

О подвижности носителей заряда определенной энергии

© Ю.М. Белоусов, В.Н. Горелкин, И.В. Черноусов

Московский физико-технический институт (государственный университет),
141701 Долгопрудный, Россия

E-mail: ichernousov@inbox.ru

(Получена 8 сентября 2016 г. Принята к печати 27 апреля 2017 г.)

Рассматривается функция квазиподвижности носителей заряда с заданной энергией для описания их динамики с помощью кинетического уравнения в важном случае изотропного двухмоментного приближения. В стационарном случае функция квазиподвижности не зависит от функции источника носителей и позволяет вычислить интегральную подвижность. Анализируется связь квазиподвижности с параметрами системы. Доказывается, что в общем случае эта характеристика не описывает вклад в подвижность носителей с определенной энергией. Как известно, в случае почти упругого рассеяния понятие квазиподвижности может иметь красивый физический смысл, однако для случая рассеяния носителей на акустических фонах в твердом теле такая интерпретация квазиподвижности оказывается неверной из-за особенностей интеграла столкновений и вида функции квазиподвижности.

DOI: 10.21883/FTP.2018.01.45314.8404

1. Введение

В последнее десятилетие происходит бурное развитие электроники на основе алмаза, которое связано с уникальными характеристиками этого широкозонного полупроводникового материала: рекордными значениями твердости, скорости звука, теплопроводности, ширины запрещенной зоны, напряженности пробоя, подвижности носителей, устойчивости к радиационному излучению [1]. Такие характеристики позволяют применять созданные на его основе приборы (как пассивные, типа детекторов частиц, так и активные, типа электронных вентилях) в экстремальных условиях высоких температур, сильного радиационного облучения и большого проходящего тока [2–5]. Это делает алмаз перспективным для использования в атомной промышленности, космических исследованиях, экспериментальной физике плазмы и физике высоких энергий, системах радиолокации и связи.

Технологический прогресс позволяет в настоящее время как синтезировать образцы заданных характеристик, высокого качества и повторяемости [2,4], так и надежно создавать на их основе нужные структуры и комбинировать их с элементами из других материалов, в том числе с электрическими контактами.

Как для конструирования приборов с нужными свойствами, так и для разработки новых устройств с уникальными характеристиками необходимо правильно описывать и рассчитывать кинетику движения носителей заряда в алмазе при различных концентрациях и составе примесей в различных внешних полях и при разных геометриях образца. Уникальные свойства алмаза указывают на то, что в нем могут значительно, по сравнению с обычными полупроводниками, проявляться некоторые необычные кинетические эффекты. Так, при исследовании алмаза мюонным методом [6,7] были получены результаты, которые могли объясняться возникновением

у носителей заряда абсолютной отрицательной подвижности (АОП), при которой носители в среднем двигаются против приложенного электрического поля [8–11]. Предполагалось, что возможная АОП в алмазе связана с сильной неупругостью рассеяния носителей заряда на акустических фонах, вызванной рекордной скоростью звука в алмазе, при температурах порядка 10 К [12]. На первом этапе этих исследований в почти упругом, диффузионно-дрейфовом приближении [12] была, следуя [13], введена характеристика носителей с заданной энергией, которая первоначально считалась подвижностью таких носителей. Эта функция при некоторых энергиях частиц оказывалась отрицательной и приводила к возможности существования интегральной АОП. Последовательный учет неупругости актов взаимодействия носителей с фонами сначала в пространственно однородном случае [14,15], а потом и в пространственно неоднородном случае [16–18] показал, что интегральной АОП добиться не удастся. Тем не менее оставался открытым вопрос о смысле функции, характеризующей носители данной энергии и могущей принимать отрицательные значения.

2. Кинетическое уравнение Больцмана в двухмоментном приближении и квазиподвижность

Запишем уравнение Больцмана для функции распределения носителей заряда $f \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ в электрическом поле в виде:

$$\begin{aligned} \partial f / \partial t + \hbar \mathbf{k} / m \cdot \partial f / \partial \mathbf{r} + e_q \mathbf{E} / \hbar \cdot \partial f / \partial \mathbf{k} \\ = J_{st}\{f\} + q(\varepsilon) - v_{cap}(\varepsilon)f, \quad (1) \end{aligned}$$

где e_q — заряд носителя, \mathbf{E} — самосогласованное электрическое поле, \mathbf{k} — волновой вектор носителей

заряда, $J_{st}\{f\}$ — интеграл столкновений, $q(\varepsilon)$ плотность источников носителей заряда с энергией ε , $\nu_{cap}(\varepsilon)$ — частота захвата носителей с энергией $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$, m — эффективная масса носителя заряда.

