . При неупругом рассеянии изменение энергии электрона квантуется величиной  $\hbar\omega_{opt}$ . Заметим, что неупругие процессы подразумевают как поглощение, так и испускание фононов. В соответствии с принципом детального равновесия отношение вероятности поглощения к вероятности испускания зависит от разности энергий начального и конечного состояний электрона:  $W^{abs}/W^{emis} \approx \exp(-\hbar\omega_{opt}/\kappa_B T)$ . Подставляя сюда характерные значения энергии оптического фонона  $\hbar\omega_{opt} = 0.1 \text{ эВ}$  и тепловой энергии электрона  $\kappa_B T = 1/40 \text{ эВ}$ , получим  $W^{abs}/W^{emis} \approx 0.02$ . По этой причине для быстрых ( $\varepsilon \gg \kappa_B T$ ) электронов вклад поглощения во времена рассеяния очень мал по сравнению с испусканием. Потери импульса при неупругих столкновениях происходит одновременно с потерями энергии, поэтому

$$\frac{1}{\tau_i} = \int W_i(\varepsilon, \varepsilon', \mu) g(\varepsilon') d\varepsilon' d\mu$$

Для упругих столкновений потери импульса и соответствующие этому процессу времена определяются транспортным временем

$$\frac{1}{\tau_{tr,i}} = \int W_i(\varepsilon, \varepsilon', \mu)(1 - \mu)g(\varepsilon')d\varepsilon' d\mu$$

Приведем формулы для всех типов рассеяния, явно выделяя в них плотность состояний  $g(\varepsilon)$  и термически усредненные числа заполнения фононов  $N_{ph} = \kappa_B T / \hbar \omega$ .

1. *Рассеяние на АС-фононах.* Потерями энергии электронов пренебрегаем, полагая  $\hbar \omega_{ac} = 0$ . Теория деформационного потенциала дает [3]

$$\frac{1}{\tau_{ac}(\varepsilon)} = \frac{3\sqrt{2}\pi C_1^2 \kappa_B T}{\rho \hbar c_s^2} g(\varepsilon)$$

где  $C_1$  — константа деформационного потенциала,  $\rho$  — плотность вещества,  $c_s$  — скорость звука в данном веществе. Рассеяние изотропно по углам.

2. *Рассеяние на заряженных примесях.* Сечение рассеяния — резерфордское. Потерями энергии электронов пренебрегаем, полагая  $\Delta\varepsilon = 0$ . В этом случае для транспортного времени имеется формула Конвелл-Вейскопфа [8]

$$\frac{1}{\tau_I(\varepsilon)} = \frac{\pi Z^2 e^4 n_I}{\sqrt{2m_e \varepsilon_0^2 \varepsilon^{3/2}}} \ln \left\{ 1 + \left( \frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{e^2 n_I^{1/3}} \right)^2 \right\}$$

где  $n_I$  — концентрация примесных атомов,  $\varepsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость среды,  $Z$  — средний заряд рассеивающих атомов. Угловое распределение имеет вид

$$P(\theta) = \int_{\theta_{\min}}^{\theta} \frac{\cos(\eta/2)}{\sin(\eta/2)} d\eta$$

где параметр  $\theta_{\min}$  — наименьшее значение угла рассеяния. В тех же предположениях оно определяется из соотношения

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta_{\min}}{2} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{n_I^{1/3} e^2}$$

3. *Рассеяние на LO-фононах.* Изменение энергии электрона  $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_{LO}$ . Теория Фрелиха дает [3], [10], [9]

$$\frac{1}{\tau_{LO}(\varepsilon)} = \frac{e^2 \hbar^2 \omega_{LO}}{16\pi^2 m_e} \chi g(\varepsilon) N_{ph} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \hbar\omega_{LO}/\varepsilon}}{1 - \sqrt{1 - \hbar\omega_{LO}/\varepsilon}}$$

