НОВЫЙ ПОДХОД К РАСЧЕТУ СПЕКТРА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ПОДВИЖНОСТИ ГОРЯЧИХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА: ПРЯМОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАДИЕНТА ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Стариков Е. В., Шикторов П. Н.

Разработан универсальный подход к расчету частотной зависимости тензора дифференциальной подвижности горячих носителей заряда полупроводника $\hat{\mu}_{\alpha\beta}(\omega)$ одночастичным методом Монте-Карло. В основу метода положена процедура, позволяющая по результатам процесса моделирования траектории пробного электрона $\mathbf{p}_t$ в импульсном пространстве проводить восстановление локальных значений градиента стационарной функции распределения $\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p})$ с помощью динамической векторной функции $\zeta[\mathbf{p}_t]$, текущее значение которой однозначно определяется информацией, накапливаемой по ходу моделирования траектории. Показано, что использование функции $\zeta[\mathbf{p}_t]$ при временном усреднении вдоль траектории $\mathbf{p}_t$ дает возможность непосредственно в процессе моделирования невозмущенного стационарного состояния проводить расчет корреляционной матрицы $\hat{K}_{\alpha\beta}(s)=\overline{v_\alpha(\mathbf{p}_{t+s})\zeta_\beta[\mathbf{p}_t]^t}$, фурье-образ которой является тензором подвижности носителей заряда $\hat{\mu}_{\alpha\beta}(\omega)=e\int\limits_0^\infty \hat{K}_{\alpha\beta}(s)\times$ $\times\exp(-i\omega s)\,ds$. Приводятся результаты расчетов $\hat{K}_{\alpha\beta}(s)$ и $\hat{\mu}_{\alpha\beta}(\omega)$ в условиях пролетного резонанса и эффекта Ганна в n-GaAs и НЕМАГа на ЦР в p-Ge. Обсуждаются преимущества и недостатки новой методики.

Введение. При рассмотрении вопросов, связанных с описанием взаимодействия горячих носителей заряда полупроводника (в дальнейшем для краткости — электронов) с СВЧ излучением, а также процессов усиления и генерации излучения центральное место занимает задача определения частотной зависимости тензора дифференциальной (слабосигнальной) подвижности $\hat{\mu}_{\alpha\beta}(\omega)$. Последняя задает связь между изменениями компонент средней дрейфовой скорости электронов δv_α и вызвавшими их малыми гармоническими возмущениями внешнего электрического поля $\delta E_\beta = E_\beta \exp(i\omega t)$ частоты ω.

Предлагаемый в настоящей работе подход позволяет проводить расчет всей частотной зависимости тензора подвижности $\hat{\mu}_{\alpha\beta}(\omega)$, не выходя за рамки моделирования стационарного состояния горячих электронов методом Монте-Карло. В этом состоит его принципиальное отличие от предшествующих методик [1-4], где компоненты тензора подвижности определялись из соотношений типа $\mu_{\alpha\beta}(\omega)=\delta v_\alpha/\delta E_\beta$ и для выделения отклика дрейфовой скорости $\delta \mathbf{v}$ на некоторой частоте ω необходимо было дополнительно включать в процедуру расчета электрическое поле $\delta \mathbf{E}$, возмущающее систему носителей заряда.

Постановка задачи. В линейном приближении компоненты тензора дифференциальной подвижности $\mu_{\alpha\beta}(\omega)$ не должны зависеть от амплитуды возмущающего поля δE и, следовательно, могут быть полностью описаны через характеристики невозмущенного состояния горячих электронов. Согласно теории линейного отклика, построенной в рамках кинетического уравнения Больцмана для функции распределения (ФР) электронов в импульсном пространстве $f(\mathbf{p})$

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\mathbf{F}\nabla_{\mathbf{p}}f=\hat{S}\{f\} \tag{1}$$

