Краткие сообщения по физике № 8-1984 г.

К ТЕОРИИ ОМИЧЕСКОЙ ПОДВИЖНОСТИ ДЫРОК В АЛМАЗЕ

В.А. Чуенков

УДК 537.311.33

Построена хорошо согласующаяся с экспериментом аналитическая теория омической подвижности дырок в алмазе.

Температурная зависимость подвижности дырок в алмазе получена в /1/ путем численного решения кинетического уравнения методом Монте-Карло. В настоящей работе получено достаточно простое аналитическое выражение для подвижности дырок в алмазе, позволяющее количественно объяснить все имеющиеся в литературе экспериментальные данные (ранее нами была решена аналогичная задача для электронов /2/). Энергетический спектр дырок в алмазе, характеризуемый функцией $\mathcal{E}(\vec{p})$ (зависимость энергии $\mathcal{E}$ от импульса $\vec{p}$) состоит из двух ветвей (зон), смыкающихся в точке экстремума (точке, соответствующей верхнему краю валентной зоны), расположенной в центре зоны Бриллюэна. Будем предполагать, что в окрестности экстремума

$$\mathcal{E}(\vec{p_i}) = \vec{p}_i^2/2m_i \ (i = h,l). \tag{1}$$

Функция $\mathcal{E}(\vec{p_h})$ описывает зависимость энергии от импульса в зоне тяжелых дырок, имеющих эффективную массу m_h, функция $\mathcal{E}(\vec{p_l})$ описывает зависимость энергии от импульса в зоне легких дырок, имеющих эффективную массу m_l. Мы заменили гофрированные поверхности постоянной энергии для дырок, какими они являются на самом деле /3/, сферическими. Такая замена для алмаза является вполне оправданной, поскольку наблюдение циклотронного резонанса показало, что эффективные массы дырок в алмазе почти изотропны /4/. Имеется еще одна дырочная зона, отщепленная от упомянутых выше зон вследствие спин-орбитального взаимодействия на величину $\Delta_{so} = 0{,}006$ эВ. Эффективная масса дырок в отщепленной зоне существенно меньше эффективных масс m_h и m_l и, следовательно, плотность состояний в ней много меньше плотности состояний в зонах легких и тяжелых дырок. Поэтому при построении теории подвижности дырок в алмазе отщепленную зону можно не учитывать.

Матричные элементы, характеризующие рассеяние дырок в алмазе как на акустических (скорость дырок много больше скорости звука), так и на оптических фононах, являются постоянными величинами. В этом случае кинетическое уравнение для функции распределения дырок допускает введение времени релаксации импульса дырок $\tau(\mathcal{E}) = \nu^{-1}(\mathcal{E})$, где $\nu(\mathcal{E})$ – частота столкновений дырок. Для дырок в алмазе

$$\nu(\mathcal{E}) = \nu_{ac}(\mathcal{E}) + \nu_{op}(\mathcal{E}), \tag{2}$$

где

$$\nu_{ac}(\mathcal{E}) = \nu_{ac}^{(hh)}(\mathcal{E}) + \nu_{ac}^{(hl)}(\mathcal{E}) = \nu_{ac}^{(ll)}(\mathcal{E}) + \nu_{ac}^{(lh)}(\mathcal{E}) =$$
$$= \frac{\sqrt{2}\Lambda^2 m_h^{3/2} T_0^{3/2}}{\pi\rho_0\hbar^4 v_s^2}(1 + K^{3/2})\left(\frac{\mathcal{E}}{T_0}\right)^{1/2} \tag{3}$$

– частота столкновений дырок с акустическими фононами,

$$\nu_{op}(\mathcal{E}) = \nu_{op}^{(hh)}(\mathcal{E}) + \nu_{op}^{(hl)}(\mathcal{E}) = \nu_{op}^{(ll)}(\mathcal{E}) + \nu_{op}^{(lh)}(\mathcal{E}) =$$
$$= \frac{D_{op}^2 m_h^{3/2}}{\sqrt{2}\pi\rho_0\hbar^2(\hbar\omega_{op})^{1/2}}(1 + K^{3/2}) \times \tag{4}$$
$$\times \left\{N_{op}\left(\frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega_{op}} + 1\right)^{1/2} + (N_{op} + 1)\left(\frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega_{op}} - 1\right)^{1/2}\Theta\left(\frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega_{op}} - 1\right)\right\}$$