В пространственно однородном случае второй член в левой части (1) отсутствует, и уравнение упрощается:

$$\partial f / \partial t + e_q \mathbf{E} / \hbar \cdot \partial f / \partial \mathbf{k} = J_{st}\{f\} + q - \nu_{cap} f. \quad (2)$$

Будем считать внешнее электрическое поле и, следовательно, самосогласованное поле слабыми, когда можно пренебречь квадратичными по нему слагаемыми. В двухмоментном приближении функция распределения представляется в виде суммы первых двух членов разложения по полиномам Лежандра — изотропной (сферически симметричной) и дипольной части¹:

$$f(\mathbf{k}, t) = f_0(\varepsilon, t) + (\mathbf{E}\mathbf{k})\varphi(\varepsilon, t). \quad (3)$$

Как обычно, $f_0(\varepsilon, t)$ нормируется на плотность носителей, а $\varphi(\varepsilon, t)$ — на плотность тока носителей:

$$n(t) = \int f(\mathbf{k}, t) d\mathbf{k} / (2\pi)^3 = C_f \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} f_0(\varepsilon, t) d\varepsilon, \quad (4)$$

$$\mathbf{j} = \frac{2e_q}{3\hbar} C_f \mathbf{E} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \varphi(\varepsilon, t) d\varepsilon = e_q n \mu \mathbf{E}, \quad (5)$$

где $C_f = (2m)^{3/2} / 4\pi^2 \hbar^3$,

$$\mu = \frac{2}{3\hbar} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \varphi(\varepsilon, t) d\varepsilon / \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} f_0(\varepsilon, t) d\varepsilon \quad (6)$$

— подвижность системы носителей заряда.

Уравнение (1) при этом сводится к системе двух уравнений, которая в стационарном случае имеет вид

$$0 = J_{st}^{(0)}\{f_0\} + q - \nu_{cap} \cdot \{f_0\} \quad (7)$$

$$e_q \hbar / m \cdot \partial f_0 / \partial \varepsilon = J_{st}^{(1)}\{\varphi\} - \nu_{cap} \cdot \varphi \quad (8)$$

где $J_{st}^{(0)}\{\dots\}$, $J_{st}^{(1)}\{\dots\}$ — некоторые функционалы.

Функцию φ , необходимую для нахождения подвижности, получим из (8) с помощью функции Грина $G(\varepsilon, \varepsilon_0)$:

$$\varphi(\varepsilon) = - \int_0^{+\infty} \frac{e_q \hbar}{m} \frac{\partial f_0(\varepsilon_0)}{\partial \varepsilon_0} G(\varepsilon, \varepsilon_0) d\varepsilon_0. \quad (9)$$

$G(\varepsilon, \varepsilon_0)$ удовлетворяет уравнению

$$-\delta(\varepsilon - \varepsilon_0) = -J_{st}^{(1)}\{G(\varepsilon, \varepsilon_0)\} + \nu_{cap}(\varepsilon) G(\varepsilon, \varepsilon_0). \quad (10)$$

¹ В пространственно неоднородных задачах даже в очень слабых полях для описания функции распределения могут быть существенно необходимы члены разложения высших порядков. Также двухмоментное приближение может не давать количественно правильные результаты при сильной неупругости рассеяния [19].

Преобразуем выражение для подвижности (6), поменяв порядок интегрирования и выполнив интегрирование по частям. Для интеграла в числителе имеем:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \varphi d\varepsilon &= - \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \left[\int_0^{+\infty} \frac{e_q \hbar}{m} \frac{\partial f_0(\varepsilon_0)}{\partial \varepsilon_0} G(\varepsilon, \varepsilon_0) d\varepsilon_0 \right] d\varepsilon \\ &= - \frac{e_q \hbar}{m} f_0(\varepsilon_0) \int_0^{+\infty} \varepsilon^{3/2} G(\varepsilon, \varepsilon_0) d\varepsilon \Big|_0^{+\infty} \\ &\quad + \frac{e_q \hbar}{m} \int_0^{+\infty} f_0(\varepsilon_0) \frac{\partial}{\partial \varepsilon_0} \left[\int_0^{+\infty} \varepsilon^{3/2} G(\varepsilon, \varepsilon_0) d\varepsilon \right] d\varepsilon_0. \end{aligned} \quad (11)$$

В разумных практических случаях первое слагаемое обращается в нуль, поэтому

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{2}{3\hbar} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \varphi d\varepsilon / \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} f_0 d\varepsilon \\ &= \int_0^\infty K(\varepsilon_0) \sqrt{\varepsilon_0} f_0(\varepsilon_0) d\varepsilon_0 / \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} f_0(\varepsilon) d\varepsilon, \end{aligned} \quad (12)$$

где функцию

$$K(\varepsilon_0) = \frac{2e_q}{3m} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \int_0^{+\infty} \varepsilon^{3/2} G(\varepsilon, \varepsilon_0) d\varepsilon \quad (13)$$

назовем квазиподвижностью.

3. Квазиподвижность и плотность тока

Введенная выше функция квазиподвижности имеет смысл, отличный от функции реальной подвижности $K_{real}(\varepsilon)$, определяемой через плотность тока в соответствии с общепринятой формулой:

$$\begin{aligned} K_{real}(\varepsilon) &= dj/dN \\ &= 2C_f / 3\hbar \cdot \varepsilon^{3/2} \varphi(\varepsilon) d\varepsilon / (C_f \sqrt{\varepsilon} f_0(\varepsilon) d\varepsilon) \\ &= 2/3\hbar \cdot \varepsilon \varphi / f_0. \end{aligned} \quad (14)$$

Из формул (13) и (14) видно, что функции $K(\varepsilon)$ и $K_{real}(\varepsilon)$ могут иметь разный вид и смысл. Заметим прежде всего, что, в отличие от $K_{real}(\varepsilon)$ функция $K(\varepsilon)$ не зависит от функции источника носителей $q(\varepsilon)$ и поэтому более универсальна. Действительно, $K(\varepsilon)$ определяется только интегралом столкновений и стоком носителей и не зависит от $q(\varepsilon)$, в то время как вид $K_{real}(\varepsilon)$ явно определяется $f_0(\varepsilon)$, зависящей от $q(\varepsilon)$. При этом, несмотря на произвол в выборе $q(\varepsilon)$, стационарная $f_0(\varepsilon)$ не может получиться произвольной, поскольку она также определяется зависимостью скорости захвата от энергии $\nu_{cap}(\varepsilon)$.