(где $\mathbf{F}$ — внешняя сила, действующая на электроны, $\hat{S}\{f\}$ — столкновительный член), расчет тензора подвижности $\hat{\mu}_{\alpha\beta}(\omega)=e\int\limits_0^\infty \hat{K}_{\alpha\beta}(s)\exp(-i\omega s)\,ds$ сводится к вычислению фурье-образа от корреляционной матрицы [4, 5]

$$\hat{K}_{\alpha\beta}(s)=-\int\left[\int v_\alpha(\mathbf{p}')\,P(\mathbf{p}',\ \mathbf{p},\ s)\,d\mathbf{p}'\right]\frac{\partial}{\partial p_\beta}f_0(\mathbf{p})\,d\mathbf{p}. \tag{2}$$

Здесь $P(\mathbf{p}', \mathbf{p}, s)$ — вероятность перехода электрона из состояния с импульсом $\mathbf{p}$ в состояние $\mathbf{p}'$ за время s, т. е. функция Грина невозмущенного уравнения (1) с начальным условием $P(\mathbf{p}', \mathbf{p}, 0)=\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$, $f_0(\mathbf{p})=P(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \infty)$ — стационарная ФР электронов, $v_\alpha(\mathbf{p})=\partial\varepsilon(\mathbf{p})/\partial p_\alpha$ — компоненты скорости электрона, находящегося в состоянии с импульсом $\mathbf{p}$ и энергией $\varepsilon(\mathbf{p})$. Рассмотрим возможности реализации расчета корреляционной матрицы $\hat{K}_{\alpha\beta}(s)$, задаваемой выражением (2), в рамках одночастичного метода Монте-Карло.

Одночастичный метод Монте-Карло используется для расчета макроскопических характеристик горячих электронов в стационарном состоянии [6] и состоит в замене усреднения по ФР $f_0(\mathbf{p})$ на усреднение по времени вдоль моделируемой на ЭВМ достаточно длинной траектории $\mathbf{p}_t$, описывающей движение одного пробного электрона в импульсном пространстве под действием внешних полей и процессов рассеяния. Такой подход позволяет легко реализовать расчеты корреляционных зависимостей типа

$$\langle\chi_s,\ \zeta\rangle=\int\left[\int\chi(\mathbf{p}')\,P(\mathbf{p}',\ \mathbf{p},\ s)\,d\mathbf{p}'\right]\zeta(\mathbf{p})\,f_0(\mathbf{p})\,d\mathbf{p} \tag{3}$$

от двух динамических характеристик электрона [$\chi(\mathbf{p})$ и $\zeta(\mathbf{p})$], поскольку в терминах усреднения вдоль траектории $\mathbf{p}_t$ коррелятор (3) сводится к вычислению интеграла [7]

$$\frac{1}{T-s}\int\limits_0^{T-s}\chi(\mathbf{p}_{t+s})\,\zeta(\mathbf{p}_t)\,dt, \tag{4}$$

где T — полное время, в течение которого моделируется траектория пробного электрона.

Из сопоставления (2) и (3) следует, что при расчете $\hat{K}_{\alpha\beta}(s)$ методом Монте-Карло вычисление интеграла (4) на траектории $\mathbf{p}_t$ нужно проводить от компонент векторных функций $\chi(\mathbf{p})=\mathbf{v}(\mathbf{p})$ и $\zeta(\mathbf{p})=\nabla_{\mathbf{p}}\ln f_0(\mathbf{p})$. Последняя не есть динамическая характеристика электрона и может быть найдена только при условии, что задача определения стационарной ФР решена. Однако сам метод усреднения по истории пробного электрона — это по сути отказ от решения задачи определения стационарной ФР, которая может быть лишь восстановлена по результатам моделирования $\mathbf{p}_t$ и то только в огрубленном виде.

