Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 4 — 1973

М. А. ЭЛЬ ШАРНУБИ

О КОЭФФИЦИЕНТЕ ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ РАССЕЯНИИ НА КОЛЕБЛЮЩИХСЯ ПРИМЕСНЫХ АТОМАХ

Найдена функция распределения носителей заряда при рассеянии на колеблющихся примесных заряженных атомах и на акустических фононах. Вычислена полевая зависимость коэффициента захвата горячих электронов примесными центрами при наличии кулоновского барьера.

Задача о зависимости коэффициента захвата от напряженности поля при не слишком сильных полях сводится в основном к вычислению функции распределения электронов. Вид ее зависит от преобладающего типа рассеяния. В настоящей работе вычисляется функция распределения носителей заряда, когда рассеяние происходит на локальных (щелевых) колебаниях, обусловленных введением примеси в кристаллическую решетку [1], и на акустических фононах. Рассматривается полевая зависимость коэффициента захвата при наличии кулоновского барьера.

Кинетическое уравнение в данном случае имеет вид

$$e\vec{E},\ \vec{\nabla}_p f(\vec{p}) = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right)_I + \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{фон}}. \tag{1}$$

Положим $f = f_s + f_a$, тогда из уравнения (1) находим

$$e\vec{E},\quad \vec{\nabla}_p f_a(\vec{p}) = \left.\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_I + \left.\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_{\text{фон}}, \tag{2}$$

$$e\vec{E},\quad \vec{\nabla}_p f_s(E_{\vec{p}}) = -f_a\left(\frac{1}{\tau_I} + \frac{1}{\tau_{\text{фон}}}\right). \tag{3}$$

После усреднения по углам подставим (3) в (2), тогда кинетическое уравнение для симметричной части функции распределения $f_s(E_p)$ имеет вид

$$-\frac{2}{3}\frac{(eE)^2 x^{-1/2}}{mkT}\frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{\tau_\varphi^0 x^3}{x^2 + \tau_\varphi^0/\tau_I^0}\frac{\partial f_s}{\partial x}\right\} = \left.\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_I + \left.\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_{\text{фон}}, \tag{4}$$

где τ_φ^0 и τ_I^0 — не зависящее от энергии электрона времени релаксации по импульсу при рассеянии на акустических фононах и на заряженной примеси [2], $x = \frac{E_{\vec{p}}}{kT}$.

Интеграл столкновений для симметричной части функции распределения при рассеянии на акустических фононах хорошо известен (см., например, [3]):

$$\left.\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_{\text{фон}} = \frac{2\sqrt{2mkT}\,x^{1/2}}{lM_{\text{фон}}} \frac{\partial}{\partial x}\left[x^2\left(f_s + \frac{\partial f_s}{\partial x}\right)\right]. \tag{5}$$

Здесь $M_{\text{фон}} = \frac{kT}{v_s^2}$, v_s — скорость звука, l — длина свободного пробега, не зависящая от импульса электрона.

Выражение $\partial f_s/\partial t)_I$ было вычислено в работе [4] для двух случаев, отвечающих условиям: $\hbar\omega_0 \ll kT$ и $\hbar\omega_0 \gtrsim kT$ (здесь ω_0 — частота локального фонона).

Рассмотрим сначала первый случай. Тогда [4]

$$\left.\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_I = \frac{2\pi\,(ze^2)^2\, n_I\, m}{\hbar p M_I kT} \frac{\partial}{\partial x}\left\{\left[\ln x + \ln\left(\frac{8mkT}{\hbar^2\varkappa^2}\right) - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \ln(1 + a/x) - \frac{x}{x+a}\right]\left[f_s + \frac{\partial f_s}{\partial x}\right]\right\}. \tag{6}$$

Введем следующие обозначения:

$$q^2 = \tau_\varphi^0/\tau_I^0 = \frac{6\mu_\varphi}{\mu_I}; \quad C_2 = \frac{2v_s^2\sqrt{2mkT}}{lkT}; \quad \xi = \frac{3\pi}{16}\left(\frac{\mu_\varphi E}{v_s}\right)^2;$$

$$C_1 = \frac{\sqrt{2}\,\pi\,(ze^2)^2\sqrt{m}}{(kT)^{3/2} M_I}; \quad \lambda = C_1/C_2.$$