где  $\chi = 1/\varepsilon_0 - 1/\varepsilon_\infty$ ,  $\varepsilon_\infty$  — динамическая диэлектрическая проницаемость,  $\varepsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость вещества. При достижении порога испускания

$$\frac{1}{\tau_{LO}(\varepsilon)} = \frac{e^2 \hbar^2 \omega_{LO}}{16\pi^2 m_e} \chi g(\varepsilon) N_{ph} \ln \frac{1 + \sqrt{1 + \hbar\omega_{LO}/\varepsilon}}{-1 + \sqrt{1 + \hbar\omega_{LO}/\varepsilon}}$$

что соответствует поглощению. Угловая часть рассеяния изотропна по азимутальному углу, но сильно зависит от полярного угла

$$P(\mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{\mu} \frac{d\mu'}{\gamma - \mu'}, \quad \gamma = \frac{1 \mp \hbar\omega/\varepsilon}{\sqrt{1 \mp \hbar\omega/\varepsilon}},$$

где  $P(\mu)$  — вероятность рассеяния в направлении  $\mu$ , знак минус соответствует испусканию, знак плюс соответствует поглощению.

4. *Рассеяние на TO-фононах.* Изменение энергии электрона  $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_{TO}$ . Теория деформационного потенциала дает [3]

$$\frac{1}{\tau_{TO}(\varepsilon)} = g(\varepsilon) \frac{\sqrt{2} \pi C_2^2 \hbar}{\rho \hbar \omega_{TO}} N_{ph} (1 - \hbar\omega_{TO}/\varepsilon)^{1/2}$$

Здесь  $C_2$  — константа деформационного потенциала,  $\rho$  — плотность вещества. Вероятность рассеяния не зависит от углов, поэтому формально рассеяние изотропно по углам.

При переходе электрона между двумя различными долинами (рисунок 5) могут возбуждаться как акустические, так и оптические фононные моды. Считается, что только неполярные оптические фононы участвуют при междолинном рассеянии. Кремний имеет симметричные долины и разница между дном начальной и конечной долиной равна нулю. Это рассеяние изотропно и частота рассеяния подчиняется соотношению для внутридолинного взаимодействия, но с другой константой деформационного потенциала, которая принимается равной [16]  $2.2 \cdot 10^8 \text{ \AA}^2/\text{эВ}$ .

## 7. Выводы

Результаты расчетов показали, что в сильно легированном кремнии рассеяние на заряженных примесях доминирует при малых энергиях и дает заметный вклад при энергиях  $\varepsilon \geq 1 \text{ эВ}$ . Вклад остальных процессов показан на рис.8-9