Чтобы избежать противоречия и не выйти за рамки одночастичного метода Монте-Карло, необходимо исключить из процедуры расчета $\hat{K}_{\alpha\beta}(s)$ величину $\nabla_{\mathbf{p}}\ln f_0(\mathbf{p})$, заменив ее неким динамическим эквивалентом $\zeta[\mathbf{p}_t]$, значения которого на траектории $\mathbf{p}_t$ определяет только та информация, которая может быть получена по ходу моделирования траектории. Поскольку моделируется стационарное состояние, нам нет необходимости требовать, чтобы текущее значение $\zeta[\mathbf{p}_t]$ в точности соответствовало бы значению $\nabla_{\mathbf{p}}\ln f_0(\mathbf{p})$ в точке $\mathbf{p}=\mathbf{p}_t$, и достаточно потребовать выполнения этого равенства лишь для среднего значения $\zeta[\mathbf{p}_t]$ по всем участкам траектории $\mathbf{p}_t$, которые заполняют окрестность импульсного пространства с единичным объемом вокруг произвольной точки $\mathbf{p}$. Учитывая, что плотность заполнения траекторией $\mathbf{p}_t$ элементарной области с объемом $\delta\mathbf{p}$ пропорциональна $f_0(\mathbf{p})\,\delta\mathbf{p}$, придем к условию, которому должна удовлетворять искомая функция,

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T \zeta[\mathbf{p}_t]\,Z(\mathbf{p}_t,\ \delta\mathbf{p})\,dt = \nabla_{\mathbf{p}}\ln f_0(\mathbf{p})\,f_0(\mathbf{p})\,\delta\mathbf{p} \equiv \nabla_{\mathbf{p}} f_0(\mathbf{p})\,\delta\mathbf{p}, \tag{5}$$

где

$$Z(\mathbf{p}_t,\ \delta\mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & \text{при } p_t \in \delta p, \\ 0 & \text{при } p_t \notin \delta p. \end{cases}$$

В рамках метода Монте-Карло условие (5) означает, что $\zeta\,[p_t]$ должна осуществлять прямое моделирование градиента стационарной ФР, а ее использование в качестве весового множителя при временно́м усреднении произвольной динамической характеристики электрона $A(\mathbf{p})$ эквивалентно вычислению интеграла $\int A(\mathbf{p})\,\nabla_{\mathbf{p}} f_0(\mathbf{p})\,d\mathbf{p}$ или, что то же самое, $\int \nabla_{\mathbf{p}} A(\mathbf{p})\,f_0(\mathbf{p})\,d\mathbf{p}$.

Функция, моделирующая градиент стационарного распределения электронов. Для простоты ограничимся случаем, когда разогрев электронов происходит в постоянном электрическом поле $\mathbf{E}_0$, т. е. в (1) $\mathbf{F}=e\mathbf{E}_0$. Столкновительный член кинетического уравнения (1) запишем в виде суммы по всем механизмам рассеяния

$$\hat{S}\{f\} = -\nu(\mathbf{p})\,f_0(\mathbf{p}) + \sum_i \int S_i(\mathbf{p}',\ \mathbf{p})\,f_0(\mathbf{p}')\,d\mathbf{p}'. \tag{6}$$

Здесь $\nu(\mathbf{p}) = \sum_i \int S_i(\mathbf{p},\ \mathbf{p}')\,d\mathbf{p}'$ — скорость ухода электрона из состояния $\mathbf{p}$ в результате рассеяний, $S_i(\mathbf{p}',\ \mathbf{p}) = \frac{2\pi}{\hbar} B_i(\mathbf{p}',\ \mathbf{p})\,\delta[\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p}) \pm \hbar\omega_i]$ — вероятность, с которой электрон за единицу времени перейдет из состояния $\mathbf{p}'$ в состояние $\mathbf{p}$ на i-м механизме рассеяния, $B_i(\mathbf{p}',\ \mathbf{p})$ — квадрат матричного элемента такого перехода, $\varepsilon(\mathbf{p}')$ и $\varepsilon(\mathbf{p})$ — энергии электрона в начальном и конечном состояниях, $\hbar\omega_i$ — изменение энергии при рассеянии. Воспользовавшись выражением (6) для столкновительного члена, запишем формальное решение уравнения (1) в виде интеграла по вероятным траекториям свободного пробега электронов [8]

$$f(\mathbf{p},\ t) = \sum_i \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{p}''\,\{T(\mathbf{p},\ \mathbf{p}',\ t-t')\,S_i(\mathbf{p}'',\ \mathbf{p}')\,f(\mathbf{p}'',\ t')\}, \tag{7}$$

где

$$T(\mathbf{p},\ \mathbf{p}',\ t-t') = \delta[\mathbf{p}' - \mathbf{p} + e\mathbf{E}_0(t-t')]\exp\left\{-\int_0^{t-t'} \nu(\mathbf{p}' + e\mathbf{E}_0\tau)\,d\tau\right\} \tag{8}$$

— вероятность найти электрон, совершающий свободное движение, в состоянии $\mathbf{p}$ в момент времени t при условии, что он начал движение из точки $\mathbf{p}'$ в момент времени t'.

