

ЭЛЕКТРОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1985.— 320 с.

Посвящена систематическому и подробному изложению линейной теории стационарных электронных явлений переноса в полупроводниках. Излагаются как классическая, так и квантовая теории гальвано- и термомагнитных эффектов. Рассмотрены различные реальные модели зон: произвольная изотропная и анизотропная непараболическая зоны, а также зона типа дырочного германия. Учтено увлечение носителей тока фононами в произвольном неквадрантном магнитном поле. Большое место занимает теория рассеяния носителей. Отдельная глава посвящена размерным эффектам в пленках.

Для научных работников, инженеров и аспирантов, занимающихся исследованием полупроводников, а также студентов старших курсов физических и инженерно-физических специальностей.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Глава 1. Энергетический спектр носителей тока в полупроводниках	7
§ 1. Движение электрона в идеальной кристаллической решетке	7
§ 2. Энергетические зоны в твердых телах. Зоны Бриллюэна	10
§ 3. Структура краев энергетических зон некоторых полупроводников. основные модели зон	15
Глава 2. Статистика носителей заряда в полупроводниках	32
§ 4. Концентрация электронов в зоне проводимости и уровень Ферми. Зависимость эффективной массы от концентрации	32
§ 5. Статистика носителей заряда в собственных полупроводниках и полуметаллах	46
§ 6. Статистика носителей заряда в примесных полупроводниках	52
Глава 3. Решение кинетического уравнения. Механизмы рассеяния	67
§ 7. Феноменологическое определение кинетических коэффициентов и их взаимная связь	67
§ 8. Кинетическое уравнение и условия его применимости	71
§ 9. Решение кинетического уравнения для произвольной сферически- симметричной зоны в приближении времени релаксации	78
§ 10. Рассеяние носителей заряда в полупроводниках с произвольной изотропной зоной. Примесное рассеяние	89
§ 11. Рассеяние носителей заряда на фононах в полупроводниках с произвольной изотропной зоной	100
§ 12. Теория рассеяния носителей заряда в полупроводниках с учетом блоховских волновых функций	123
Глава 4. Электронные явления переноса в полупроводниках с изотропной зоной	136
§ 13. Общие выражения основных кинетических коэффициентов	136
§ 14. Явления переноса в отсутствие магнитного поля	141
§ 15. Явления переноса в магнитном поле	156

§ 16. Явления переноса в полупроводниках типа p -Ge	187
§ 17. Увлечение носителей заряда фононами в полупроводниках с произвольной изотропной зоной	197
Глава 5. Явления переноса в полупроводниках с анизотропной непараболической зоной. Анизотропное рассеяние	206
§ 18. Решение кинетического уравнения для анизотропной зоны в приближении тензора времени релаксации τ	207
§ 19. Тензоры проводимости в полупроводниках с анизотропным законом дисперсии	210
§ 20. Основные кинетические эффекты в кубических полупроводниках с изотропным законом дисперсии	214
Глава 6. Явления переноса в квантующих магнитных полях	223
§ 21. Энергетический спектр и статистика носителей заряда в квантующих магнитных полях	224
§ 22. Гальваномагнитные явления в квантующем магнитном поле	243
§ 23. Термомагнитные явления в поперечном квантующем магнитном поле	262
Глава 7. Электронные явления переноса в полупроводниковых	278
§ 24. Решение кинетического уравнения в пленках с учетом граничных условий	278
§ 25. Явления переноса в пленках с произвольным изотропным	285
§ 26. Квантовые размерные эффекты	294
Список литературы	310

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Глава 1. Энергетический спектр носителей тока в полупроводниках	7
§ 1. Движение электрона в идеальной кристаллической решетке	7
§ 2. Энергетические зоны в твердых телах. Зоны Бриллюэна	10
§ 3. Структура краев энергетических зон некоторых полупроводников. Основные модели зон	15
Глава 2. Статистика носителей заряда в полупроводниках	32
§ 4. Концентрация электронов в зоне проводимости и уровень Ферми. Зависимость эффективной массы от концентрации	32
§ 5. Статистика носителей заряда в собственных полупроводниках и полуметаллах	46
§ 6. Статистика носителей заряда в примесных полупроводниках	52
Глава 3. Решение кинетического уравнения. Механизмы рассеяния	67
§ 7. Феноменологическое определение кинетических коэффициентов и их взаимная связь	67
§ 8. Кинетическое уравнение и условия его применимости	71
§ 9. Решение кинетического уравнения для произвольной сферически-симметричной зоны в приближении времени релаксации	78
§ 10. Рассеяние носителей заряда в полупроводниках с произвольной изотропной зоной. Примесное рассеяние	89
§ 11. Рассеяние носителей заряда на фононах в полупроводниках с произвольной изотропной зоной	100
§ 12. Теория рассеяния носителей заряда в полупроводниках с учетом блоховских волновых функций	123
Глава 4. Электронные явления переноса в полупроводниках с изотропной зоной	136
§ 13. Общие выражения основных кинетических коэффициентов	136
§ 14. Явления переноса в отсутствие магнитного поля	141
§ 15. Явления переноса в магнитном поле	156
§ 16. Явления переноса в полупроводниках типа p -Ge	187
§ 17. Увлечение носителей заряда фононами в полупроводниках с произвольной изотропной зоной	197
Глава 5. Явления переноса в полупроводниках с анизотропной непараболической зоной. Анизотропное рассеяние	206
§ 18. Решение кинетического уравнения для анизотропной зоны в приближении тензора времени релаксации	207
§ 19. Тензоры проводимости в полупроводниках с анизотропным законом дисперсии	210
§ 20. Основные кинетические эффекты в кубических полупроводниках с анизотропным законом дисперсии	214