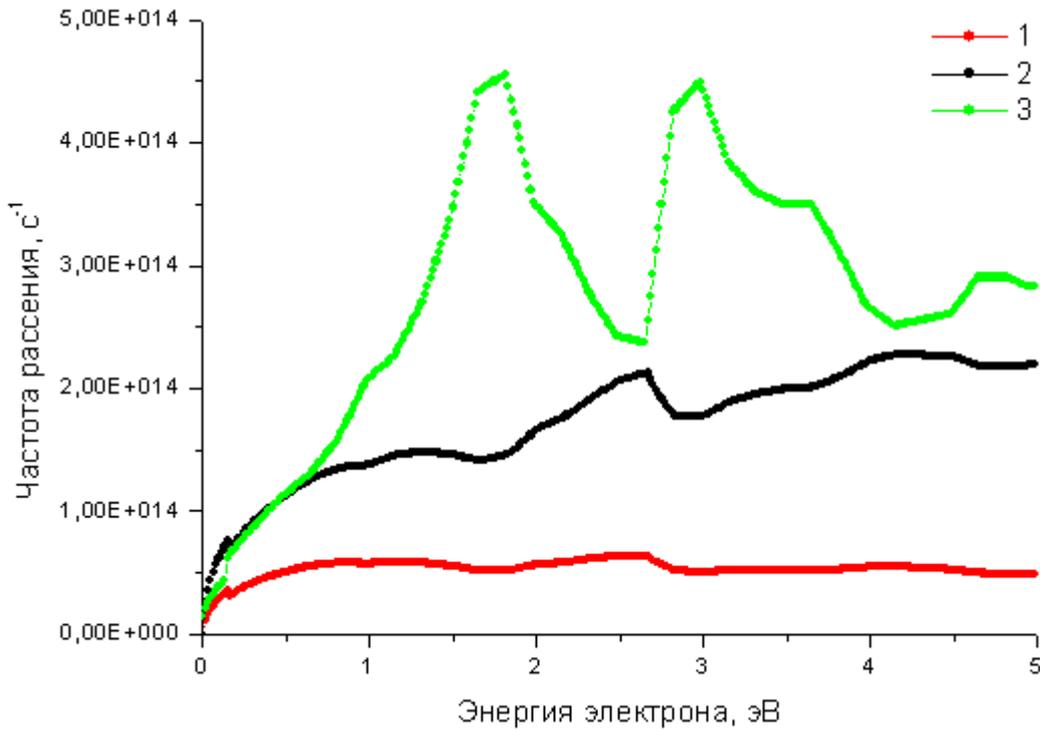


Рис. 7. Сравнение частот рассеяния на примесях (при разных концентрациях) и суммарной частоты рассеяния в кремнии. 1 – при рассеянии только на примесях при их концентрации  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ , 2 – при рассеянии только на примесях при их концентрации  $10^{19} \text{ см}^{-3}$ , 3 – суммарная частота рассеяния без учёта примесей.

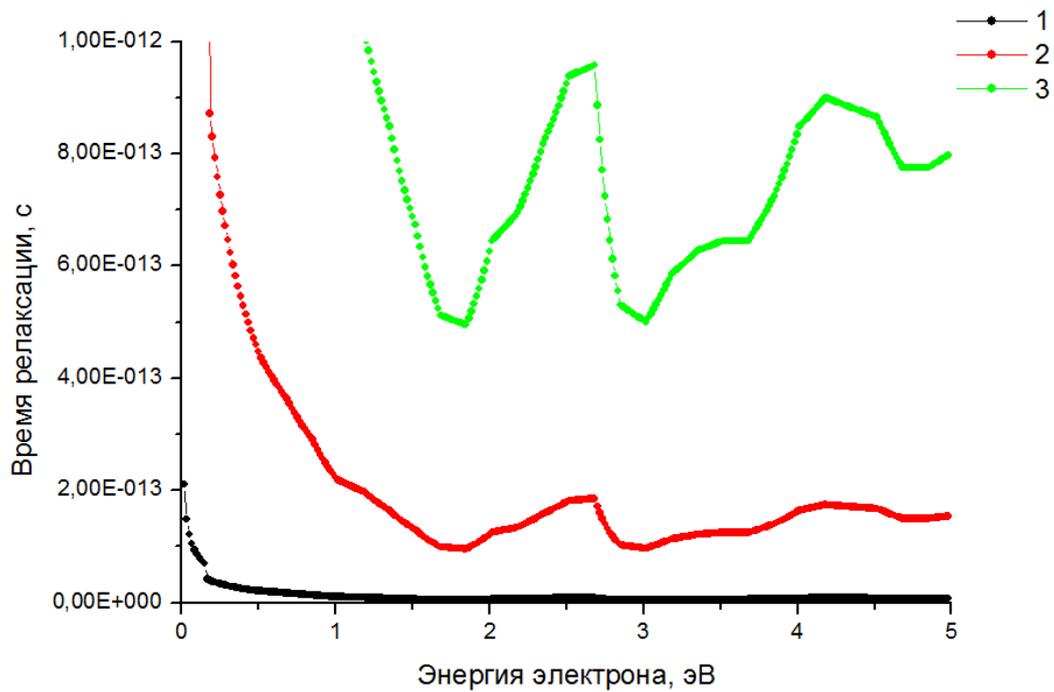


Рис. 8. Времена релаксации для различных процессов в Si:  
 1 – акустические фононы, 2 – оптические неполярные фононы,  
 3 – оптические фононы при междолинном рассеянии