Введем обозначение $\zeta(\mathbf{p},\ t) = \nabla_{\mathbf{p}}\ln f(\mathbf{p},\ t)$, тогда градиент от $f(\mathbf{p},\ t)$ можно записать как $\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p},\ t) = \zeta(\mathbf{p},\ t)\,f(\mathbf{p},\ t)$. Предположим, что на каждом свободном пробеге электрона можно задать однозначно определенную начальными условиями функцию $\zeta\,[\mathbf{p}_t]$, моделирующую градиент ФР. Потребуем, чтобы в соответствии с (5) среднее значение этой функции по всем возможным траекториям, которые могут пройти через точку $\mathbf{p}$ в момент t, было бы равно $\zeta(\mathbf{p},\ t)$.

Поскольку вероятность обнаружить электрон в точке $\mathbf{p}$ в момент t равна $f(\mathbf{p},\ t)$, то, проводя усреднение $\zeta[\mathbf{p}_t]$ по вероятным свободным пробегам, получаем

$$\sum_i \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{p}''\,\{\zeta[\mathbf{p}_t]\,T(\mathbf{p},\ \mathbf{p}',\ t-t')\,S_i(\mathbf{p}'',\ \mathbf{p}')\,f(\mathbf{p}'',\ t')\} =$$

$$= \zeta(\mathbf{p},\ t)\,f(\mathbf{p},\ t) = \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p},\ t). \tag{9}$$

С другой стороны, выражение для $\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}, t)$ найдем, дифференцируя обе части (7) по $\mathbf{p}$. После несложных преобразований (см. *Приложение*) получаем

$$\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}, t) = \sum_i \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{p}'' \{[\mathbf{G}(\mathbf{p}', t-t') + \mathbf{Z}^i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') + \hat{D}(\mathbf{p}'', \mathbf{p}')\,\zeta(\mathbf{p}'', t')]\, T(\mathbf{p}, \mathbf{p}', t-t')\, S_i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}')\, f(\mathbf{p}'', t')\}, \tag{10}$$

где

$$\mathbf{G}(\mathbf{p}', t-t') = -\int_0^{t-t'} \nabla_{\mathbf{p}} [\nu(\mathbf{p}' + e\mathbf{E}_0\tau)]\, d\tau, \tag{11}$$

а выражения для матричной $\hat{D}_{\alpha\beta}(\mathbf{p}'', \mathbf{p}')$ и векторной $\mathbf{Z}^i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}')$ функций, зависящих от импульса электрона до ($\mathbf{p}''$) и после ($\mathbf{p}'$) рассеяния, приведены в *Приложении* [см. формулы (П. 3) и (П. 4) соответственно]. Сопоставляя (10) и (11), получаем закон изменения искомой функции $\zeta[\mathbf{p}_t]$ на свободном пробеге, который следует за актом рассеяния электрона из состояния $\mathbf{p}''$ в состояние $\mathbf{p}'$ за счет i-го механизма:

$$\zeta[\mathbf{p}_t] = \mathbf{G}(\mathbf{p}', t-t') + \mathbf{Z}^i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') + \hat{D}(\mathbf{p}'', \mathbf{p}')\,\zeta(\mathbf{p}'', t'). \tag{12}$$