Глава 6. Явления переноса в квантующих магнитных полях	223
§ 21. Энергетический спектр и статистика носителей заряда в квантующих магнитных полях	224
§ 22. Гальваномагнитные явления в квантующем магнитном поле	243
§ 23. Термомагнитные явления в поперечном квантующем магнитном поле	262
Глава 7. Электронные явления переноса в полупроводниковых пленках. Размерные эффекты	278
§ 24. Решение кинетического уравнения в пленках с учетом граничных условий	278
§ 25. Явления переноса в пленках с произвольным изотропным законом дисперсии	285
§ 26. Квантовые размерные эффекты	294
Список литературы	310

ПРЕДИСЛОВИЕ

Кинетические свойства, как известно, лежат в основе многих технических применений полупроводников. Кроме того, эти свойства чувствительны к законам дисперсии носителей тока и к природе взаимодействия носителей с различными дефектами кристаллической решетки. Поэтому многие традиционные методы изучения полупроводниковых веществ основываются на исследовании различных кинетических эффектов. Они становятся особенно эффективными в некоторых экстремальных условиях: при низких температурах, в сильных магнитных полях, в полупроводниках с сильно непараболической зоной и т. д. Хорошие и надежные результаты получаются тогда, когда исследование проводится комплексно и учитываются выводы теории электронных явлений переноса. Однако в существующих изданиях теория кинетических эффектов излагается в пределах одной — двух глав.

Настоящая книга посвящена систематическому и подробному изложению линейной теории стационарных электронных явлений переноса в полупроводниках. Излагаются как классическая, так и квантовая теории гальвано- и термомагнитных явлений. Рассмотрены произвольная изотропная и анизотропная непараболическая зоны, а также зона типа дырочного германия. Учтено увлечение носителей заряда фононами в произвольном некваंटующем магнитном поле. Подробно изложена теория рассеяния, где учитывается и влияние блоховских амплитуд.

Основную часть книги составляют три важных раздела: статистика носителей тока в полупроводниках, классическая теория и квантовая теория электронных явлений переноса.

Статистика носителей тока, когда отсутствует квантование спектра энергии, изложена во второй главе. В квантующем магнитном поле и при размерном квантовании статистика носителей рассмотрена в главах 6 и 7 соответственно.

Классической теории электронных явлений переноса, построенной на основе решения кинетического уравнения, посвящены главы 3—5. Подробно проанализированы пределы применимости самого кинетического уравнения и его решения. Изложена теория рассеяния носителей заряда в полупроводниках с произвольной изотропной зоной. Для полупроводников типа дырочного германия вычислены время релаксации и подвижность с учетом переходов между зонами легких и тяжелых дырок. В главе 5

рассмотрены явления переноса в многодолинных полупроводниках, где учтена и анизотропия рассеяния. Результаты этой главы могут быть применены к электронному германию и кремнию, а также к полупроводниковым соединениям халькогенидов свинца. В последних, как известно, зона проводимости не только анизотропна, но и непараболична.

Квантовой теории электронных явлений переноса посвящена шестая глава, где исследуются гальвано- и термомагнитные эффекты в поперечном квантующем магнитном поле в полупроводниках с изотропной зоной. Рассмотрены условия осцилляций Шубникова — де Гааза и магнетофононного резонанса. Особое внимание уделено термо-э. д. с. в квантовой области магнитных полей и влиянию непараболичности зоны.

В последней — главе 7 изложены классические и квантовые размерные эффекты. Для пленок, толщина которых сравнима с длиной свободного пробега носителей заряда, решено кинетическое уравнение с учетом граничных условий для функции распределения. Получены общие компактные выражения для тензоров проводимости в пленках. Показана возможность отрицательного магнетосопротивления в пленках с изотропной зоной при полном вырождении электронного газа. Размерное квантование в пленках изложено в заключительном параграфе, где рассмотрена термо-э. д. с. в сильном поперечном магнитном поле.

Все рассмотренные вопросы теории явлений переноса доведены до конкретных формул, и для удобства использования их при анализе экспериментальных результатов указаны условия, при выполнении которых они применимы.

Ссылки на оригинальные статьи в основном относятся к теоретическим работам, список которых к каждой главе приведен в конце книги. Этот список не претендует на полноту.

Считаю своим приятным долгом выразить искреннюю признательность В. Л. Бонч-Бруевичу за ценные замечания и советы при обсуждении рукописи книги, во многом улучшившие ее содержание.

Выражаю благодарность Б. И. Кулиеву и С. Р. Фигаровой за просмотр рукописи, а также за участие в обсуждениях некоторых вопросов теории явлений переноса в пленках.

Хочу выразить особую признательность И. Н. Аскеровой за большое терпение, выдержку и помощь во время работы над книгой.

Благодарен всем сотрудникам кафедры физики твердого тела Азербайджанского государственного университета им. С. М. Кирова и всем тем, кто помогал в работе над книгой.

Глава 1

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

С возникновением квантовой механики электронная теория металлов и полупроводников начала интенсивно развиваться и продолжает развиваться. В настоящее время физика твердого тела, в частности физика полупроводников, является одной из основных областей современной физики и ей посвящено довольно много монографий, например [1—13]. В этих книгах явление переноса изложено в пределах одной или двух глав. Данная книга целиком посвящена подробному изложению линейной теории электронных явлений переноса в полупроводниках.

