12

Модель диффузионно-дрейфового транспорта носителей заряда в слоях с фрактальной структурой

© С.Ш. Рехвиашвили, Мурат О. Мамчуев, Мухтар О. Мамчуев

Институт прикладной математики и автоматизации,
Нальчик, Россия

E-mail: rsergo@mail.ru

(Поступила в Редакцию 16 июня 2015 г.
В окончательной редакции 23 сентября 2015 г.)

Предлагается новая теоретическая (полуфеноменологическая) модель диффузионно-дрейфового транспорта носителей заряда в слоях с фрактальной структурой, основанная на дифференциальном уравнении в частных производных дробного порядка по временнóй переменной. В аналитическом виде найдено решение уравнения модели. С помощью численных расчетов показано, что уменьшение порядка дробной производной при наличии внешнего электрического поля приводит к уширению и асимметрии пространственных распределений носителей заряда, что с физической точки зрения соответствует усилению процессов рассеяния.

Работа выполнена при поддержке гранта ОНИТ РАН № 5 „Фундаментальные проблемы физики и технологии эпитаксиальных наноструктур и приборов на их основе“.

1. Введение

Как показывают экспериментальные исследования, эпитаксиальные слои могут иметь самоподобную фрактальную структуру [1]. Известно, в частности, что такой перспективный материал для наноэлектроники, как пористый кремний, обладает выраженной фрактальной структурой. Фрактальную структуру имеют также различные углеродные и металлические эпитаксиальные пленки. Кроме того, экспериментально обнаружено, что эпитаксиальные пленки фуллерита C_{60} образуют развитые фрактальные структуры. В целом эпитаксиальные слои могут формироваться из фрактальных кластеров, которые являются структурообразующими элементами полимеров, керамик, углеродных нанокомпозитов и большого числа природных неорганических веществ. В существенно неравновесных условиях атомы и молекулы объединяются в частицы или кластеры размером в единицы-десятки нанометров, из которых в дальнейшем формируются фрактальные агрегаты и эпитаксиальные слои, характерной особенностью которых являются структурная иерархия, самоподобие, масштабная инвариантность, низкие значения плотности и пористость. Твердотельные фрактальные структуры, образующиеся в результате процессов самоорганизации нанокластеров, вполне справедливо считать новым типом вещества в конденсированном состоянии.

Для описания различных процессов переноса в средах с фрактальной структурой в настоящее время широко применяется математический аппарат дробного интегродифференцирования [2–4]. Это позволяет за счет введения нового параметра модели — порядка дробной производной — избежать численного решения сложных систем интегродифференциальных уравнений. В известной мере основанием для этого являются подходящие математические свойства различных линейных операторов дробного исчисления. Так, дробный интеграл является обобщением n-кратного интеграла, а всюду не дифференцируемые в обычном смысле фрактальные функции могут быть дифференцируемы в смысле дробной производной Римана–Лиувилля, что применимо для описания множественных процессов, например межчастичных столкновений.

Цель нашего исследования — разработка новой теоретической модели кинетики носителей заряда (НЗ) в слое фрактальной структуры с применением математического аппарата дробного интегродифференцирования. В работе решаются следующие задачи: дается физически обоснованный вывод дифференциального уравнения в частных производных дробного порядка, которое описывает диффузионно-дрейфовый транспорт НЗ, в аналитическом виде ищется решение этого уравнения и на основе численных расчетов проводится анализ выражения для плотности заряда. В уравнении используется дробная производная Капуто по времени порядка $\alpha \in (0, 1]$.

2. Вывод уравнения модели

Будем использовать оператор дробного интегродифференцирования Римана–Лиувилля [2–4]

$$D_{\mathrm{st}}^{\alpha} f(t) = \begin{cases} \frac{\operatorname{sign}(t-s)}{\Gamma(-\alpha)} \int\limits_s^t \frac{f(t')}{|t-t'|^{1+\alpha}}\, dt', & \alpha < 0, \\ f(t), & \alpha = 0, \\ \operatorname{sign}^n(t-s) \frac{d^n}{dt^n} D_{\mathrm{st}}^{\alpha-n} f(t), & n-1 < \alpha \le n, \\ & n \in N, \end{cases}$$

а также производную Капуто (регуляризованную дробную производную) [3]

$$\partial_{st}^{\alpha} f(t) = \operatorname{sign}^n(t-s) D_{st}^{\alpha-n} \frac{d^n f(t)}{dt^n}, \ n-1 < \alpha \le n, \ n \in N,$$