Здесь μ_φ и μ_I — подвижности в слабом поле, обусловленные рассеянием на акустических фононах и заряженных ионизированных примесях. Остальные обозначения то же, что в [4]. Учитывая (5) и (6), получим для $f_s(x)$ следующее уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\xi x^3}{x^2+q^2}\frac{\partial f_s}{\partial x} + \left\{\lambda\left(\ln x + \ln\left(\frac{8mkT}{\hbar^2\varkappa^2}\right) - \ln\left(1+\frac{a}{x}\right) - \right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left. - \frac{x}{x+a}\right) + x^2\right\}\left\{f_s + \frac{\partial f_s}{\partial x}\right\}\right] = 0. \tag{7}$$

Интегрируя (7) по x, получаем

$$\frac{\xi x^3}{x^2+q^2}\frac{\partial f_s}{\partial x} + \left\{\lambda\left(\ln x + \ln\left(\frac{8mkT}{\hbar^2 x^2}\right) - \ln(1 + a/x) - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \frac{x}{x+a}\right) + x^2\right\}\left\{f_s + \frac{\partial f_s}{\partial x}\right\} = A_1. \tag{8}$$

Из условия конечности интеграла $\int_0^\infty dx x^{1/2} f_s(x)$ вытекает, что $A_1 = 0$.

Следовательно, $f_s(x)$ имеет вид

$$f_s = e^{-x+\xi \int\limits^{x} dx \frac{x^3/x^2+q^2}{\lambda\left(\ln x+\ln\left(\frac{8mkT}{\hbar^2\varkappa^2}\right)-\ln\left(1+\frac{a}{x}\right)-\frac{x}{x+a}\right)+\varkappa^2+\frac{\xi x^3}{\varkappa^2+q^2}}}. \tag{9}$$

Постоянная интегрирования, т. е. нижний предел интеграла в (9) определяется из условия нормировки функции распределения

$$\int d\vec{p} f(\vec{p}) = 1. \tag{10}$$

В слабом поле, т. е. при $\xi \ll 1$, функция распределения имеет вид

$$f_s = \exp\left[-x + \xi \int\limits^{x} dx \frac{x^3/x^2+q^2}{\lambda\left\{\ln x+\ln\left(\frac{8mkT}{\hbar^2\varkappa^2}\right)-\ln\left(1+\frac{a}{x}\right)-\frac{x}{x+a}\right\}+x^2}\right].$$

Функция $F_1(x) = \lambda\left\{\ln x + \ln\left(\frac{8mkT}{\hbar^2\varkappa^2}\right) - \ln(1+a/x) - \frac{x}{x+a}\right\}$ изменяется сравнительно плавно. Вынося ее за знак интеграла, при x порядка единицы получаем

$$f_s = A_2 e^{-x} + \frac{\xi}{2}\left\{\frac{q^2\ln(1+x^2/q^2) - F_1(1)\ln(1+x^2/F_1(1))}{q^2 - F_1(1)}\right\}.$$

В частности, при $q^2 \gg 1$, $F_1(1) \gg 1$ имеем

$$f_s(x) = A_2 e^{-x}\left\{1 + \frac{\alpha' x^4}{4F_1}\right\}, \tag{11}$$

где

$$\alpha' = \frac{3\pi}{16}\left\{\frac{\sqrt{\frac{\mu\mu}{\varphi I}/6E}}{v_s}\right\}^2.$$

Решение (11) справедливо при $\frac{\alpha'}{4F_1} \ll 1$.

Пусть помимо мелких, полностью ионизированных колеблющихся доноров, в образце имеются еще отрицательно заряженные центры, на которые и происходит захват. Тогда, по определению, коэффициент захвата дается выражением [5]

$$C_n = \int d\vec{p} f(\vec{p})\, \sigma_n(\vec{p})\, v(\vec{p}), \tag{12}$$

где $\sigma_n(\vec{p})$, $v(\vec{p})$ — сечение захвата и абсолютная величина скорости электрона с квазиимпульсом $\vec{p}$, $f(\vec{p})$ — функция распределения, нормированная на единицу. При наличии кулоновского барьера, положим

$$\sigma(w) = w^{U-1}\psi(w)\left[e^{\frac{2\pi Ze^2}{\varepsilon\hbar v}} - 1\right]^{-1}. \tag{13}$$

Здесь $U \sim 1$, $\psi(w)$ — медленно меняющаяся функция, z — заряд примесного центра.