Поскольку для построения количественной теории электронных явлений переноса необходимо знать явный вид закона дисперсии — зависимость энергий электрона от импульса или волнового вектора $\varepsilon(\mathbf{k})$, то в первой главе коротко остановимся на общих свойствах закона дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ и приведем структуру энергетического спектра известных полупроводников.

§ 1. Движение электрона в идеальной кристаллической решетке

Свободное движение электрона проводимости в металле с линейными размерами L_1 , L_2 и L_3 описывается уравнением Шредингера

$$(-\hbar^2/2m_0)\nabla^2\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

решение которого имеет вид плоской волны

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

где $V = L_1 \cdot L_2 \cdot L_3$ — объем металла, а волновой вектор имеет компоненты $k_i = (2\pi/L_i)n_i$, $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ — целые числа, m_0 — масса свободного электрона.

Подставляя (1.2) в (1.1), получаем связь энергии ε с волновым вектором \mathbf{k} или импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$:

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m_0 = p^2 / 2m_0. \quad (1.3)$$

Видно, что энергия и компоненты импульса свободного электрона квазинепрерывны и сверху не ограничены. Поверхность постоянной энергии, как видно из (1.3), в k -пространстве представляет собой сферу с центром в начале координат и радиусом $k = \hbar^{-1}(2m_0\varepsilon)^{1/2}$.

Модель свободных электронов с применением квантовой статистики хорошо объясняет ряд физических свойств металлов, таких как теплоемкость электронного газа, закон Видемана — Франца и т. д. Однако эта теория не объясняет, почему одни химические элементы в кристаллическом состоянии являются хорошими проводниками, а другие оказываются изоляторами. Она также не смогла объяснить резкого изменения сопротивления с температурой у некоторых кристаллов — полупроводников.

Задача движения электронов в твердом теле по сути является задачей многих частиц. Чтобы исследовать особенности движения электронов в твердом теле с точки зрения квантовой механики в общем виде, необходимо написать уравнение Шредингера системы ядра — электроны и решить его. Гамильтониан этого уравнения должен состоять из операторов кинетической энергии отдельных электронов и ядер, а также из оператора энергии кулоновского взаимодействия электронов и ядер между собой и друг с другом. Применяя адиабатическое приближение и приближение самосогласованного поля Хартри — Фока, это уравнение можно привести к уравнению для одного электрона в потенциальном поле решетки [4]:

$$[-\hbar^2/2m_0]\nabla^2 + V(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

где $V(\mathbf{r})$ — потенциал, создаваемый всеми ядрами и электронами, кроме рассматриваемого, в точке \mathbf{r} . Идеальность решетки характеризуется тем, что ее потенциал удовлетворяет условию

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n), \quad (1.5)$$

где $\mathbf{a}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ — произвольный вектор решетки, \mathbf{a}_i — векторы элементарной ячейки, n_i — целые числа.

Чтобы найти решение (1.4), необходимо сделать какие-то конкретные предположения относительно вида или величины $V(\mathbf{r})$. Однако можно указать некоторые общие свойства решения (1.4), исходя только из трансляционной симметрии решетки или периодичности потенциала (1.5). Эти общие свойства следующие. Движение любого электрона в идеальной решетке описывается волновой функцией Блоха

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

где $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)$ — модулирующая функция или множитель Блоха, а энергия электрона $\varepsilon(\mathbf{k})$ является четной и периодической функцией в k -пространстве [4]:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k}), \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{b}_g), \quad (1.7)$$

где $\mathbf{b}_g = g_1\mathbf{b}_1 + g_2\mathbf{b}_2 + g_3\mathbf{b}_3$ — произвольный вектор обратной ре-

сетки, \mathbf{b}_i — масштабные векторы обратной решетки: $\mathbf{b}_1 = 2\pi[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]/\Omega_0$, $\mathbf{b}_2 = 2\pi[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1]/\Omega_0$, $\mathbf{b}_3 = 2\pi[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]/\Omega_0$, $\Omega_0 = (\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3])$ — объем элементарной ячейки прямой решетки, g_i — целые числа.

Волновая функция Блоха (1.6) представляет собой плоскую волну, модулированную по амплитуде. Групповая скорость этой волны k -электрона имеет вид [11]

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \hbar^{-1} \text{grad}_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}), \quad (1.8)$$

Из (1.7) следует, что для электрона в идеальной решетке изоэнергетическая поверхность, какой бы сложной формой она ни обладала, должна иметь центр инверсии в \mathbf{k} -пространстве. Кроме того, квазиимпульс электрона $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, который удовлетворяет уравнению движения

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F}, \quad (1.9)$$

где \mathbf{F} — сила, действующая на электрон, определен неоднозначно, так как \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{b}_g$ соответствуют одному и тому же значению энергии ε .

Если взять производную по времени от (1.8) и использовать (1.9), то легко получить, что компоненты вектора ускорения и компоненты силы связаны тензором обратной эффективной массы

$$m_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j} \right), \quad i, j = x, y, z. \quad (1.10)$$

Тензор эффективной массы, как видно из (1.10), является мерой искривления поверхности постоянной энергии в рассматриваемой точке \mathbf{k} -пространства. В общем случае поверхность постоянной энергии имеет очень сложную форму, поэтому компоненты эффективной массы сильно меняются от точки \mathbf{k} к точке; кроме того, они могут быть в одних направлениях в \mathbf{k} -пространстве положительными, а в других — отрицательными.