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция Эйлера, α — порядок интегродифференцирования. В рассматриваемом в работе случае $n = 1$. Если $f(0) = 0$, то справедливо тождество $D_{0t}^{\alpha} f(t) \equiv \partial_{0t}^{\alpha} f(t)$ [2,3]. Эффективная скорость изменения некоторой физической величины f вводится с учетом приведенных выше операторов через интеграл свертки

$$\left\langle \frac{df}{dt} \right\rangle = \int_0^t g(t-t') \left(\frac{df(t')}{dt'} \right) dt'$$

$$= D_{0t}^{\alpha-1} \frac{df}{dt'} = \partial_{0t}^{\alpha} f, \quad 0 < \alpha \le 1, \tag{1}$$

где $g(t)$ — функция памяти, t — безразмерное время, отнесенное к некоторому характерному времени процесса τ. Физический смысл τ для нашей задачи установлен далее. Такое определение скорости для учета самоподобия и фрактальности какого-либо физического процесса по времени было предложено и обосновано в работах [5,6]. Сама по себе фрактальность по времени, очевидно, связана с наличием внешней диссипативной среды со сложной структурой, в том числе и фрактального типа, в которой происходит физический процесс.

Выражение (1) задает эффективную скорость в момент времени t. Величина этой скорости определяется ее „предысторией", т.е. поведением в моменты времени $0 \le t' < t$. Если $g(t-t') = \delta(t-t')$, где $\delta(t)$ — дельта-функция Дирака, то $\langle df/dt \rangle = df/dt$ и память полностью отсутствует. При $g(t-t') = \theta(t-t')$, где $\theta(x)$ — функция Хевисайда, имеем идеальную память, когда скорость процесса устанавливается на всем временно́м промежутке вплоть до момента t. Реальные диссипативные системы, как правило, обладают „остаточной памятью" (термин заимствован из [7]), которая в наиболее простом виде задается степенной функцией [7]:

$$g(t) = 1/\big(\Gamma(1-\alpha)t^{\alpha}\big).$$

В данном случае феноменологический параметр α определяет степень потери памяти и связан с показателями Гельдера, Херста и фрактальной размерностью процесса по временно́й переменной [6].

Рассмотрим проводящий слой объемом V, в который через поверхность S поступает ток НЗ (электронов и/или дырок). Полный заряд, поступающий за единицу времени через поверхность S, равен

$$\int_S \mathbf{j}\, d\mathbf{S},$$

$$d\mathbf{S} = \mathbf{n}\, dS, \tag{2}$$

где $\mathbf{j}$ — плотность тока НЗ, dS — элемент площади, $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к поверхности S. В объеме слоя также возникает ток, который соответствует исходному количеству заряда. Согласно определению (1), этот ток равен

$$-\frac{1}{\tau}\, \partial_{0t}^{\alpha} \int_V \rho\, dV, \tag{3}$$

где ρ — объемная плотность заряда. Приравнивая (2) и (3), имеем

$$\int_S \mathbf{j}\, d\mathbf{S} = -\frac{1}{\tau} \int_V \partial_{0t}^{\alpha} \rho\, dV. \tag{4}$$

С другой стороны, имеет место теорема Остроградского–Гаусса

$$\int_S \mathbf{j}\, d\mathbf{S} = \int_V (\boldsymbol{\nabla}, \mathbf{j}) dV, \tag{5}$$

где круглые скобки означают скалярное произведение. Сравнивая (4) и (5), получаем уравнение непрерывности

$$\frac{1}{\tau}\, \partial_{0t}^{\alpha} \rho + (\boldsymbol{\nabla}, \mathbf{j}) = 0. \tag{6}$$

Заметим, что уравнение (6) применимо лишь для случая, когда фрактальный слой можно считать макроскопически сплошной средой: данный слой всегда занимает определенный объем и ограничивается некоторой гладкой поверхностью в евклидовом пространстве при произвольном значении метрической фрактальной размерности (так называемый массовый фрактал). При этом свойство фрактальности учитывается через феноменологический параметр α. Такой подход, по существу, подразумевает эргодичность системы, когда пространственная фрактальность учитывается через динамику НЗ по временно́й переменной. Если имеется фрактальная среда, то процесс переноса в ней НЗ должен происходить медленнее, чем в аналогичной сплошной среде. В предлагаемой модели этому соответствует условие $\alpha < 1$. Кроме того, система предполагается „адиабатической", т.е. имеет место условие $\alpha = \text{const}$.