Здесь два последних члена выполняют роль начального условия для $\zeta[\mathbf{p}_t]$ на пробеге. Второй из них, т. е. $\hat{D}(\mathbf{p}'', \mathbf{p}')\,\zeta(\mathbf{p}'', t')$, определяется значением $\zeta(\mathbf{p}'', t)$ в точке $\mathbf{p}''$, из которой электрон в результате акта рассеяния попал на траекторию очередного свободного пробега. Очевидно, что $\zeta(\mathbf{p}'', t')$ вновь можно представить как среднее от моделирующих функций $\zeta[\mathbf{p}_t]$, определенных на тех траекториях свободного пробега, двигаясь по которым, электрон попадает в состояние $\mathbf{p}''$ в момент t'. Последнее означает, что при рассмотрении всей совокупности вероятных траекторий свободного пробега как последовательности свободных пробегов, реализующихся в рамках достаточно длинной траектории движения одного пробного электрона $\mathbf{p}_t$, в (12) необходимо заменить $\zeta(\mathbf{p}'', t')$ на значение $\zeta[\mathbf{p}_t]$ в конце свободного пробега, предшествовавшего последнему акту рассеяния. Таким образом, получаем замкнутый на себя алгоритм определения функции $\zeta[\mathbf{p}_t]$, удовлетворяющей условию (5). Текущее значение $\zeta[\mathbf{p}_t]$ однозначно задается историей движения пробного электрона, предшествовавшей данному моменту времени.[1] Выбор исходного значения $\zeta[\mathbf{p}_t]$ в начале процесса моделирования достаточно произволен; например, в качестве начального можно взять и нулевой вектор. Это связано с тем, что исходное значение $\zeta[\mathbf{p}_t]$ сравнительно быстро забывается, как правило, по прошествии нескольких актов рассеяния.

Отметим, что полученное выше выражение (12) применимо только в отсутствие внешнего магнитного поля. При наличии последнего вывод зависимости $\zeta[\mathbf{p}_t]$ аналогичен рассмотренному, хотя окончательное выражение, которое мы здесь не приводим, принимает более сложный вид.

Численное моделирование. Проиллюстрируем возможности предложенной методики результатами расчетов пролетного резонанса (рис. 1) и эффекта Ганна (рис. 2) в n-GaAs, а также НЕМАГа на ЦР в p-Ge (рис. 3), когда разогрев носителей заряда во внешних полях приводит к образованию отрицательной дифференциальной подвижности (ОДП). Сопоставление зависимостей Re $\mu_{xx}(\omega)$, представленных на рис. 1—3, с результатами предшествующих работ [2, 9-11], в которых исследовалась частотная зависимость подвижности $\mu_{xx}(\omega)$ в области ОДП путем расчета отклика дрейфовой скорости $\delta\mathbf{v}$ на дополнительное переменное СВЧ поле или ступенчатое переключение греющего поля, показывает

[1] Использование при временно́м усреднении в методе Монте-Карло функций, зависящих от предыстории движения пробного электрона (например, таких, как $\zeta[\mathbf{p}_t]$), не ведет к нарушению принципа марковости. Последний заключается в требовании, чтобы вероятности любых событий не зависели от предыстории движения, и относится только к построению траектории блуждания пробного электрона $\mathbf{p}_t$, не имея ничего общего с информацией, которую можно собирать в одних областях импульсного пространства и переносить по траектории $\mathbf{p}_t$ в другие области.

в пределах погрешности расчетов идентичность результатов. Важно отметить, что прямой расчет отклика $\delta \mathbf{v}$ на возмущение $\delta \mathbf{E}$ не гарантирует линейности полученных характеристик и требует, как правило, достаточно больших значений δE (не менее 10—20 % от амплитуды греющего поля), чтобы обеспечить выделение отклика скорости на фоне статистических флуктуаций, свойственных методу Монте-Карло. Предлагаемая методика позволяет также значительно сократить затраты времени работы ЭВМ, необходимые для проведения расчетов $\mu_{\alpha\beta}(\omega)$. Например, для рис. 1 и 3 на расчет всей частотной зависимости $\mu_{\alpha\beta}(\omega)$ затрачено времени ЭВМ на 1.5 порядка меньше, чем это требовалось при расчете $\mu_{xx}(\omega)$ только в области ОДП в работах [9, 10]. Для БЭСМ-6 это составляет примерно 0.5 и 15—20 ч соответственно. Не менее важной особенностью