Рассмотрим произвольный изотропный закон дисперсии, когда энергия электрона есть любая функция модуля волнового вектора, т. е. $\varepsilon = \varepsilon(k)$. Компоненты эффективной массы в этом случае, согласно (1.10), будут иметь вид

$$m_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2 k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \delta_{ij} + \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} - \frac{1}{k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right) \frac{k_i k_j}{k^2}. \quad (1.11)$$

Видно, что для изотропной зоны эффективная масса будет скаляром только для параболического закона дисперсии $\varepsilon \sim k^2$, когда $\partial^2 \varepsilon / \partial k^2 = k^{-1} \partial \varepsilon / \partial k$. Поэтому выражение (1.10) для изотропной зоны не очень удобно. В случае произвольной изотропной зоны удобным является определение эффективной массы из соотношения $\mathbf{p} = m(k)\mathbf{v}(k)$. Тогда из (1.8) для $m(k)$ получаем

$$1/m(k) = (1/\hbar^2 k) \partial \varepsilon / \partial k, \quad (1.12)$$

Явный вид $m(k)$ или $m(\varepsilon)$ найден в § 3, где приведен конкретный закон дисперсии для полупроводников $A^{III}B^V$. Отметим,

что определение эффективной массы (1.12) удобно еще и тем, что она входит именно в таком виде в решение кинетического уравнения для произвольного изотропного закона дисперсии (§ 9).

При рассмотрении движения электрона в кристалле мы до сих пор не учитывали спин электрона. Квантовое состояние характеризовалось волновым вектором \mathbf{k} и считалось, что в одном состоянии могут находиться два электрона с противоположными спинами — спиновое вырождение. Во внешнем магнитном поле это вырождение может сниматься. Однако оно может сниматься и в результате спин-орбитального взаимодействия. При учете этого взаимодействия в одноэлектронном уравнении Шредингера (1.4) появляется дополнительный член, и уравнение принимает вид [10, 14]

$$\left[\frac{1}{2m_0} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \hbar}{4m_0^2 c^2} (\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) \right] \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k}, \sigma) \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}), \quad (1.13)$$

где $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ — оператор импульса, $\boldsymbol{\sigma}$ — спиновой оператор Паули.

Можно показать [11], что если кристалл обладает центром инверсии $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$, то и при учете спин-орбитального взаимодействия спиновое вырождение состояний остается, т. е.

$$\varepsilon(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{k}) = \varepsilon(-\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{k}), \quad (1.14)$$

а если центр инверсии отсутствует, $V(\mathbf{r}) \neq V(-\mathbf{r})$, то вырождение снимается во всех состояниях:

$$\varepsilon(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{k}) = \varepsilon(-\boldsymbol{\sigma}, -\mathbf{k}), \quad \varepsilon(-\mathbf{k}, \boldsymbol{\sigma}) = \varepsilon(\mathbf{k}, -\boldsymbol{\sigma}), \quad (1.15)$$

за исключением $\mathbf{k} = 0$, что имеет место в кристаллах типа InSb.

§ 2. Энергетические зоны в твердых телах. Зоны Бриллюэна

Общие свойства закона дисперсии (1.7), полученные только на основе трансляционной симметрии кристалла (1.5), недостаточны для объяснения электрических и оптических характеристик твердых тел. В частности, на основе (1.7) нельзя ответить на главный вопрос теории твердого тела — о классификации кристаллов по электрическим свойствам: почему одни кристаллы хорошо проводят электрический ток, а другие совсем не проводят или плохо проводят?

Поэтому, кроме периодичности (1.5), на потенциал решетки необходимо налагать некоторые условия, которые позволяют получить конкретные зависимости $\varepsilon(\mathbf{k})$. Эти дополнительные условия могут быть наложены на форму или на величину периодического потенциала $V(\mathbf{r})$.

Для определения спектра электронов $\varepsilon(\mathbf{k})$ в реальных трехмерных кристаллах существует ряд приближенных методов расчета. Обзор этих методов можно найти в монографиях [11, 15—17]. Большое распространение получили два метода: сильной

связи и слабой связи, изложенные в книге [4]. Для демонстрации получения энергетических зон немного подробнее остановимся на методе слабосвязанных электронов. В этом методе, считая $V(\mathbf{r})$ малым, с помощью теории возмущений находим решение уравнения (1.4). Было показано [4], что в этом случае спектр электрона имеет параболический характер: $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k})$ (1.3), за исключением тех состояний, для которых \mathbf{k} близки к волновым векторам \mathbf{k}_0 , удовлетворяющим условию

$$\mathbf{k}_0^2 = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{b}_g)^2 \quad \text{или} \quad 2(\mathbf{k}_0 \mathbf{b}_g) + \mathbf{b}_g^2 = 0, \quad (2.1)$$

где \mathbf{b}_g — вектор обратной решетки.

Вблизи точек \mathbf{k}_0 состояния электрона сильно возмущаются, и закон дисперсии имеет вид [4]

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) + \varepsilon_0(\mathbf{k} + \mathbf{b}_g)] \pm \frac{1}{2} \sqrt{[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \varepsilon_0(\mathbf{k} + \mathbf{b}_g)]^2 + 4V_g^2}, \quad (2.2)$$

здесь V_g — фурье-амплитуда периодического потенциала $V(\mathbf{r})$, а $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ дается формулой (1.3).