По определению в диффузионно-дрейфовом приближении вектор плотности тока есть

$$\mathbf{j} = \rho\mu\, \mathbf{E} - D\nabla\rho, \tag{7}$$

где $\mathbf{E}$ — вектор напряженности внешнего электрического поля, μ и D — подвижность и коэффициент диффузии НЗ. Считая фрактальную структуру рассматриваемого слоя пространственно однородной и подставляя (7) в (6), находим

$$\frac{1}{\tau}\, \partial_{0t}^{\alpha} \rho + (\mu\mathbf{E}, \nabla\rho) - D\Delta\rho = 0. \tag{8}$$

При наличии процессов генерации и рекомбинации НЗ уравнение (8) принимает вид

$$\frac{1}{\tau}\, \partial_{0t}^{\alpha} \rho + (\mu\mathbf{E}, \nabla\rho) - D\Delta\rho = q(G - R), \tag{9}$$

где q — заряд электрона, G и R — функции, которые характеризуют темпы генерации и рекомбинации НЗ. Уравнение (9) представляет собой основное дифференциальное уравнение в частных производных дробного порядка предлагаемой в настоящей работе теоретической модели транспорта НЗ в слое фрактальной структуры.

3. Аналитическое решение уравнения модели и численные расчеты

Для простоты рассмотрим одномерное движение НЗ. Обобщение на трехмерный случай носит в известной мере формальный характер. Уравнение (9) запишем в виде

$$\partial_{0t}^{\alpha}\rho - \frac{\partial^2\rho}{\partial x^2} + a\,\frac{\partial\rho}{\partial x} = F(x,t), \tag{10}$$

$$a = \mu E\sqrt{\frac{\tau}{D}} = \text{const}, \quad F = q\tau(G-R).$$

В уравнении (10) пространственная переменная x является безразмерной и отнесена к диффузионной длине $\sqrt{D\tau}$. Здесь выясняется и физический смысл параметра τ. Это время жизни НЗ. Для уравнения (10) будем рассматривать задачу Коши с начальным условием вида $\rho(x,0)=\rho_0(x)$. При этом будем искать ограниченное на бесконечности решение. Чтобы решить уравнение (10), сделаем замену

$$\rho(x,t) = \exp(ax/2)u(x,t). \tag{11}$$

Подставляя (11) в (10), приходим к уравнению

$$\partial_{0t}^{\alpha}u - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + bu = \exp(-ax/2)F(x,t), \tag{12}$$

$$u(x,0) = \exp(-ax/2)\rho_0(x), \tag{13}$$

где $b = a^2/4$. Различные краевые задачи для уравнений вида (12) и методы их решения подробно рассмотрены в монографии [8]. Используя результаты этой работы, находим решение нашей задачи в виде

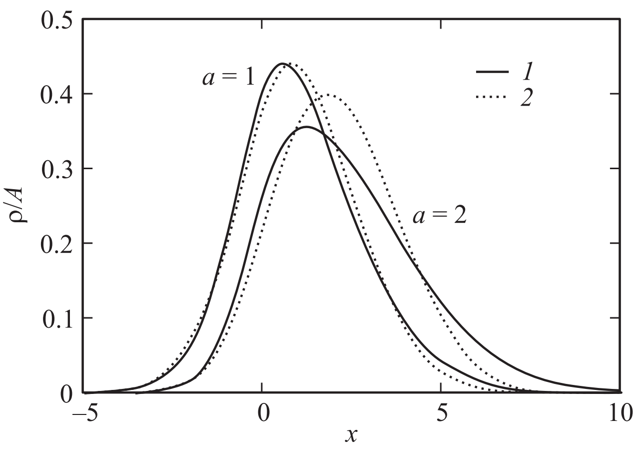
$$\rho(x,t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\rho_0(\xi)D_{0t}^{\alpha-1}k(x-\xi,t)d\xi + \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{0}^{y}k(x-\xi,y-\eta)F(\xi,\eta)d\eta\,d\xi,$$

$$k(x,t) = \frac{\exp(ax/2)}{2t} \times \int\limits_{|x|}^{\infty}\phi\left(-\frac{\alpha}{2},0;-\frac{t'}{t^{\alpha/2}}\right)J_0\left(\frac{a\sqrt{t'^2-x^2}}{2}\right)dt',$$

$$\phi(\alpha,\beta;t) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!\Gamma(\alpha n+\beta)},$$

$$J_0(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!\Gamma(n+1)}\left(\frac{t}{2}\right)^{2n}, \tag{14}$$

где $\phi(\alpha,\beta;t)$ и $J_0(t)$ — функции Райта и Бесселя.



Профили распределения объемной плотности НЗ в слое с фрактальной структурой. Численные значения параметров: $t = B = 1$; $\alpha = 0.7$ (*1*) и 0.9 (*2*).