Введем обозначения

$$v_T = \sqrt{\frac{2kT}{m}}; \quad \gamma = \frac{2\pi ze^2}{\varepsilon\hbar v_T}; \quad \frac{W}{kT} = \frac{\hbar^2 p^2}{2mkT} = x.$$

При $\gamma > 1$, $\sigma(w)$ имеет вид

$$\sigma(w) = w^{U-1}\,\psi(w)\,e^{\gamma/\sqrt{x}}. \qquad (14)$$

Подставляя (11) и (14) в (12), находим

$$C_n(\alpha') = 8\pi m\,(kT)^{U+1}\,A_2 L, \qquad (15)$$

где

$$L = \int\limits_0^\infty dx\,\psi(xkT)\left\{1 + \frac{\alpha' x^4}{4F_1(x)}\right\} e^{\varphi(x)},$$

$$\varphi(x) = -1 + U\ln x - \gamma/\sqrt{x},$$

$$A_2 = \left[4\pi(mkT)^{3/2}\sqrt{2}\,\Gamma(3/2)\left\{1 + \frac{\alpha'\Gamma(11/2)}{4F_1(1)\,\Gamma(3/2)}\right\}\right]^{-1}.$$

Интеграл L вычисляется методом быстрейшего спуска. Обозначим через x_m соответствующий корень уравнения

$$-1 + U/x + \frac{\gamma}{2x^{3/2}} = 0.$$

Пусть $U \ll (\gamma/2)^{2/3}$. Тогда $x_m = (\gamma/2)^{2/3}$ и для отношения коэффициентов захвата в поле и без поля получается

$$\frac{C_n(\alpha')}{C_n^0} = 1 + \frac{\alpha'(\gamma/2)^{8/3}}{4F_1((\gamma/2)^{2/3})}\left\{1 - \frac{\Gamma_{(11/2)}\,F_1((\gamma/2)^{2/3})}{\Gamma_{(3/2)}\,F_1(1)\,(\gamma/2)^{8/3}}\right\}. \qquad (16)$$

Зависимость $\dfrac{C_n(\alpha')}{C_n^0}$ имеет вид такой же, как в работе [6], явное выражение для полевой поправки, однако, оказывается несколько иным.

Согласно [1] и [4] в неполярных полупроводниках типа Ge и Si этот случай не реализуется, характеристическая температура для локальных колебаний, связанных с примесными атомами, оказывается выше дебаевской. Видимо, формулу (16) можно применять к некоторым соединениям, в которых эффективная масса носителей велика, а диэлектрическая проницаемость равно как и дебаевская частота основного кристалла мала. Кроме локальных колебаний здесь могли бы возникнуть и щелевые, частота которых много меньше дебаевской.

Обратимся ко второму случаю ($\hbar\omega^0 \gtrless kT$). Тогда интеграл столкновений $\left.\dfrac{\partial f_s}{\partial t}\right)_I$ имеет вид [4]

$$\left.\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_I = \frac{4\pi n_I (Z_e^2)^2\,mkT}{M_I(1-\omega_p^2/\omega_0^2)^2\,\hbar p}\,\frac{\partial}{\partial x}\left\{\left(\ln\left(\frac{4kTx}{\hbar\omega_0}\right)\right)\left(f_s + \right.\right.$$

$$\left.\left.+\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\,\frac{e^{\hbar\omega_0/kT_1}+}{e^{\hbar\omega/kT_1}-}\,\frac{\partial f_s}{\partial x}\right)\right\}. \qquad (17)$$

Подставляя (17) и (5) в (4), находим

$$\left(\lambda'\ln\left(\frac{4kTx}{\hbar\omega_0}\right) + x^2 + \frac{\xi x^3}{x^2+q^2}\right)\frac{\partial f_s}{\partial x} + \left(\lambda\ln\left(\frac{4kTx}{\hbar\omega_0}\right) + x^2\right) f_s = A_1, \qquad (18)$$

где

$$\lambda = \frac{C_1}{C_2}; \quad C_1 = \frac{2\pi n_I (ze^2)^2 \sqrt{2m}}{M_I (1 - \omega_p^2/\omega_0^2)^2 (kT)^{3/2}};$$

$$\lambda' = \lambda \left[\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \frac{e^{\hbar\omega_0/kT} + 1}{e^{\hbar\omega_0/kT} - 1} \right]; \quad \lambda^\circ = \lambda/\lambda'.$$