Рассмотрим зависимость ε от \mathbf{k} в окрестности точки \mathbf{k}_0 , удовлетворяющей (2.1). Положим $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}'$, где \mathbf{k}' — волновой вектор, отсчитанный от точки \mathbf{k}_0 . Тогда для очень малых \mathbf{k}' из (2.2) получим закон дисперсии около \mathbf{k}_0 :

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}') = \varepsilon(\mathbf{k}_0) \pm |V_g| + (1 \pm 2\varepsilon_b/|V_g|) \hbar^2 k'^2 / 2m_0, \quad (2.3)$$

где

$$\varepsilon_b = (\hbar^2/2m_0) (\mathbf{b}_g/2)^2 > |V_g|.$$

Из (2.3) следует, что энергетические уровни электрона в состояниях с $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_0$ (или $\mathbf{k}' \neq 0$) лежат выше $\varepsilon_1 = \varepsilon_0(\mathbf{k}_0) + |V_g|$ или ниже $\varepsilon_2 = \varepsilon_0(\mathbf{k}_0) - |V_g|$, т. е. в интервале $\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = 2|V_g|$ нет ни одного энергетического уровня, следовательно, в спектре появляется запрещенный участок энергии — запрещенная зона с шириной $\varepsilon_g = 2|V_g|$.

Таким образом, энергия электрона $\varepsilon(\mathbf{k})$ в слабом периодическом потенциальном поле решетки является непрерывной функцией волнового вектора в \mathbf{k} -пространстве, за исключением точек, удовлетворяющих условию (2.1), при заданном векторе обратной решетки \mathbf{b}_g . Геометрическое место этих точек — \mathbf{k} -пространство — разбивают на отдельные области, причем внутри каждой области функция $\varepsilon(\mathbf{k})$ квазинепрерывна, а на границах терпит разрыв, и поэтому в энергетическом спектре появляются разрешенные и запрещенные зоны. Области в \mathbf{k} -пространстве, границы которых определяются уравнением (2.1), называются *зонами Бриллюэна* (ЗБ).

В общем трехмерном случае уравнение (2.1), линейное относительно k_x, k_y, k_z , описывает некоторые плоскости (прямые для двумерного или точки для одномерного кристалла) в \mathbf{k} -пространстве. Наименьший многогранник, образующийся при пересечении

плоскостей, соответствующих узлам \mathbf{b}_2 обратной решетки, непосредственно окружающих начало координат ($\mathbf{k} = 0$), есть первая ЗБ. Вторая ЗБ включает в себя область \mathbf{k} -пространства, ограниченную границами первой зоны и плоскостями, соответствующими следующим соседним узлам начала координат $\mathbf{k} = 0$, и т. д.

Поскольку в каждой разрешенной зоне энергия, согласно (1.7), является периодической функцией, то достаточно знать функцию $\varepsilon(\mathbf{k})$ в пределах первой или приведенной ЗБ. Тогда каждому значению \mathbf{k} в первой ЗБ будет соответствовать один уровень в каждой разрешенной энергетической зоне, следовательно, в пределах первой ЗБ ε будет многозначной функцией \mathbf{k} , т. е. $\varepsilon_n(\mathbf{k})$, где n — номер зоны. Поэтому достаточно знать форму только первой ЗБ.

Из (2.1) следует, что для квадратной плоской решетки первая ЗБ представляет собой квадрат с площадью $(2\pi/a)^2$, а для простой кубической решетки — простой куб объемом $(2\pi/a)^3 = (2\pi)^3/\Omega_0$, где a — постоянная решетки. В дальнейшем первую или приведенную зону будем называть просто зоной Бриллюэна.

В физике полупроводников большое значение имеет ЗБ для гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки, так как многим практически важным полупроводникам (A^{IV}) и полупроводниковым соединениям ($A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$) соответствует именно этот случай. Известно, что для ГЦК обратная решетка есть объемцентрированный куб (ОЦК) [4]. Произвольный узел обратной решетки примем за начало координат $\mathbf{k} = 0$ и оси k_x, k_y, k_z направим вдоль ребер ОЦК. Если основные векторы обратной решетки $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ также направить вдоль ребер этого куба, то элементарная ячейка будет содержать два узла. Однако векторы \mathbf{b}_i можно выбрать так, чтобы элементарная ячейка, построенная на этих векторах, содержала всего один узел. Удобно выбрать их в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} (\mathbf{k}_1^0 - \mathbf{k}_2^0 + \mathbf{k}_3^0), & \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} (\mathbf{k}_1^0 + \mathbf{k}_2^0 - \mathbf{k}_3^0), \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi}{a} (-\mathbf{k}_1^0 + \mathbf{k}_2^0 + \mathbf{k}_3^0), \end{aligned} \quad (2.4)$$

где a — длина ребра ГЦК прямой решетки, $\mathbf{k}_1^0, \mathbf{k}_2^0, \mathbf{k}_3^0$ — единичные векторы, направленные вдоль ребер ОЦК обратной решетки.

Каждый узел ОЦК, в том числе начало координат $\mathbf{k} = 0$, имеет восемь первых ближайших соседей, положения которых определяются векторами $\pm\mathbf{b}_1, \pm\mathbf{b}_2, \pm\mathbf{b}_3, \pm(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3)$. Подставив выражения этих векторов с учетом (2.4) в условие (2.1), получим уравнения восьми плоскостей. Эти плоскости, пересекаясь, образуют октаэдр с центром $\mathbf{k} = 0$, вершины которого имеют координаты $(\pm 3\pi/a, 0, 0)$, $(0, \pm 3\pi/a, 0)$ и $(0, 0, \pm 3\pi/a)$. Положения вторых ближайших соседей узла $\mathbf{k} = 0$ определяются векторами $\pm(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2), \pm(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3), \pm(\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3)$. Этим шести векторам обратной решетки, согласно (2.4) и (2.1), соответствуют плоско-

сти, перпендикулярные к осям k_x, k_y, k_z и проходящие через точки $k_x = \pm 2\pi/a, k_y = \pm 2\pi/a$ и $k_z = \pm 2\pi/a$, которые отсекают вершины октаэдра и образуют шесть квадратных граней, и при этом все восемь треугольных граней октаэдра превращаются в шестигранники. Таким образом, ЗБ для ГЦК решетки представляет собой усеченный октаэдр — четырнадцатигранник, изображенный на рис. 1.