– частота столкновений дырок с оптическими фононами. В (3), (4) приняты обозначения: $\nu_{ac}^{(ll)}(\mathcal{E})$, $\nu_{ac}^{(hh)}(\mathcal{E})$, $\nu_{op}^{(ll)}(\mathcal{E})$, $\nu_{op}^{(hh)}(\mathcal{E})$ – частоты внутризонных столкновений дырок с акустическими и оптическими фононами (индекс h соответствует зоне тяжелых дырок, индекс l – зоне легких дырок); $\nu_{ac}^{(lh)}(\mathcal{E})$, $\nu_{ac}^{(hl)}(\mathcal{E})$, $\nu_{op}^{(lh)}(\mathcal{E})$, $\nu_{op}^{(hl)}(\mathcal{E})$ – частоты межзонных столкновений дырок с акустическими и оптическими фононами (например, $\nu_{ac}^{(lh)}(\mathcal{E})$ – число переходов носителей тока в единицу времени из зоны легких дырок в зону тяжелых дырок вследствие рассеяния на акустических фононах); Λ и D_{op} – константы деформационного потенциала (Λ имеет размерность энергии, D_{op} – энергии, деленной на длину); T_0 – температура решетки в энергетических единицах; ρ_0 – плотность; $\hbar$ – постоянная Планка; ω_{op} – частота оптического фонона;

$$\Theta(z) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ 1, & z > 0, \end{cases} \quad N_{op} = \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_{op}}{T_0}\right) - 1\right)^{-1}, \tag{5}$$

$$v_s = (2v_{s\perp} + v_{s\parallel}) / 3, \; K = m_l / m_h; \qquad (6)$$

$v_{s\perp}$ и $v_{s\parallel}$ – скорости распространения поперечных и продольных звуковых волн в кристалле.

Принимая во внимание соотношения (1) – (6) и указанные выше особенности структуры валентной зоны алмаза, получим для омической подвижности дырок выражение

$$\mu(T_0) = \mu_{ac}(T_0) \int_0^\infty x\Phi(x)\, e^{-x} dx. \qquad (7)$$

Здесь

$$\mu_{ac}(T_0) = \frac{2\sqrt{2\pi}}{3} \frac{e\rho_0 \hbar^4 v_s^2}{\Lambda^2 m_h^{5/2} T_0^{3/2}} \frac{1 + K^{1/2}}{(1 + K^{3/2})^2} \qquad (8)$$

– подвижность дырок в том случае, когда учитывается лишь рассеяние на акустических фононах,

$$\Phi(x) = x^{1/2} \{x^{1/2} + \lambda(T_0)[N_{op}(x/x_0 + 1)^{1/2} + (N_{op} + 1)(x/x_0 - 1)^{1/2} \times \\ \times \Theta(x/x_0 - 1)]\}^{-1}, \qquad (9)$$

$$\lambda(T_0) = \frac{1}{2} \frac{D_{op}^2}{\Lambda^2} \frac{\hbar^2 v_s^2}{(\hbar\omega_{op})^{1/2} T_0^{3/2}}, \quad x_0 = \frac{\hbar\omega_{op}}{T_0}. \qquad (10)$$

Таблица 1.

Подвижность дырок в алмазе при $T_o = 85 - 1000$ К.

T_o, К	$\mu(T_o)$, см^2/В·с теория	$\mu(T_o)$, см^2/В·с эксперимент	$\mu_{ac}(T_o)$, см^2/В·с, теория
85	$1{,}4 \cdot 10^4$	$1{,}3 \cdot 10^4$	$1{,}4 \cdot 10^4$
100	$1{,}1 \cdot 10^4$	$1{,}1 \cdot 10^4$	$1{,}1 \cdot 10^4$
200	$4 \cdot 10^3$	$4 \cdot 10^3$	$4 \cdot 10^3$
300	1950	$2 \cdot 10^3$	$2{,}18 \cdot 10^3$
400	978	1000	$1{,}41 \cdot 10^3$
500	518	520	1012
600	300	310	770
700	191	193	611
1000	71	70	358

При проведении численных расчетов взяты значения $m_h = 1{,}1m_0$ (m_0 – масса свободного электрона); $m_l = 0{,}3m_0$; $\rho_0 = 3{,}51$ г·см$^{-3}$; $v_{s\parallel} = 1{,}821 \times 10^6$ см·с$^{-1}$; $v_{s\perp} = 1{,}23 \cdot 10^6$ см·с$^{-1}$; $\hbar\omega_{op} = 0{,}167$ эВ (соответствующая такой энергии температура равна 1938 К); $\Lambda = 4{,}29$ эВ; $D_{op} = 2{,}1 \cdot 10^9$ эВ·см$^{-1}$. Теоретические значения подвижности дырок в алмазе при разных температурах, вычисленные по формулам (7-10), и экспериментальные значения, полученные в /1/, приведены соответственно в первом и втором столбцах табл.1. В последнем столбце табл. 1 для сравнения приведены значения подвижности, вычисленные по формуле (8), т.е. при условии, что дырки испытывают рассеяние лишь на акустических фононах.

Из табл. 1 следует, что предложенная нами аналитическая теория омической подвижности дырок в алмазе хорошо согласуется с экспериментом. Из таблицы следует также, что при построении теории омической подвижности и других кинетических явлений в алмазе при $T_0 > 300$ К наряду с рассеянием дырок на акустических фононах необходимо учитывать рассеяние на оптических фононах.

Поступила в редакцию 28 февраля 1984 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Reggiani et al., Phys.Rev. B, 23, № 6, 3050 (1981).
2. В.А. Чуенков, Краткие сообщения по физике ФИАН, № 7, 37 (1983).
3. G. Dresselhaus, A. F. Kip, C. Kittel, Phys. Rev., 98, 368 (1955).
4. C.J. Rauch, Phys. Rev. Lett., 7, 83 (1961).