В приближении упругих столкновений функция $K(\varepsilon)$ и ее смысл были впервые подробно изучены Хаксли и Кромптоном (см., например, [13]). В приближении времени релаксации

$$J_{st}^{(1)}\{\varphi\} = -\nu_{tr} \cdot \varphi, \quad (15)$$

где ν_{tr} — транспортная частота. Тогда (8) принимает вид

$$e_q \hbar / m \cdot \partial f_0 / \partial \varepsilon = -\nu_{tot} \cdot \varphi, \quad (16)$$

где $\nu_{tot}(\varepsilon) = \nu_{tr}(\varepsilon) + \nu_{cap}(\varepsilon)$ — полная частота.

Из (16) и (6) имеем

$$\mu = -\frac{2e_q}{3m} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{\nu_{tot}(\varepsilon)} \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon / \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} f_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (17)$$

Следуя [13], проинтегрируем числитель по частям, тогда при разумных предположениях о поведении $\nu_{tot}(\varepsilon)$ в 0 и ∞ по энергии получим, что

$$K(\varepsilon) = \frac{2e_q}{3m} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(\frac{\varepsilon^{3/2}}{\nu_{tot}(\varepsilon)} \right)' = \frac{e_q}{m} \cdot \frac{1}{\nu_{tot}(\varepsilon)} \left(1 - \frac{2\nu_{tot}'(\varepsilon)}{3\nu_{tot}(\varepsilon)} \varepsilon \right). \quad (18)$$

Здесь и далее для краткости $(\dots)' \equiv \partial(\dots)/\partial \varepsilon$. Заметим, (18) можно также сразу получить из (13) с помощью функции Грина.

Истинная подвижность частиц с определенной энергией в этом случае равна

$$K_{real}(\varepsilon) = dj/dN = -\frac{2e_q}{3m} \frac{\varepsilon}{\nu_{tot}(\varepsilon)} \frac{\partial f_0 / \partial \varepsilon}{f_0}. \quad (19)$$

Видно, что частицы с энергией, при которой $\partial f_0(\varepsilon)/\partial \varepsilon > 0$, будут иметь отрицательную подвижность (условие реализуется в заведомо неравновесном случае), что может существенно повлиять на интегральную подвижность.

Одна и та же функция квазиподвижности $K(\varepsilon)$ может определяться разными $\nu(\varepsilon)$. Действительно, пусть две функции $\nu(\varepsilon)$ и $\tilde{\nu}(\varepsilon)$ дают одну и ту же $K(\varepsilon)$:

$$K(\varepsilon) = \frac{2e_q}{3m} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(\frac{\varepsilon^{3/2}}{\nu(\varepsilon)} \right)' \equiv \frac{2e_q}{3m} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(\frac{\varepsilon^{3/2}}{\tilde{\nu}(\varepsilon)} \right)'. \quad (20)$$

Тогда получаем связь между этими частотами:

$$\begin{aligned} (\varepsilon^{3/2}/\nu(\varepsilon))' &\equiv (\varepsilon^{3/2}/\tilde{\nu}(\varepsilon))', \\ 1/\nu(\varepsilon) &\equiv 1/\tilde{\nu}(\varepsilon) + C/\varepsilon^{3/2}, \end{aligned} \quad (21)$$

где C — некоторая константа.

Из (15) и (18) следует правило сложения квазиподвижностей. Пусть есть N независимых физических механизмов, за счет которых происходит рассеяние носителей, каждый из которых определяет свой интеграл

столкновений $J^{(i)}\{\varphi\}$ и свою квазиподвижность $K^{(i)}$, $i = \overline{1, N}$. Пусть $K^{(tot)}$ — квазиподвижность в системе, где имеются все N механизмов рассеяния. Нам интересно, как выражается $K^{(tot)}$ непосредственно через $K^{(i)}$, $i = \overline{1, N}$. В общем случае найти эту связь затруднительно. Однако в случае, когда элементарные акты почти упругие, работает приближение времени релаксации. Будем считать известными транспортные частоты $\nu^{(i)}$, $i = \overline{1, N}$ для всех механизмов рассеяния, при этом частоту захвата включим в одну из транспортных частот. Тогда из (15) имеем:

$$J^{(i)}\{\varphi\} = -\nu^{(i)} \cdot \varphi, \quad i = \overline{1, N}; \quad J^{(tot)}\{\varphi\} = -\nu^{(tot)} \cdot \varphi,$$

где

$$\begin{aligned} \nu^{(tot)} &= \sum_{i=1}^N \nu^{(i)}; \quad K^{(i)}(\varepsilon) = \frac{2e_q}{m} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(\frac{\varepsilon^{3/2}}{\nu^{(i)}} \right), \\ \nu^{(i)}(\varepsilon) &= 2e_q \varepsilon^{3/2} / \left(3mH^{(i)}(\varepsilon) \right). \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь $H^{(i)}(\varepsilon) = \int_{d^{(i)}}^\varepsilon x^{1/2} K^{(i)}(x) dx + C^{(i)}$, а $d^{(i)}$, $C^{(i)}$ — некоторые постоянные, обеспечивающие, при известной функции $K^{(i)}(x)$, правильное поведение транспортной частоты. Заметим, что в случае $\nu^{(i)}(\varepsilon) \propto \varepsilon^\alpha$, $0 < \alpha < 3/2$, можно положить $d^{(i)} = C^{(i)} = 0$.