Для определения закона дисперсии $\epsilon(\mathbf{k})$ и вычисления эффективной массы электрона в кристаллах плодотворным оказался так называемый $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метод [18—23].

Согласно зонной теории, продемонстрированной здесь на примере слабосвязанных электронов, энергетический спектр твердого тела состоит из разрешенных зон, отделенных друг от друга запрещенными зонами. Поскольку число квантовых состояний в каждой невырожденной разрешенной зоне равно числу элементарных ячеек в кристалле, а также имеет место принцип Паули, то электроны кристалла при абсолютном нуле температуры заполняют не одну, а несколько наинизших зон. При этом в основном состоянии кристалла могут иметь место две ситуации: если электроны заполняют несколько низких зон полностью, а следующая зона заполнена частично, то внешнее электрическое поле легко изменяет распределение электронов, заполняющих половину зоны в \mathbf{k} -пространстве, и такие кристаллы являются *проводниками — металлами*; если электроны заполняют определенное количество низких зон полностью, а все вышележащие зоны пусты, то такие кристаллы ток проводить не могут и являются *изоляторами*. Действительно, полностью заполненные зоны означают, что во всех \mathbf{k} -состояниях зоны Бриллюэна находятся электроны, и поэтому плотность тока

$$\mathbf{j} = -e \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (2.5)$$

за счет такой зоны равна нулю, так как скорость электрона есть нечетная функция волнового вектора $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = -\mathbf{v}(-\mathbf{k})$, зона Бриллюэна симметрична относительно точки $\mathbf{k} = 0$ и слабое внешнее электрическое поле не сможет изменить симметричное распределение электронов по \mathbf{k} -состояниям.

Такие кристаллы станут проводниками только в возбужденном состоянии, когда определенное количество электронов под внешним воздействием перейдет из самой верхней полностью заполненной зоны — валентной зоны в вышележащую пустую зону — *зону проводимости*. Изоляторы, у которых ширина запре-

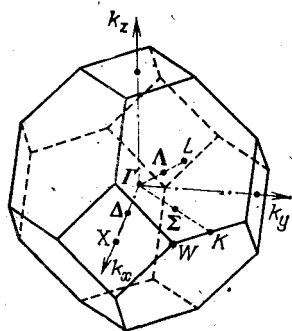


Рис. 1. Зона Бриллюэна для гранецентрированной кубической решетки. Указаны некоторые симметричные точки (Γ, X, L, K, W) и направления (Δ, Σ, Λ)

ценной зоны не очень велика, и их можно в обычных условиях перевести в возбужденное состояние, называются *полупроводниками*.

При возбуждении только очень малая часть электронов переходит из валентной зоны в зону проводимости, занимает состояния на ее дне и становится *электронами проводимости*. При этом и частично освобожденная от электронов валентная зона участвует в проводимости. Для описания этого участия удобным является понятие дырки. Допустим, что одно k_1 -состояние освобождено от электрона. Тогда плотность тока заполненной зоны с одним недостающим электроном есть

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= -e \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) - (-e) \mathbf{v}(\mathbf{k}_1) = \\ &= +e \mathbf{v}(\mathbf{k}_1). \end{aligned} \quad (2.6)$$

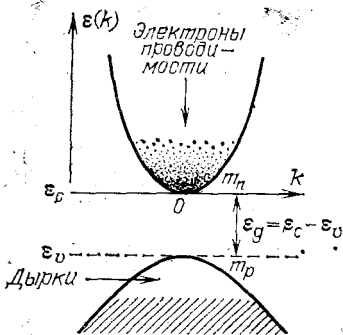


Рис. 2. Электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне — носители тока в полупроводниках

Видно, что заполненная валентная зона с одним недостающим электроном эквивалентна зоне, где находится всего одна частица в состоянии k_1 с зарядом $(+e)$. Эта квазичастица носит название *дырка*. Для этой квазичастицы легко можно написать уравнение движения

$$dv_i/dt = \sum_j (1/m_p)_{ij} F_j, \quad (2.7)$$

где $F_j = +eE_j$ — сила, действующая на частицу с зарядом $(+e)$, а

$$\left(\frac{1}{m_p}\right)_{ij} = -\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_i \partial k_j}\right) > 0 \quad (2.8)$$

играет роль тензора эффективной массы дырок.

Поскольку дырки занимают состояния в зоне, где энергия максимальна и кривизна зоны отрицательна, то, согласно (2.8), эффективная масса дырок положительна. Таким образом, носителями тока в полупроводниках являются *электроны проводимости* и *дырки* в валентной зоне с зарядом $(+e)$ и положительной эффективной массой (2.8) (рис. 2).

Кристаллы в возбужденное — проводящее состояние можно привести различными внешними воздействиями: повышением температуры, освещением, облучением и т. д. Здесь нас будут интересовать только температурные возбуждения и соответственно стационарные электронные явления переноса в полупроводниках.

§ 3. Структура краев энергетических зон некоторых полупроводников. Основные модели зон

В предыдущем параграфе было показано, что в полупроводниках носители тока — электроны проводимости и дырки — занимают нижний край зоны проводимости и верхний край валентной зоны соответственно (рис. 2). Поэтому для построения теории стационарных электронных явлений переноса достаточно знать структуру краев зоны проводимости и валентной зоны. Прежде чем перейти к описанию краев зон конкретных полупроводников, приведем модель простейшей зонной структуры, играющую важную роль в теории кинетических эффектов в полупроводниках.