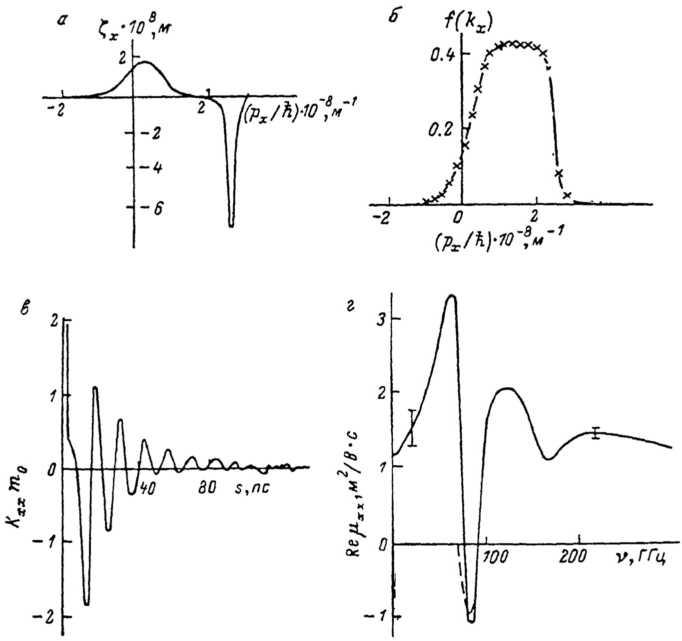

Рис. 1. Пролетный резонанс в n-GaAs.

$E_x = 120$ В/см, $T = 10$ К, $N_I = 0$, модель [9]. *а* — производная функции распределения $\zeta_x(p_x)$, полученная из моделирования $\zeta\,[\mathbf{p}_t]$; *б* — «истинная» (сплошная кривая) и восстановленная по ζ_x (крестики) функция распределения $f(p_x)$; *в* — зависимость от времени s продольной компоненты корреляционной матрицы $K_{xx}(s)$ (в единицах обратной эффективной массы); *г* — зависимость реальной части продольной дифференциальной подвижности Re μ_{xx} от частоты ν, штриховая линия — результат работы [9].

предложенного метода является возможность контролировать правильность и внутреннюю согласованность процедуры, проводя расчет одних и тех же кинетических характеристик различными методами временно́го усреднения. Например, среднюю дрейфовую скорость электронов можно рассчитывать как $\langle \mathbf{v} \rangle = \overline{\mathbf{v}(\mathbf{p}_t)}^t$ и как $\langle \mathbf{v} \rangle = -\overline{\varepsilon(\mathbf{p})\,\zeta\,[\mathbf{p}_t]}^t$. Более того, и сама ФР может быть получена как обычной методикой (рис. 1, *б*, сплошная кривая), так и путем интегрирования (рис. 1, *б*, крестики) компонент градиента ФР (рис. 1, *а*), полученных в результате усреднения значений $\zeta\,[\mathbf{p}_t]$ по элементарным объемам импульсного пространства в соответствии с (5).

В заключение отметим и недостатки процедуры. К основным из них следует отнести появление в ряде случаев резких всплесков амплитуды $|\zeta\,[\mathbf{p}_t]|$, на 2—3 порядка превышающих среднее значение этой величины. Они возникают, во-первых, когда электрон с очень малой энергией поглощает фонон, и являются следствием расходимости множителя $1/(\mathbf{v}(\mathbf{p}'')\cdot\mathbf{p}'')$ в (П. 3), (П. 4) при $\varepsilon(\mathbf{p}'') \to 0$, во-вторых, когда траектория свободного пробега проходит в непосредственной окрестности точек импульсного пространства, где пересекаются сепаратрисы, разделяющие пространство на области с различным характером циклотронного вращения. Последнее, например, имеет место в гофрированной валентной зоне Ge при наличии магнитного поля $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$ [11]. Вероятность появления таких выбросов очень мала, однако, чтобы их вклад при временно́м усреднении затерся, необходимо либо увеличивать в несколько раз выше обычного время моделирования траектории $\mathbf{p}_t$, либо дополнительно использовать элементы симметрии задачи, позволяющие их затереть сразу. Наиболее простой способ, не влияющий на окончательный результат, — не допускать при моделировании траектории $\mathbf{p}_t$ реализации ситуаций, когда выброс должен произойти.