Тогда

$$\begin{aligned} K^{(tot)}(\varepsilon) &= \frac{2e_q}{3m} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon^{3/2}}{\nu^{(tot)}} \\ &= \frac{2e_q}{3m} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ \varepsilon^{3/2} / \left[\sum_{i=1}^N 2e_q \varepsilon^{3/2} / \left(3mH^{(i)} \right) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ 1 / \left[\sum_{i=1}^N 1/H^{(i)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (23)$$

Окончательно получаем общую формулу для сложения квазиподвижностей, обусловленных N независимыми механизмами, в приближении времени релаксации:

$$\begin{aligned} K^{(tot)}(\varepsilon) &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(1 \sum_{i=1}^N 1/H^{(i)} \right)' \\ &= \left(\sum_{i=1}^N K^{(i)} / \left(H^{(i)} \right)^2 \right) / \left(\sum_{i=1}^N 1/H^{(i)} \right)^2. \end{aligned} \quad (24)$$

4. Универсальность функции квазиподвижности при рассеянии на акустических фононах в твердых телах

Рассмотрим теперь случай неупругого рассеяния носителей на акустических фононах в кристаллах в

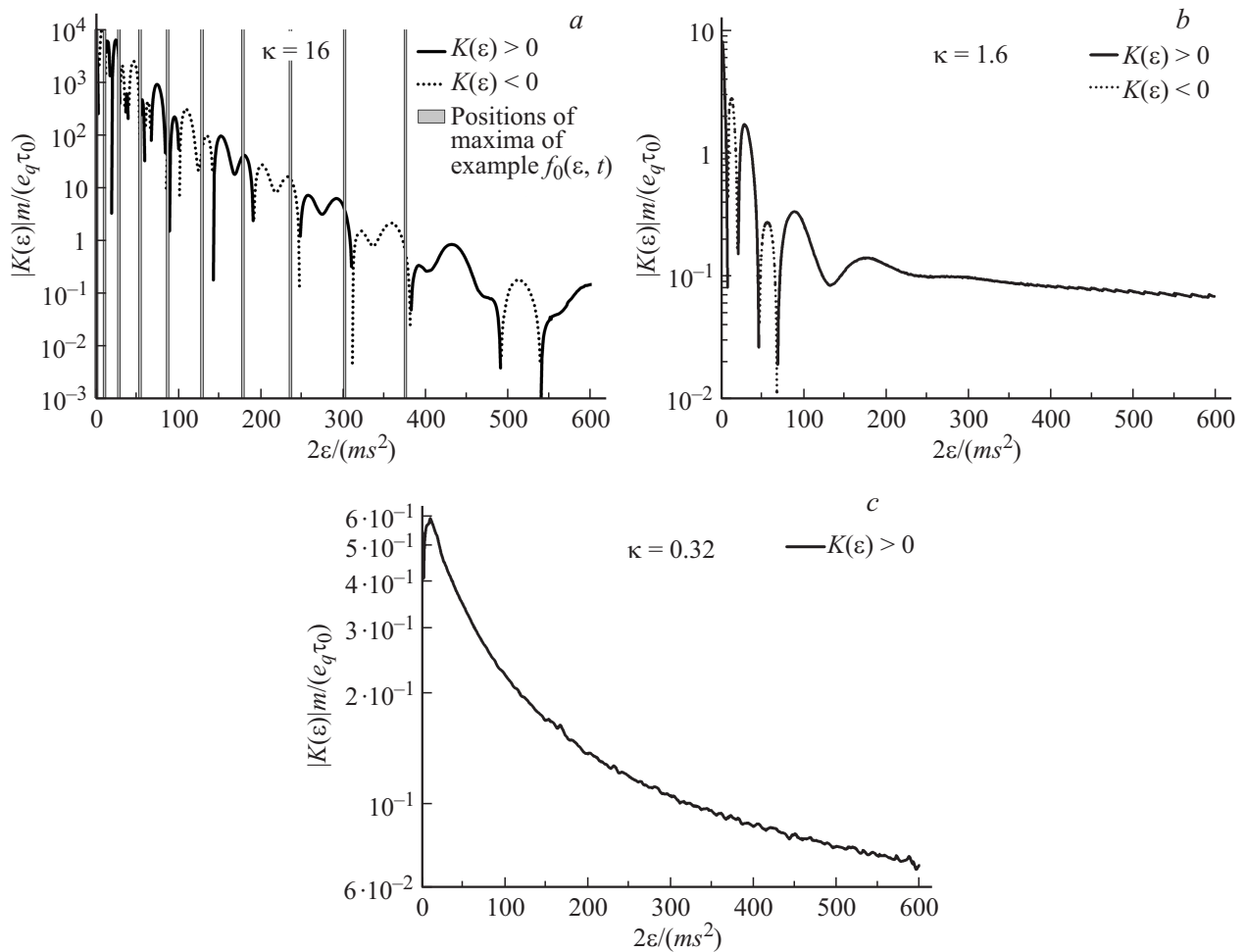


Рис. 1. *a* — зависимость модуля обезразмеренной квазиподвижности от обезразмеренной энергии при $\kappa = 16$. Для иллюстрации „перескоков“ носителей по энергии вертикальными линиями отмечены начальная энергия носителей (крайне правая линия) и энергии, куда в основном переходят носители при испускании фононов; *b* — зависимость модуля обезразмеренной квазиподвижности от обезразмеренной энергии при $\kappa = 1.6$; *c* — зависимость модуля обезразмеренной квазиподвижности от обезразмеренной энергии при $\kappa = 0.32$.