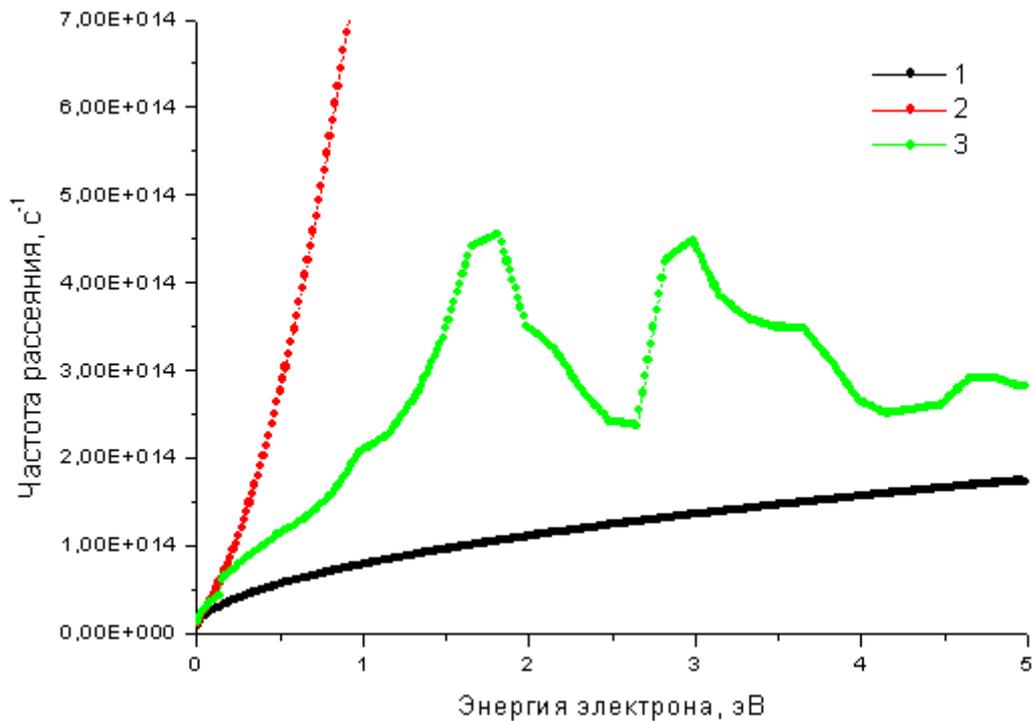


Рис. 9. Частоты рассеяния для различных приближений в Si:  
 1 – параболическое приближение,  
 2 – плотность состояний по формуле Кейна, 3 – плотность состояний [5].