Как и в первом случае, из условия конечности $\int\limits_0^\infty dx\, x^{1/2} f_s(x)$ следует, что $A_1 = 0$. Таким образом, формула (18) дает

$$f_s = e^{-\int\limits^x dx \frac{\lambda \ln\left(\frac{4kTx}{\hbar\omega_0}\right) + x^2}{\lambda' \ln\left(\frac{4kTx}{\hbar\omega_0}\right) + x^2 + \xi x^3/x^2 + q^2}}. \tag{19}$$

Ограничимся сначала рассеянием только на колеблющихся центрах, т. е. будем считать, что $\lambda' \gg 1$; $\lambda \gg 1$; $q^2 \gg 1$; λ'; λ; $q^2 \gg \xi$. Вынося плавную функцию $\ln\left(\frac{4kTx}{\hbar\omega_0}\right)$ за знак интеграла, находим

$$f_s = A_3\, e^{-\lambda^0 x} \left\{ 1 + \frac{\lambda^0 - 1}{3\lambda' \ln\left(\frac{4kT\bar{x}}{\hbar\omega_0}\right)} + \frac{\alpha' \lambda^0 x^4}{4\lambda' \ln\left(\frac{4kT\bar{x}}{\hbar\omega_0}\right)} \right\}. \tag{20}$$

Подставляя (20) и (14) в (12), мы получаем

$$\frac{C_n(\alpha')}{C_n^0} = 1 + \alpha'\delta, \tag{21}$$

где

$$\delta = \frac{\alpha'\lambda' (\gamma/2\lambda^0)^{8/3}}{4a^2\lambda' \ln\left\{\frac{4kT}{\hbar\omega_0} (\gamma/2\lambda^\circ)^{2/3}\right\}} \left[1 - \frac{a^2 \lambda_0^{-4} \Gamma_{(11/2)} (\gamma/2\lambda^0)^{-8/3}}{a_1 \Gamma_{(3/2)} \left\{ \frac{\ln\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0\lambda_0}\right)}{\ln\left[\frac{4kT}{\hbar\omega_0} (\gamma/2\lambda^\circ)^{2/3}\right]} \right\}} \right],$$

$$a_1 = 1 + \frac{\lambda^0 - 1}{\lambda'} \frac{\lambda_0^{-3} \Gamma_{(9/2)}}{3 \ln\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0\lambda^0}\right) \Gamma_{(3/2)}},$$

$$a_2 = 1 + \frac{\lambda^0 - 1}{3\lambda'} \frac{(\gamma/2\lambda^\circ)^2}{\ln\left[\frac{4kT}{\hbar\omega_0} (\gamma/2\lambda^\circ)^{2/3}\right]}.$$

Как и в первом случае величина (8) может менять знак при изменении γ.

Пусть

$$\xi \gg 1; \quad \bar{x}^2 \gg 1; \quad \frac{q^2}{\xi} < 1; \quad \frac{\lambda'}{\xi} < 1.$$

Тогда из (19) получаем

$$f_s = A_3 e^{-x^2/2\xi - \frac{q^2}{\xi} \ln x - \frac{\lambda}{\xi} \ln x \left[\ln \frac{4kT\sqrt{x}}{\hbar\omega_0}\right]}. \tag{22}$$

Коэффициент захвата в этом случае имеет вид

$$C_n(\xi) = 8\pi m (kT)^{U+1} A_3 L,$$

где

$$A_3 = \left[2\sqrt{2}\pi (mkT)^{3/2} (2\xi)^{\frac{3}{4} - \frac{1}{2\xi}\left[\ln\left(\frac{4kT(2\xi)^{1/4}}{\hbar\omega_0}\right) + q^2\right]} \times\right.$$

$$\left.\times\, \Gamma\left(3/4 - \frac{1}{2\xi}\left\{\lambda \ln\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0}(2\xi)^{1/4}\right) + q^2\right\}\right)\right]^{-1},$$

$$L = \int\limits_0^\infty dx\psi(xkT)\, e^{-x/2\xi - \frac{1}{\xi}\left[\lambda \ln\left(\frac{4kTx^{1/2}}{\hbar\omega_0}\right) + q^2\right] + U \ln x - \frac{\gamma}{\sqrt{x}}}.$$

Здесь удобно рассмотреть несколько частных случаев.