Чтобы определить роль параметра α в кинетике НЗ во фрактальном слое, рассмотрим случай, когда отсутствуют процессы генерации и рекомбинации, т. е. $F = 0$. Решение в этом упрощенном случае представимо в виде

$$\rho(x,t) = \frac{1}{2t^{\alpha}}\int\limits_{0}^{\infty}\phi\left(-\frac{\alpha}{2},1-\alpha;-\frac{t'}{t^{\alpha/2}}\right)dt' \times \int\limits_{-t'}^{t'}\rho_0(x-z)\exp\left(\frac{az}{2}\right)J_0\left(\frac{a\sqrt{t'^2-z^2}}{2}\right)dz. \tag{15}$$

Далее будем предполагать, что исходное пространственное распределение НЗ имеет гауссову форму

$$\rho_0(x) = A\exp(-Bx^2),$$

где A и B — положительные константы. Пространственный профиль распределения НЗ такой формы может быть сформирован с помощью инжекции из электрода или путем импульсного лазерного облучения образца.

На рисунке представлены результаты численного расчета по формуле (15). В расчетах использовалось интегральное представление для функции Райта (см. [3, С. 46]). Как показывают проведенные расчеты, заметное влияние параметра α на пространственное распределение НЗ имеет место при увеличении численного значения параметра a. Физически это означает, что фрактальная структура образца должна оказывать влияние на кинетику НЗ тем сильнее, чем выше напряженность внешнего электрического поля. Кроме того, обращает на себя внимание асимметрия пространственных распределений НЗ, которая отчетливо выявляется при изменении численных значений параметров a и α. При увеличении a и уменьшении α происходит значительное уширение этих распределений, причем их асимметрия становится более выраженной. Физически это соответствует активизации процессов рассеяния НЗ. Данные результаты качественно согласуются с результатами, полученными ранее в рамках различных теоретических моделей дисперсионного транспорта НЗ в неупорядоченных средах [9–13].

4. Заключение

Фрактальная структура слоев, полученных такими методами, как молекулярно-лучевое осаждение, газофазная и жидкофазная эпитаксия, тесно связана с условиями проведения этих процессов. Уже достоверно установлено, что фрактальная структура этих слоев непосредственно сказывается на их электрофизических свойствах. В настоящей работе показано, что значение порядка дробной производной по времени в дифференциальном уравнении диффузионно-дрейфовой модели, связанное с фрактальной размерностью, существенно сказывается на характере кинетики НЗ. При $\alpha = 1$ имеет место классический диффузионно-дрейфовый транспорт НЗ; в теории случайных процессов это так называемый винеровский процесс с непрерывным временем. При $\alpha < 1$ имеет место антиперсистентный диффузионно-дрейфовый транспорт НЗ, которому свойственны учащение процессов упругого и неупругого рассеяния и потеря памяти при диссипативном движении НЗ. Отметим в целом, что аномалии кинетики НЗ в нашем случае связываются с фрактальными свойствами блужданий НЗ в евклидовом пространстве под действием внешнего электрического поля. В рамках предложенной в настоящей работе модели параметр α не вычисляется из каких-либо физических соображений. Этот параметр может быть определен на основе экспериментальных данных для каждого отдельного образца.

Авторы искренне признательны А.В. Псху за обсуждение работы и весьма ценные замечания.

Список литературы

[1] Н.А. Торохов, В.Г. Божков, И.В. Ивонин, В.А. Новиков. ФТП **43**, *1*, 38 (2009).
[2] А.М. Нахушев. Дробное исчисление и его применение. Физматлит, М. (2003). 272 с.
[3] А.В. Псху. Уравнения в частных производных дробного порядка. Наука, М. (2005). 199 с.
[4] С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Наука и техника, Минск (1987). 688 с.
[5] С.Ш. Рехвиашвили. Письма в ЖТФ **30**, *2*, 33 (2004).
[6] С.Ш. Рехвиашвили. Нелинейный мир **5**, *4*, 194 (2007).
[7] Р.Р. Нигматуллин. ТМФ **90**, *3*, 354 (1992).
[8] М.О. Мамчуев. Краевые задачи для уравнений и систем уравнений с частными производными дробного порядка. Изд-во КБНЦ РАН, Нальчик (2013). 200 с.
[9] И.П. Звягин. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. Изд-во МГУ, М. (1984). 192 с.
[10] Р.Т. Сибатов, В.В. Учайкин. ФТП **41**, *3*, 346 (2007).
[11] С.Ш. Рехвиашвили. ФТТ **49**, *8*, 1522 (2007).
[12] В.В. Учайкин. Метод дробных производных. Артишок, Ульяновск (2008). 512 с.
[13] Р.Т. Сибатов, В.В. Учайкин. УФН **179**, *10*, 1079 (2009).