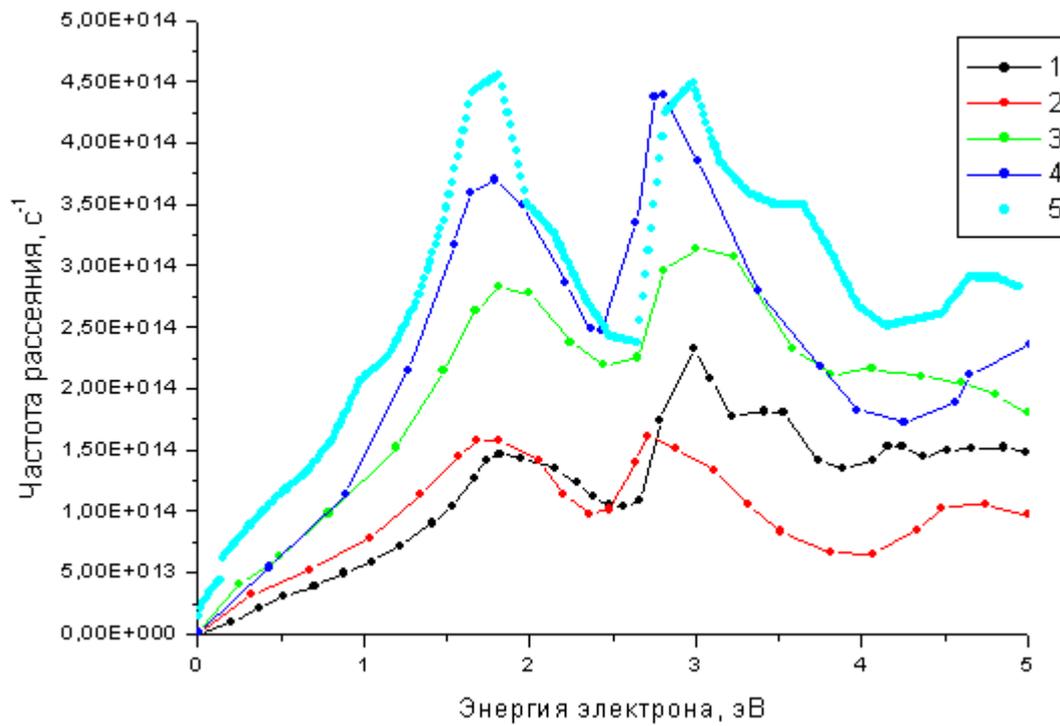


Рис. 10. Сравнение суммарной частоты рассеяния в Si с другими авторами: 1 – [10], 2 – [11], 3 – [12], 4 – [13], 5– данная работа.

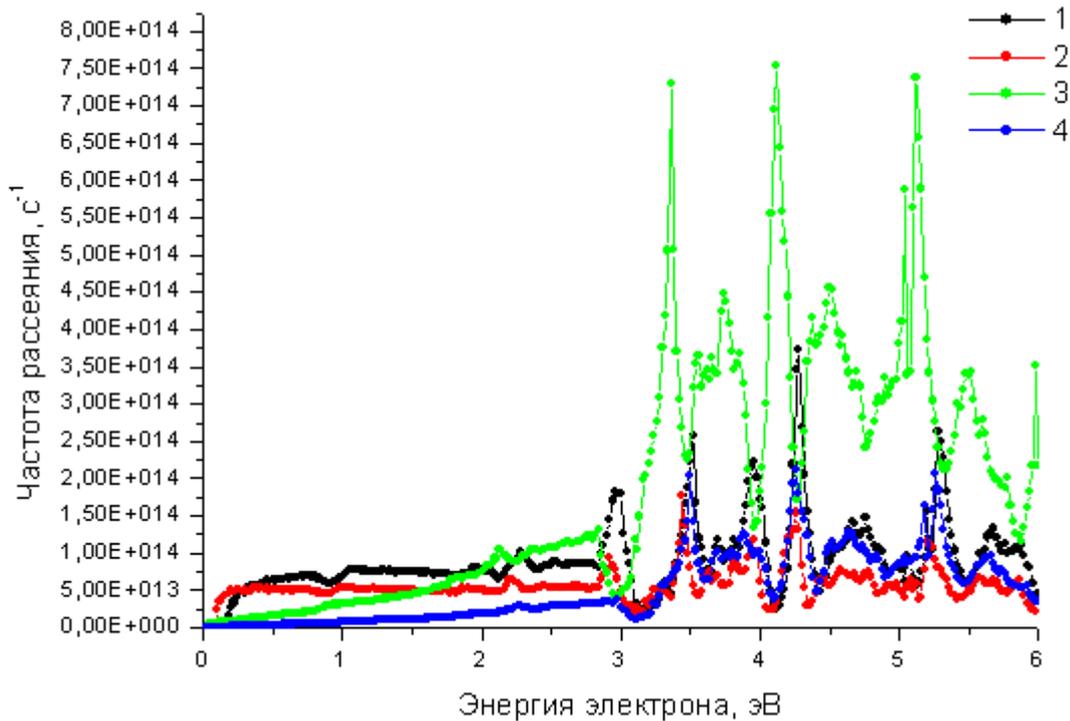


Рис. 11. Графики зависимости частоты рассеяния в диоксиде кремния при эмиссии фононов: 1 – верхняя LO ветвь, 2 – нижняя LO ветвь, 3 – АС, 4 – ТО.