изотропном случае. Выражения для входящих в (7) и (8) интегралов столкновений были получены в [14] в двухмоментном приближении методом потенциала деформации:

$$J_{st}^{(0)}\{f_0\} = C(\varepsilon) \int_{q_0 - q_\varepsilon}^{q_0 + q_\varepsilon} \text{sign}(q) \left\{ f_0(\varepsilon + \hbar s q) \times (\bar{n}(q) + 1) - f_0(\varepsilon) \bar{n}(q) \right\} q^2 dq, \quad (25)$$

$$J_{st}^{(1)}\{\varphi\} = C(\varepsilon) \int_{q_0 - q_\varepsilon}^{q_0 + q_\varepsilon} \text{sign}(q) \left\{ \varphi(\varepsilon + \hbar s q) \times \left[1 - (\hbar^2 q^2 / 2m - \hbar s q) / 2\varepsilon \right] (\bar{n}(q) + 1) - \varphi(\varepsilon) \bar{n}(q) \right\} q^2 dq, \quad (26)$$

где $q_0 = 2ms/\hbar$, $q_\varepsilon = 2\sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$, $C(\varepsilon) = \hbar^2 \times \sqrt{ms^2/2\varepsilon} / (8\tau_0 m^3 s^3)$, $\tau_0 = \pi \rho \hbar^4 / 2\varepsilon^2 m^3 s$ дает харак-

терное время рассеяния носителя на акустическом фоне [14], Ξ — константа деформационного потенциала, ρ — плотность материала, s — скорость звука в кристалле, $\bar{n}(q) = 1/(\exp(\hbar s q/k_B T) - 1)$ — среднее число фононов с волновым вектором q , T — температура кристалла, k_B — постоянная Больцмана, $\hbar s q$ — энергия фонона. Как показано далее, эти формулы справедливы, когда можно пренебречь конечностью температуры Дебая Θ_D .

Интегралы столкновений для f_0 и φ (25), (26) можно переписать в безразмерных переменных, сделав замену: $\varepsilon \rightarrow 2\varepsilon/ms^2$, $q \rightarrow q/q_0$, $\kappa \rightarrow 2ms^2/k_B T$, $t \rightarrow t/\tau_0$, $\varphi \rightarrow \varphi m^2 s^2 / (2e_q \hbar \tau_0)$:

$$J_{st}\{f_0\} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_{1-\sqrt{\varepsilon}}^{1+\sqrt{\varepsilon}} \text{sign}(q) \left\{ f_0(\varepsilon + 4q, t) (\bar{n}(q) + 1) - f_0(\varepsilon, t) \bar{n}(q) \right\} q^2 dq, \quad (27)$$

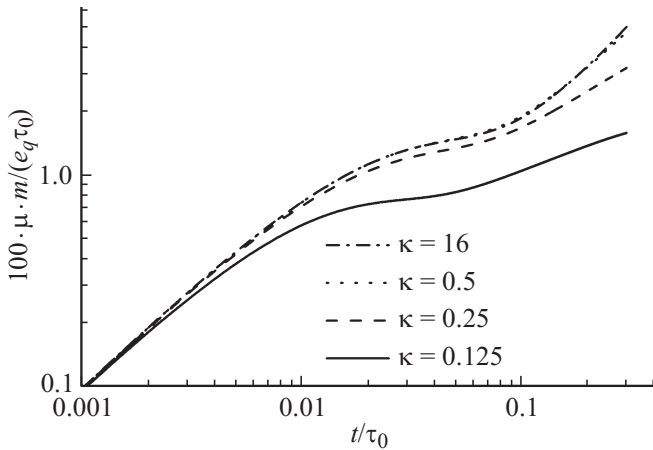


Рис. 2. Зависимость подвижности от времени для носителей с начальной энергией $2\varepsilon/ms^2 = 125$ при $\kappa = 16$ (что соответствует отрицательной квазиподвижности — см. рис. 1, *a*) и при $\kappa \approx 0.5, 0.25, 0.125$ (для параметров алмаза и носителей, взятых из [15], это соответствует $T = 2, 64, 128$ и 256 К).

$$J_{st}\{\varphi\} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_{1-\sqrt{\varepsilon}}^{1+\sqrt{\varepsilon}} \text{sign}(q) \left\{ \varphi(\varepsilon + 4q, t) \left[1 - \frac{2}{\varepsilon} (q^2 - q) \right] \times (\bar{n}(q) + 1) - \varphi(\varepsilon, t) \bar{n}(q) \right\} q^2 dq. \quad (28)$$

В рамках принятых приближений обезразмеривание позволяет получить универсальные для любых материалов зависимости обезразмеренной $K(\varepsilon)$. Опуская громоздкое описание численных расчетов, проведенных при вычислении функции (13), приведем полученные универсальные графики для чистого образца при различных κ (рис. 1, *a, b, c*).