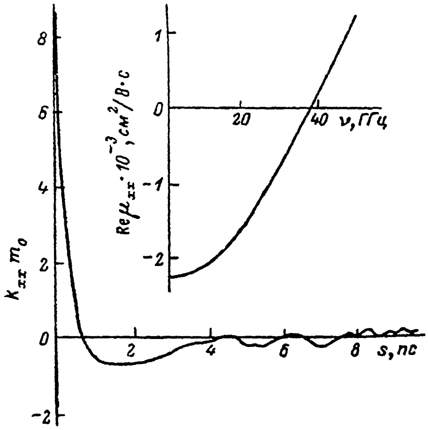

Рис. 2. Эффект Ганна в n-GaAs, $E_x = 4$ кВ/см, $T = 10$ К, $N_I = 0$, модель [9].

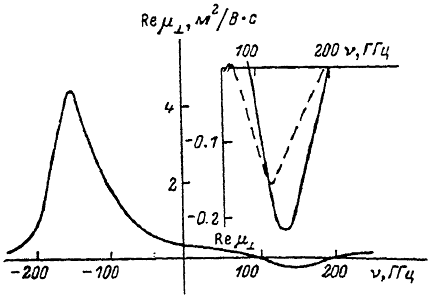

Рис. 3. Частотная зависимость поперечной дифференциальной подвижности для волны круговой поляризации в p-Ge.

$T = 4.2$ К, $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{B} \parallel [001]$, $E_0 = 150$ В/см, $B = 1.65$ Т, $N_I = 0$, модель [10]. На вставке — область ОДП в более крупном масштабе. Сплошная линия — расчет настоящей работы, штриховая — расчет [10] при $T_0 = 10$ К, $N_I = 1.3 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$, $p = 0.7 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$, $E_\perp/E_0 = 0.4$.

Приложение

Дифференцирование правой части выражения (7) по импульсу $\mathbf{p}$ сводится к замене в операторе свободного пробега $T(\mathbf{p}, \mathbf{p}', t-t')$ дельта-функции $\delta[\mathbf{p}' - \mathbf{p} + e\mathbf{E}_0(t-t')]$ на ее градиент по $\mathbf{p}'$, взятый с обратным знаком. Выполнив такую замену и затем взяв интеграл по $d\mathbf{p}'$ по частям, получаем

$$\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}, t) = \sum_i \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\mathbf{p}' T(\mathbf{p}, \mathbf{p}', t-t') \left\{ \int [\mathbf{G}(\mathbf{p}', t-t') + \nabla_{\mathbf{p}'} \ln B_i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}')] \times \right.$$

$$\times S_i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') f(\mathbf{p}'', t')\, d\mathbf{p}'' - \frac{2\pi}{\hbar} \mathbf{v}(\mathbf{p}') \int B_i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') \times$$

$$\left. \times f(\mathbf{p}'', t') \frac{d}{d\varepsilon(\mathbf{p}'')} \delta[\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p}'') \pm \hbar\omega_i]\, d\mathbf{p}'' \right\}. \tag{П. 1}$$

Выражение для $\mathbf{G}(\mathbf{p}', t-t')$ приведено в основном тексте [см. (11)]. Чтобы избавиться во втором слагаемом (П. 1) от производной по энергии, учтем, что при фиксированном направлении $\mathbf{p}$ энергия $\varepsilon(\mathbf{p})$ есть однозначная монотонная функция модуля импульса $|\mathbf{p}|$, поэтому значение энергии ε и ориентацию вектора $\mathbf{p}$ (определяемую, например, азимутальным ϑ и радиальным φ углами) можно рассматривать как независимые координаты положения электрона в импульсном пространстве, т. е. $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\varepsilon, \vartheta, \varphi)$.