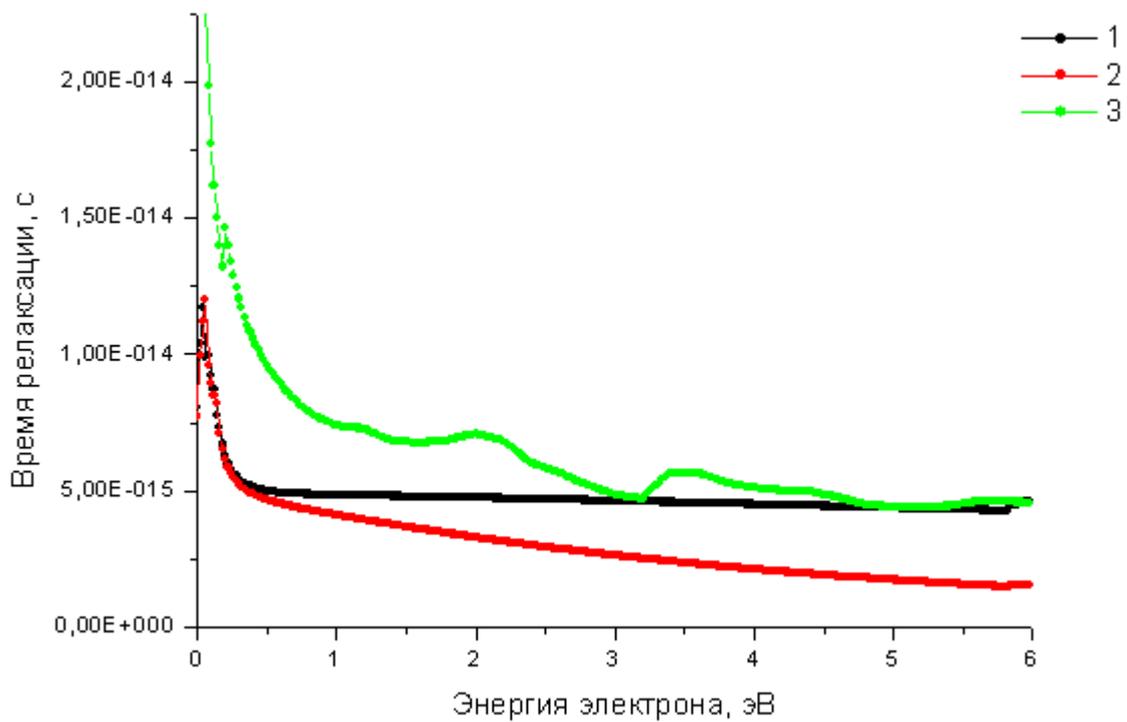


Рис. 12. Суммарное (по всем процессам) время релаксации в диоксиде кремния для: 1 – параболическое приближение, 2 – плотность состояний по формуле Кейна, 3 – плотность состояний [5].