При $\kappa < 0.75$ областей отрицательных значений $K(\varepsilon)$ нет (последняя исчезает в районе $2\varepsilon/ms^2 \approx 10$). При понижении температуры (т.е. при $\kappa \geq 0.75$) в области малых энергий начинают возникать осцилляции функции $K(\varepsilon)$, и появляются области отрицательной квазиподвижности. С уменьшением T в районе относительно небольших энергий происходит увеличение абсолютных значений функции $K(\varepsilon)$; ее осцилляции распространяются в область больших энергий. При $\kappa \approx 16$ зоны квазиподвижности определенного знака в области малых энергий начинают разбиваться на отдельные, более узкие зоны.

В работе [13] было показано, что в приближении упругих столкновений квазиподвижность имеет смысл подвижности ансамбля носителей, имеющих фиксированную энергию, вычисленную через среднее смещение в пространстве после большого числа актов рассеяния носителей. При этом считалось, что энергия носителей меняется только за счет работы электрического поля при абсолютно упругом рассеянии.

Возникает вопрос — можно ли в случае рассеяния носителей заряда в твердом теле на акустических фононах приписывать $K(\varepsilon)$ такой физический смысл.

Рассмотрим эволюцию ансамбля носителей, имеющих определенную начальную энергию, с помощью временного уравнения Больцмана [15] в чистом образце. График подвижности, полученной в каждый момент времени, показан на рис. 2.

Ни одна из кривых не демонстрирует ни АОП, ни даже дифференциальной отрицательной подвижности, хотя, например, для $\kappa = 16$ начальная энергия носителей дает отрицательную квазиподвижность.

5. Обсуждение результатов

Оказывается, что причиной неприменимости физической интерпретации $K(\varepsilon)$, введенной в [13], в данном случае является существенная неупругость рассеяния на акустических фононах и, самое главное, слишком узкие по энергии зоны квазиподвижности определенного знака.

Действительно, пусть в начальный момент времени все частицы имеют определенную энергию: $f_0(\varepsilon) = C \cdot \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$. Для такого распределения выражение (27) принимает вид:

$$J_{st}\{f_0\} = \begin{cases} C \cdot \text{sign}(z) (\bar{n}(z) + 1) z^2 / (4\sqrt{\varepsilon_0 - 4z}), & \varepsilon \in I; \\ 0, & \varepsilon \notin I. \end{cases} \quad (29)$$

Здесь

$$I = \left((\sqrt{\varepsilon_0} - 2)^2; (\sqrt{\varepsilon_0} + 2)^2 \right), \quad z = (\varepsilon_0 - \varepsilon)/4,$$

$\bar{n}(z) = 1/(\exp(\kappa z) - 1)$. Таким образом, за один элементарный акт носитель с энергией ε_0 может менять ее в пределах „области перескока“ I , что следует напрямую из законов сохранения энергии и квазиимпульса (см. рис. 3).

Заметим, что функция $g(z) = \text{sign}(z) (\bar{n}(z) + 1) z^2$ определяет поведение (29) при всех энергиях, кроме значений, близких к нулю, где поведение интеграла столкновений сильно зависит от множителя $1/\sqrt{\varepsilon_0 - 4z} \equiv 1/\sqrt{\varepsilon}$. Функция $g(z)$ не меняет знак при изменении знака z из-за множителя $\text{sign}(z)$. Асимптотики $g(z)$:

$$\begin{aligned} \kappa z \rightarrow 0: & \quad g(z) \rightarrow z \text{sign}(z)/\kappa, \\ \kappa z \rightarrow +\infty: & \quad g(z) \rightarrow z^2, \\ \kappa z \rightarrow -\infty: & \quad g(z) \rightarrow z^2 \exp(-\kappa|z|). \end{aligned} \quad (30)$$

Левой границе „области перескока“ $(\sqrt{\varepsilon_0 - 2})^2$ соответствует $z = \sqrt{\varepsilon_0} - 1$, правой границе „области перескока“ $(\sqrt{\varepsilon_0 + 2})^2$ соответствует $z = \sqrt{\varepsilon_0} + 1$, поэтому интеграл столкновений будет стремиться на левой и правой границах „области перескока“ к указанным выше асимптотическим значениям при условиях

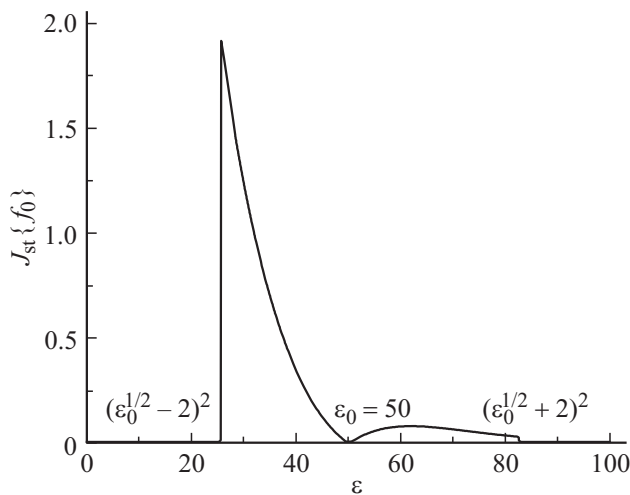


Рис. 3. Интеграл столкновений $J_{st}\{f_0\}$ для симметричной части функции распределения при $f_0(\epsilon) = C \cdot \delta(\epsilon - \epsilon_0)$, $\epsilon = 50$, $\kappa = 0.5$, $C = 1$. Видно, что частицы с наибольшей вероятностью переходят на левую границу „области перескока“.