Промежуточные поля и температуры:

при этом $U\xi^{1/5} \ll (\gamma/2)^{4/5}$, $\lambda \ll \left(\frac{\gamma\xi}{2}\right)^{4/5}$; $q^2 \ll \left(\frac{\gamma\xi}{2}\right)^{4/5}$

$$C_n(\xi) \sim \left(\frac{E}{E_0}\right)^{\frac{4U}{5} - 1/2} \exp\left[-\left(\frac{T_0 E_0}{TE}\right)^{2/5} - \frac{2}{5\xi}\left\{\lambda \ln\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\gamma\xi}{2}\right)^{1/5}\right) + \right.\right.$$

$$\left.\left. + q^2\right\} \ln\left(\frac{\gamma\xi}{2}\right) + \frac{\ln(2\xi)}{2\xi}\left\{\lambda \ln\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0}(2\beta)^{1/4}\right) + q^2\right\}\right] \times$$

$$\times\, \Gamma^{-1}\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{2\xi}\left[q^2 + \lambda \ln\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0}(2\xi)^{1/4}\right)\right]\right). \tag{23}$$

В частности, при $\xi \gg 1$ формула (23) принимает вид

$$C_n(\xi) \sim \left(\frac{E}{E_0}\right)^{\frac{4U}{5} - 1/2} \exp\left[-\left(\frac{T_0 E_0}{TE}\right)^{2/5}\right], \tag{24}$$

где

$$E_0 = \frac{16 v_s \sqrt{2}}{27 \mu_\varphi \sqrt{3\pi}}; \quad T_0 = \frac{27\pi^2 m z^2 e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2 k}; \quad \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 = \frac{1}{27}(T_0/T).$$

Сильные поля и высокие температуры: $\frac{\gamma}{2} \ll U^{5/4}\xi^{1/4}$; $\frac{\lambda}{U\xi} \ll 1$; $\frac{q^2}{U\xi} \ll 1$

В этом случае

$$C_n(\xi) \sim \left(\frac{E}{E_c}\right)^{U-1/2} \exp\left[-1/2\xi\left\{\lambda \ln\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0}\sqrt{U\xi}\right) + q^2\right\} \ln U\xi + \right.$$

$$\left. + \frac{\ln(2\xi)}{2\xi}\left\{\lambda \ln\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0}(2\xi)^{1/4}\right) + q^2\right\}\right] \Gamma^{-1}\left(\frac{3}{4} - 1/2\xi\left\{\lambda \ln \times\right.\right.$$

$$\left.\left.\times\left(\frac{4kT}{\hbar\omega_0}(2\xi)^{1/4}\right) + q^2\right\}\right). \tag{25}$$

В частности, при $\xi \gg 1$

$$C_n(\xi) \sim \left(\frac{E}{E_c}\right)^{U-1/2}, \text{ где } \quad E_c = \frac{4 v_s}{\mu_\varphi \sqrt{\pi \ln(T_0/27T)}}.$$

Заметим, что данный случай может реализоваться как в неполярных, так и в полярных полупроводниках. Обращаясь к системе n—Ge+ +AU, видим, что в слабом поле полевая зависимость коэффициента захвата оказывается (при $\delta>0$) такой же, как и в работе [6]. В сильном поле вид зависимости $C_n(\xi)$ такой же, как и в работе [7] (в случае очень сильного поля).

Автор благодарен В. Л. Бонч-Бруевичу за неоднократное обсуждение результатов данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Марадудин А. А. Дефекты и колебательный спектр кристаллов. М., 1968.
2. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М., 1962.
3. Давыдов Б. И. ЖЭТФ, **7**, 1069, 1937.
4. Эль Шарнуби М. А. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., **14**, № 3, 1973.
5. Shockley W., Read W. T. Phys. Rev., **87**, 835, 1952.
6. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. «Физика твердого тела», **7**, 758, 1965.
7. Бонч-Бруевич В. Л. «Физика твердого тела», **6**, 2047, 1964.

Поступила в редакцию
13.10 1971 г.

Кафедра
полупроводников