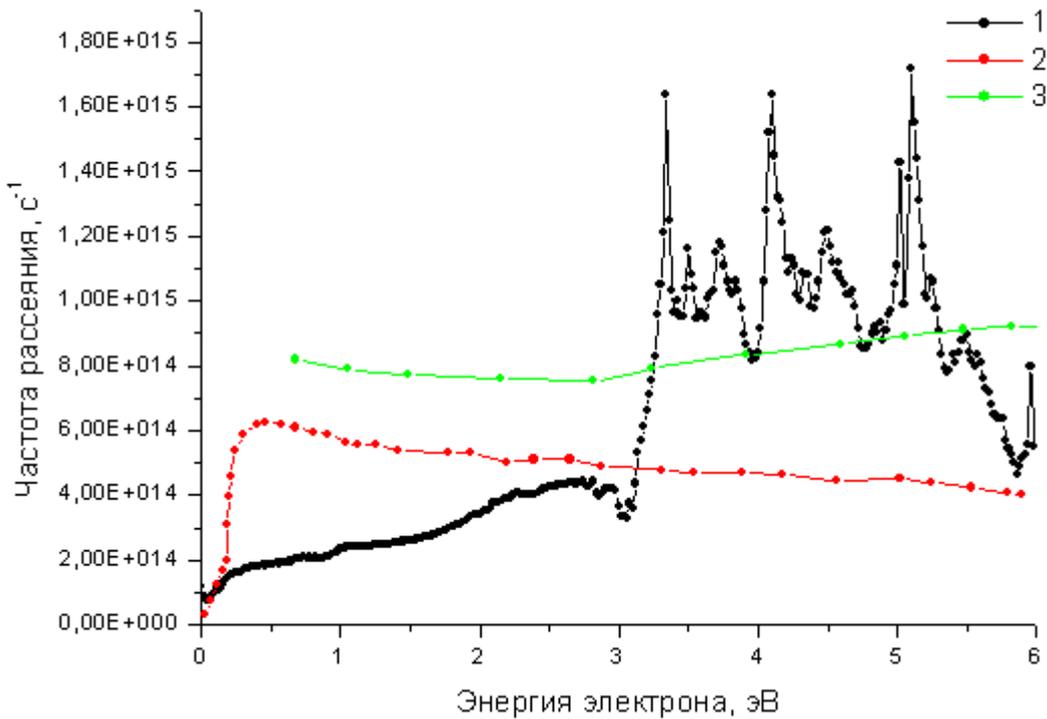


Рис. 13. Сравнение зависимости времени релаксации 1 – данная работа, 2 – [1], 3 – [2].

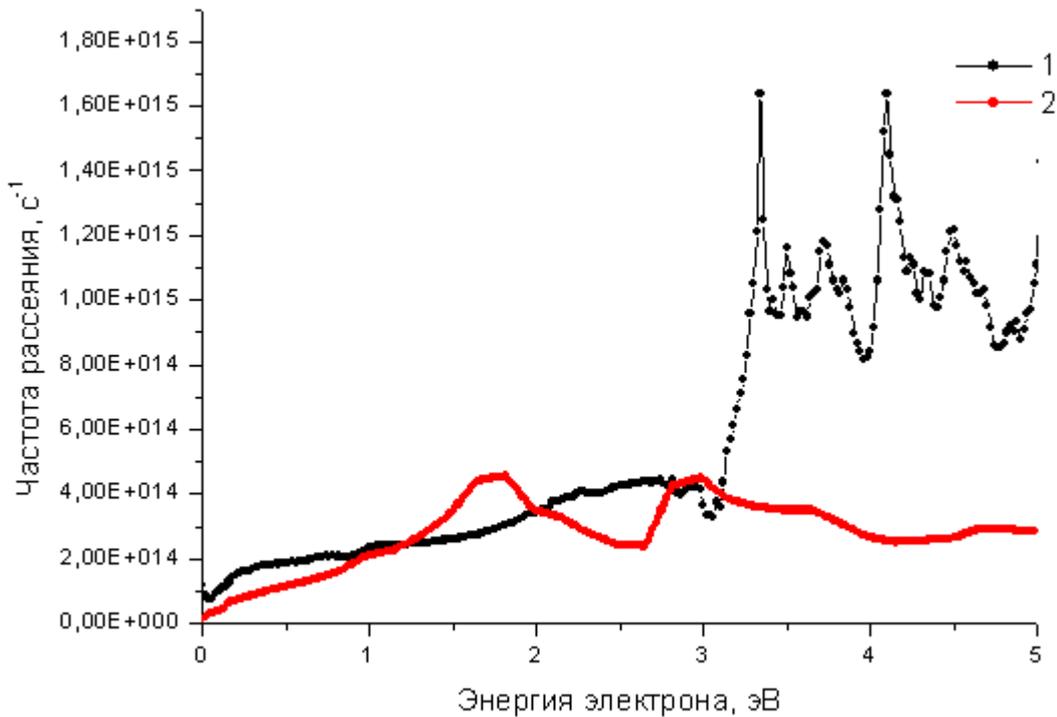


Рис. 14. Сравнение суммарной частоты рассеяния в кремнии и диоксиде кремния. 1 – Si, 2 – SiO<sub>2</sub>.