$\kappa(\sqrt{\epsilon_0} - 1) > 1$, $\kappa(\sqrt{\epsilon_0} + 1) > 1$ соответственно. Можно показать, что при таких условиях значение J_{st} на левой границе будет максимальным по сравнению со значениями при любых других энергиях (см. рис. 3).

Таким образом, за один акт частицы из начального положения ϵ_0 переходят в основном в область левой границы $(\sqrt{\epsilon_0} - 2)^2$. За следующий акт значительная часть этих частиц перейдет в область $(\sqrt{(\sqrt{\epsilon_0} - 2)^2} - 2)^2$ и т.п., за n актов заметное число частиц прорелаксирует до энергии $(\sqrt{\epsilon_0} - 2n)^2$. Таким образом, эти частицы уменьшат свою энергию относительно исходной ϵ_0 на

$$\begin{aligned} \Delta(n) &= \epsilon_0 - (\sqrt{\epsilon_0} - 2n)^2 = 4n(\sqrt{\epsilon_0} - n) \\ &= -4(n - \sqrt{\epsilon_0}/2)^2 + \epsilon_0, \end{aligned} \quad (31)$$

значит, примерно за $[\sqrt{\epsilon_0}/2]$ актов они полностью потеряют энергию. Например, тяжелым дыркам в кремнии ($ms^2/k_B \approx 3$ К) с начальной энергией 0.5 эВ может понадобиться всего примерно 20 актов, чтобы достичь нулевой энергии.

Описанная особенность динамики частиц в энергетическом пространстве проясняет проблему с физической интерпретацией $K(\epsilon)$, предложенной в [13]. Действительно, пусть $\kappa = 16$, и все частицы имеют начальную энергию, равную $375ms^2/2$. На рис. 1, a вертикальными линиями отмечена энергия исходного ансамбля носителей (крайне правая линия) и энергии, в которые преимущественно будут переходить носители при испускании фононов. Эти энергии определяются полученной выше формулой $(\sqrt{\epsilon_0} - 2n)^2$. Легко видеть, что размер отдельного перескока по энергии $\Delta(1) = 4(\sqrt{\epsilon_0} - 1)$ соизмерим с размером области подвижности фиксированного знака, т.е., грубо говоря, за один акт носитель уйдет из области, например, положительной $K(\epsilon)$

в область отрицательной $K(\epsilon)$. Заметим, что чисто формально, при достаточно больших ϵ_0 , перескок за один акт $\Delta(1) = 4(\sqrt{\epsilon_0} - 1) \ll \epsilon_0$, т.е. носители относительно слабо меняют энергию за один акт, и, значит, столкновения можно считать упругими. Однако такой упругости оказывается недостаточно: за один перескок $K(\epsilon)$ тоже должна измениться незначительно, что в случае рассеяния носителей на акустических фононах не имеет места. Физическая интерпретация $K(\epsilon)$, предложенная в [13], становится неприменимой, так как она неявно основывалась на том, что за много столкновений квазиподвижность носителей не должна сильно меняться. В нашем примере за один акт она может не только сильно измениться по величине, но и вообще поменять знак.

Проведем оценку энергии носителя, при которой пренебрежение конечностью Θ_D в интеграле столкновений на акустических фононах законно. Для этого нужно, чтобы энергия испущенного или поглощенного фонона была значительно меньше энергии Дебая.

Из (29) и рис. 3 видно, что частицы с начальной энергией ϵ_0 за один элементарный акт меняют ее не больше чем на $\max(\epsilon_0 - (\sqrt{\epsilon_0} - 2)^2, (\sqrt{\epsilon_0} + 2)^2 - \epsilon_0) = 4(\sqrt{\epsilon_0} + 1)$. Значит, должно выполняться $\Theta_D > 4 \times (\sqrt{\epsilon_0} + 1) \Leftrightarrow \epsilon_0 < (\Theta_D/4 - 1)^2$, где Θ_D , также как и ϵ_0 , обезразмерена на $ms^2/2$.

Например, в алмазе $\Theta_D \approx 2000$ К, для тяжелых дырок и продольных акустических фононов $m_{p,h} = 1.08m_c$, $S_{LA} = 1.833 \cdot 10^6$ см/с [20], откуда легко получаем оценку $\epsilon_0 < 1600$. В наших расчетах $K(\epsilon)$ считалась до $\epsilon \approx 600-700$, значит, в этом случае пренебрежение конечностью Θ_D в интеграле столкновений законно.

Необходимо также отметить, что при достаточно высоких температурах (в алмазе при $T \approx 300$ К) на подвижность начинает существенно влиять рассеяние на оптических фононах, которое в нашей модели не учитывалось.

6. Заключение

Введено понятие квазиподвижности, обобщающее характеристику носителей заряда, предложенную Хаксли и Кромптоном, на случай неупругого рассеяния, и позволяющее в стационарном случае посчитать интегральную подвижность. В приближении времени релаксации получена формула сложения квазиподвижностей, обусловленных разными физическими механизмами.