1. Простая параболическая модель зоны. Согласно этой модели минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны находятся в центре зоны Бриллюэна $\mathbf{k} = 0$ и отстоят друг от друга на энергетическое расстояние ε_g — ширину запрещенной зоны, причем для электронов проводимости и дырок имеет место простой параболический закон дисперсии (рис. 2). В этой модели зоны невырождены и изоэнергетические поверхности вблизи точки $\mathbf{k} = 0$ представляют собой сферу. Если за нуль энергии принять энергию дна зоны проводимости ($\varepsilon_c = 0$, $\varepsilon_v = -\varepsilon_g$), то закон дисперсии вблизи $\mathbf{k} = 0$ будет иметь вид для электронов проводимости

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m_n \quad (3.1)$$

и для дырок

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -\varepsilon_g - \hbar^2 k^2 / 2m_p. \quad (3.2)$$

Здесь эффективные массы электронов m_n и дырок m_p являются постоянными величинами, не зависящими от энергии.

Видно, что простейшая модель зоны характеризуется тремя параметрами ε_g , m_n и m_p , которые определяются из эксперимента. Эта модель не относится к какому-нибудь конкретному полупроводнику, а является пробной моделью, и иногда ее называют *стандартной зоной*. Важным достоинством этой модели является ее простота, что позволяет довести многие задачи теории явлений переноса до конца и построить аналитическую теорию.

2. Структура зоны полупроводников — элементов четвертой группы A^{IV} ; многодолинная параболическая модель. Наиболее изученными из этого класса являются кристаллы германия и кремния, так как они нашли широкое практическое применение.

Германий и кремний имеют одинаковую кристаллическую структуру и кристаллизуются в решетку типа алмаза. В решетке этого типа каждый атом, помещенный в центре правильного тетраэдра, окружен четырьмя атомами, расположенными в его вершинах. Решетка алмаза не является простой решеткой Браве, а в элементарной ячейке содержится два атома [4]. Первая зона Бриллюэна германия и кремния показана на рис. 1.

Структура энергетических зон германия и кремния исследована во многих экспериментальных и теоретических работах.

В результате было установлено, что дно зоны проводимости Ge и Si не лежит в центре зоны Бриллюэна (Γ -точка). У германия самые низкие минимумы зоны проводимости находятся в направлениях $[111]$ на границе зоны Бриллюэна в L -точках, т. е. в центрах гексагональных граней, а у кремния абсолютные минимумы зоны проводимости расположены в направлениях $[100]$ внутри зоны Бриллюэна. Один из этих минимумов для Ge и Si изображен на рис. 3.

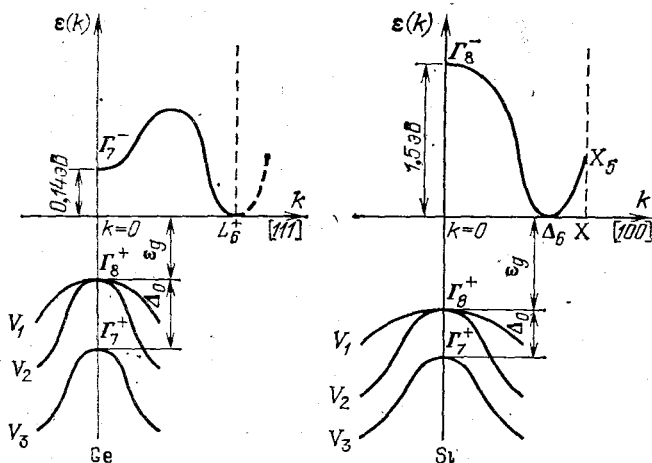


Рис. 3. Структура краев зоны проводимости и валентной зоны германия и кремния с учетом спин-орбитального расщепления

Изоэнергетические поверхности около минимумов зоны проводимости представляют собой эллипсоиды вращения с осью вращения, направленной по оси типа $[111]$ для Ge и $[100]$ для Si. Расположение этих эллипсоидов в \mathbf{k} -пространстве показано на рис. 4 и 5. Если энергию зоны проводимости в точке минимума принять за нуль и k_z направить по оси вращения, то закон дисперсии вблизи каждого минимума будет иметь вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_{\perp}} + \frac{k_z^2}{m_{\parallel}} \right), \quad (3.3)$$

где m_{\perp} и m_{\parallel} — соответственно поперечные и продольные эффективные массы электрона проводимости.

Таким образом, зона проводимости Ge и Si имеет несколько минимумов (8 для Ge и 6 для Si) или долин, причем вблизи каждой долины энергия ε зависит от компонент волнового вектора \mathbf{k} параболически (3.3). Такая модель носит название зона со многими минимумами или *многодолинная параболическая модель*. Отметим, что поскольку в германии минимумы лежат на границе зоны Бриллюэна (точка L , рис. 4), то число полных эллипсоидов, приходящихся на первую зону Бриллюэна, равно 4, тогда как кремний имеет 6 полных эллипсоидов.

Компоненты эффективной массы m_{\perp} и m_{\parallel} были определены из эксперимента по циклотронному резонансу [19]. Результаты эксперимента приведены в табл. 1. Коэффициент анизотропии зоны $\gamma = m_{\parallel}/m_{\perp}$ можно определить и из измерений гальваномагнитных эффектов [24, 25].