Последнее позволяет дифференцирование по энергии выразить через градиент в импульсном пространстве

$$\frac{d}{d\varepsilon} \to \frac{d\mathbf{p}}{d\varepsilon} \nabla_{\mathbf{p}} \to \frac{d|\mathbf{p}|}{d\varepsilon}\bigg|_{\varphi, \vartheta} \left(\frac{d\mathbf{p}}{d|\mathbf{p}|} \nabla_{\mathbf{p}} \right) \to \frac{\mathbf{p}\nabla_{\mathbf{p}}}{\mathbf{v}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{p}}. \tag{П. 2}$$

Здесь учтено, что $d\mathbf{p}/d|\mathbf{p}| = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$, $d\varepsilon|_{\varphi,\vartheta} = \mathbf{v}(\mathbf{p})\,\mathbf{p}d|\mathbf{p}|/|\mathbf{p}|$ и $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p})$. Интегрируя с учетом замены (П. 2) второе слагаемое в (П. 1) по частям и собирая все члены в соответствии с обозначениями выражения (10), получаем

$$\hat{D}_{\alpha\beta}(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') = \frac{v_\alpha(\mathbf{p}')\,p''_\beta}{\mathbf{v}(\mathbf{p}'')\cdot\mathbf{p}''}, \tag{П. 3}$$

$$\mathbf{Z}^i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') = \nabla_{\mathbf{p}} \ln B_i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') + \frac{\mathbf{v}(\mathbf{p}')}{\mathbf{v}(\mathbf{p}'')\cdot\mathbf{p}''} \times$$

$$\times \left[\mathbf{p}''\nabla_{\mathbf{p}''} \ln B_i(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') + \frac{2\mathbf{v}(\mathbf{p}'')\,\mathbf{p}'' - \mathbf{p}''\hat{m}^{-1}(\mathbf{p}'')\,\mathbf{p}''}{\mathbf{v}(\mathbf{p}'')\,\mathbf{p}''}\right], \tag{П. 4}$$

где $\hat{m}^{-1}_{\alpha\beta}(\mathbf{p}'') = \partial^2\varepsilon(\mathbf{p}'')/\partial p''_\alpha \partial p''_\beta$ — компоненты тензора обратной эффективной массы.

Литература

[1] Lehbwohl P. A. — J. Appl. Phys., 1973, v. 44, N 4, p. 1744—1752.
[2] Rees H. D. — IBM J. Res. Dev., 1969, v. 13, p. 537—542.
[3] Пожела Ю., Реклайтис А. Высокочастотные свойства горячих электронов в InSb. — ФТП, 1979, т. 13, в. 6, с. 1127—1133.
[4] Price P. J. — J. Appl. Phys., 1983, v. 54, N 6, p. 3616—3617.
[5] Price P. J. — J. Appl. Phys., 1982, v. 53, N 12, p. 8805—8808.
[6] Price P. J. — Semicond. a. Semimet., 1979, v. 14, p. 249—308.
[7] Матуленис А., Пожела Ю., Стариков Е. Флуктуации скорости и расплывание пакета электронов. — ФТП, 1982, т. 16, в. 4, с. 601—606.
[8] Fawcett W., Boardmann A. D., Swain G. — J. Phys. Chem. Sol., 1970, v. 31, N 9, p. 1963—1990.
[9] Стариков Е. В., Шикторов П. Н. Отрицательная дифференциальная проводимость n-GaAs на частоте пролетного резонанса. — ФТП, 1983, т. 17, в. 12, с. 2120—2123.
[10] Стариков Е. В., Шикторов П. Н. Эффективность твердотельных источников излучения на основе объемных эффектов в дырочном германии. — ФТП, 1986, т. 20, в. 6, с. 1076—1082.
[11] Полупроводниковые мазеры на циклотронном резонансе. Горький, 1986. 175 с.

Институт физики полупроводников
АН ЛитССР
Вильнюс

Получена 13.04.1987
Принята к печати 13.05.1987