Рассмотрена функция обезразмеренной квазиподвижности носителей заряда в твердых телах при рассеянии на акустических фононах, показана универсальность этой функции, рассмотрены ее ключевые особенности, в том числе чередование зон положительной и отрицательной квазиподвижности при достаточно низких температурах. Уточнен критерий возможности понимания квазиподвижности как подвижности ансамбля носителей определенной энергии.

Полученные результаты важны для численных расчетов и обработки экспериментальных данных по кинетике носителей заряда в твердых телах.

Работа поддержана грантом Министерства образования и науки РФ (проектная часть государственного задания, проект № 3.679.2014/К). Работа выполнена при частичной поддержке Правительства РФ (соглашение № 05.Y09.21.0018).

Список литературы

- [1] M.A. Prelas, G. Popovici, L.K. Bigelow (eds). *Handbook of Industrial Diamonds and Diamond Films* (N.Y., Marcel Dekker, 1998).
- [2] S. Koizumi, C.E. Nebel, M. Nesladek (eds). *Physics and Applications of CVD Diamond*. (Weinheim WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, 2008).
- [3] R.S. Balmer, I. Friel, S.M. Woollard, C.J.H. Wort, G.A. Scarsbrook, S.E. Coe, H. El-Hajj, A. Kaiser, A. Denisenko, E. Kohn, J. Isberg. *Phil. Trans. R. Soc. A*, **366**, 251 (2008).
- [4] R.S. Sussmann. *CVD Diamond for Electronic Devices and Sensors*. (Wiley, Wiley Series in Materials for Electronic & Optoelectronic Applications, 2009).
- [5] V.D. Blank, V.S. Bormashov, S.A. Tarelkin, S.G. Buga, M.S. Kuznetsov, D.V. Teteruk, N.V. Kornilov, S.A. Terentiev, A.P. Volkov. *Diamond Relat. Mater.*, **57**, 32 (2015).
- [6] Т.Н. Мамедов, А.Г. Дутов, Д. Герлах, В.Н. Горелкин, К.И. Грищай, В.А. Жуков, А.В. Стойков, В.Б. Шипило, У. Циммерманн. Препринт ОИЯИ (Дубна, 2004) P14-2004-104.
- [7] T.N. Mamedov, D. Andreika, A.S. Baturin, D. Herlach, V.N. Gorelkin, K.I. Gritsaj, V.G. Ralchenko, A.V. Stoykov, V.A. Zhukov, U. Zimmermann. *Physica B*, **374–375**, 390 (2006).
- [8] В.Ф. Елесин. *УФН*, **175**, 197 (2005).
- [9] А.С. Александров, Ю.А. Быковский, В.Ф. Елесин, Е.А. Протасов, А.Г. Родионов. *Письма ЖЭТФ*, **12**, 57 (1970).
- [10] А.С. Александров, Ю.А. Быковский, В.Ф. Елесин, Е.А. Протасов, А.Г. Родионов. *Письма ЖЭТФ*, **64**, 231 (1973).
- [11] А.С. Александров, А.Н. Кулямзин, А.П. Менушенков, Е.А. Протасов, П.А. Черемных. *ФТТ*, **19** (5), 1518 (1977).
- [12] A.S. Baturin, V.N. Gorelkin, V.S. Rastunkov, V.R. Soloviev. *Physica B*, **374–375**, 340 (2006).
- [13] Л. Хаксли, Р. Кромптон. *Диффузия и дрейф электронов в газах* (М., Мир, 1977) с. 86, 198.
- [14] А.С. Батурин, В.Н. Горелкин, В.Р. Соловьев, И.В. Черноусов. *Физика плазмы*, **34**, 431 (2008).
- [15] А.С. Батурин, В.Н. Горелкин, В.Р. Соловьев, И.В. Черноусов. *ФТП*, **44** (7), 897 (2010).
- [16] Ю.М. Белоусов, В.Р. Соловьев, И.В. Черноусов. *ФТП*, **47** (12), 1630 (2013).
- [17] И.А. Варфоломеев, В.Н. Горелкин, В.Р. Соловьев. *Тр. МФТИ*, **5** (3), 139 (2013).
- [18] Yu.M. Belousov, I.V. Chernousov, V.R. Soloviev, I.A. Varfolomeev. *Proc. 2nd Int. Conf. Photonics, Optics and Laser Technology* (7–9 January, Lisbon, Portugal, 2014) p. 122.
- [19] R.D. White, R.E. Robson, B. Schmidt, M.A. Morrison. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **36**, 3125 (2003).

[20] O. Madelung. *Semiconductors: Data Handbook*. (Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2004).

Редактор Г.А. Оганесян

On mobility of definite energy charge carriers

Yu.M. Belousov, V.N. Gorelkin, I.V. Chernousov

Moscow Institute of Physics and Technology
(State University),
141701 Dolgoprudniy, Russia

Abstract We consider a function of quasi-mobility of charge carriers with given energy for their dynamics description with the help of kinetic equation in an important case of isotropic two-term approximation. In stationary case this function is independent of charge carriers' source function, and allows one calculating integral mobility. The influence of system parameters on quasi-mobility function is analyzed. It is shown that generally this function does not describe a contribution of carriers with given energy to total mobility. It is known that in case of almost elastic scattering quasi-mobility function can have a clear physical meaning, but in case of carriers scattering on acoustic phonons in solids this interpretation proves to be wrong due to peculiarities of collision integral and quasi-mobility function.