На рисунке 13, приводится сравнение с результатами полученными в работах [1], [2] для SiO<sub>2</sub>. Видно, что частота рассеяния рассчитанная в нашей работе намного превышает [1] и несколько больше [2]. Эта разница может быть связана с тем, что в работе используется DFT приближение плотности состояния, в отличие от [1] и [2], в которых частоты рассчитывались с помощью параболического приближения. На рисунке 10 приводится сравнение частот рассеяния в Si со статьями [10]-[13]. Результаты нашей работы количественно совпадают с представленными там результатами.

На рисунке 14, приведено сравнение суммарных частот рассеяния в кремнии и в диоксиде. Видно, что суммарная частота рассеяния в кремнии на порядок меньше чем в диоксиде.

Из рисунка 11 следует, что в диоксиде кремния поперечные фононы играют более слабую роль, чем оптические продольные. Это связано со структурой этого полярного диэлектрика.

В кремнии (рисунок 9), основной вклад в рассеяние дают упругие акустические фононы. Рассеяние на продольных оптических фононах существует, но оно мало, из-за большой динамической проницаемости.

Сравнение с результатами работ [1], [2], [10-13], [16] показывает, что вычисленные в данной работе времена релаксации могут быть использованы для решения задач радиационной проводимости в кремнии и диоксиде кремния.

## Список литературы

1. M. V. Fishetti, D. J. DiMaria, S.D. Bronson, T. N. Theis and J.R. Kirtley. Theory of high-field electron transport in silicon dioxide. *Physical Review B* volume 31, number 12, 1985
2. L. Scozzoli, S. Reggiani and M. Rudan. Homogeneous Transport in Silicon Dioxide Using the Spherical-Harmonics Expansion of the BTE. *IEICE Trans.Electron.*, Vol.E83-C, NO.8 August 2000
3. Займан Дж. Электроны и фононы. М., Издательство иностранной литературы 1962
4. А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., 1978.
5. E. Gnani, S. Reggiani, M. Rudan. Density of states and group velocity of electrons in SiO<sub>2</sub> calculated from a full band structure. *Physical Review B* 66, 195205, 2002.
6. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. М., Наука 1976.
7. C. Jacoboni, L. Reggiani. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials. *Rev. Mod. Phys.*, Vol.55, No. 3, July 1983
8. Conwell E., Weisskopf V. F., Theory of impurity scattering in semiconductors, *Phys. Rev.*, 1950, v. 77, p. 388
9. F. Murphy-Armando, S. Fahy. First-principles calculation of carrier-phonon scattering in n-type Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> alloys. *Physical Review B* 78, 035202 2008.
10. T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno. A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impact ionization model. *J. Appl. Phys.* 75, 297 1995
11. M. Michailay et al. *Thin Solid Films* 518, 2437 2010.
12. O.D. Restrepo, K. Varga, S.T. Pantelides. First-principles calculations of electron mobilities in silicon: Phonon and Coulomb scattering. *Appl. Phys. Lett.* 94, 212103 2009
13. Y. M. Niquet, D. Rideau, C. Tavenier, H. Jaouen, X. Blasé, *Phys. Rev. B* 79 245201 2009
14. R.C. Hughes. Hot Electrons in SiO<sub>2</sub>. *Physical Review Letters* volume 35, number 7 1975.
15. S. Y. Savrasov. Linear-response theory and lattice dynamics: A muffin-tin-orbital approach. *Physical Review B* volume 54, number 23, 1996.
16. M.V. Fichetti, S.E. Laux. Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys. *J. Appl. Phys.* 80, 2234, 1996