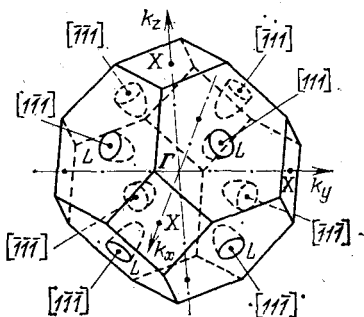


Рис. 4. Расположение минимумов и изоэнергетические поверхности зоны проводимости германия. Указаны в единицах π/a координаты L -точек, где энергия минимальна (центры эллипсоидов). Например, $[1\bar{1}\bar{1}]$ означает $L(\pi/a, -\pi/a, \pi/a)$; $a = 5,66 \text{ \AA}$ — постоянная кубической решетки германия

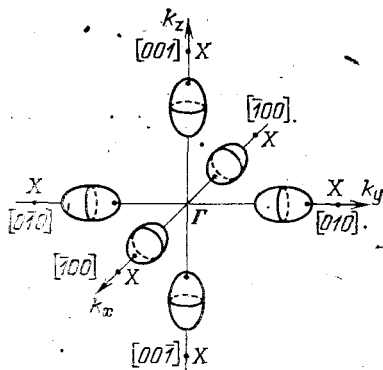


Рис. 5. Расположения минимумов и изоэнергетические поверхности зоны проводимости кремния

Рассмотрим структуру вершины валентной зоны в точке $k=0$. Без учета спин-орбитального взаимодействия валентная зона в точке $k=0$ трехкратно вырождена. Если двигаться в любом направлении от точки $k=0$, то вырождение полностью снимается и получаются три ветви зоны. Исключение составляют симметричные направления $[100]$ и $[111]$. Учет спин-орбитального

Таблица 1

Основные параметры краев зон германия и кремния

Параметры	Германий		Параметры	Кремний	
	Германий	Кремний		Германий	Кремний
m_{\parallel}/m_0	1,58	0,92	A	-13,1	-4,1
m_{\perp}/m_0	0,08	0,19	B	-8,9	-1,1
$\gamma = m_{\parallel}/m_{\perp}$	19,3	4,8	$ C $	12,4	4,1
ϵ_g , эВ			m_1/m_0	0,33	0,49
при 0 К	0,74	1,21	m_2/m_0	0,042	0,160
при 300 К	0,66	1,09	m_3/m_0	0,077	0,245
$10^4 \cdot \partial \epsilon_g / \partial T$, эВ/гр	-4,4	-4,1	m_1/m_2	7,9	3,1
Δ_0 , эВ	0,280	0,035			

взаимодействия полностью снимает вырождение зон в точках $\mathbf{k} \neq 0$ и частично в точке $\mathbf{k} = 0$, так что одна ветвь отщепляется от других на величину энергии спин-орбитального взаимодействия Δ_0 . В результате получается следующая картина верхнего края валентной зоны Ge и Si, схематически изображенная на рис. 3, т. е. имеем три зоны: зоны тяжелых (V_1) и легких (V_2) дырок, вырожденные в точке $\mathbf{k} = 0$, и зона V_3 , отщепленная на величину Δ_0 спин-орбитальным взаимодействием *).

Закон дисперсии зон V_1 и V_2 , вырожденных в экстремальной точке $\mathbf{k} = 0$ в кубических кристаллах, к которым относятся Ge и Si, имеет вид [11, 25]

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = -(\hbar^2/2m_0) \left[Ak^2 \mp \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2)} \right], \quad (3.4)$$

где A , B и C — постоянные величины, которые могут быть оценены теоретически и определены экспериментально [19] (см. табл. 1).

Закон дисперсии (3.4) является квадратичным, но анизотропным. Изоэнергетические поверхности в этом случае не являются сферами, а имеют более сложный вид. Эти поверхности носят названия деформированных сфер или гофрированных поверхностей.

Вводя в \mathbf{k} -пространстве сферическую систему координат с полярной осью, направленной по k_z , и усредняя по углам, закон дисперсии (3.4) приближенно можно представить в виде [4]

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) \approx -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} (A \mp \sqrt{B^2 + C^2/5}), \quad (3.5)$$

т. е. получаем две изотропные зоны тяжелых и легких дырок:

$$\varepsilon_1(\mathbf{k}) \approx -\hbar^2 k^2 / 2m_1, \quad \varepsilon_2(\mathbf{k}) \approx -\hbar^2 k^2 / 2m_2 \quad (3.6)$$

со скалярными эффективными массами

$$m_{1,2} = m_0 (A \mp \sqrt{B^2 + C^2/5})^{-1} \quad (3.7)$$

соответственно. Сравнивая численные значения (3.4) при различных направлениях \mathbf{k} (типа [100], [110], [111]) с усредненным выражением (3.5), легко увидим, что приближенное выражение (3.5) правильно описывает зону легких дырок и менее закономерно для зоны тяжелых дырок, и поэтому формула (3.7) для тяжелых дырок может служить только для оценки эффективной массы m_1 ; для эффективной массы m_2 (3.7) дает значение, близкое к истинному.

*) Заметим, что каждая из этих трех зон двукратно вырождена по спину, так как в кристаллах типа алмаза, где есть центр инверсии, учет спин-орбитального взаимодействия не снимает вырождения по спину [см. (1.14)].

Зона V_3 невырождена, поэтому вблизи экстремума $k = 0$ она изотропна для кубических кристаллов Ge и Si:

$$\varepsilon_3(k) = -\Delta_0 - \hbar^2 k^2 / 2m_3, \quad (3.8)$$

где Δ_0 — величина спин-орбитального расщепления, m_3 — эффективная масса дырок в третьей зоне (см. табл. 1).

3. Структура зон полупроводников $A^{III}B^V$; непараболическая модель Кейна. Многие соединения элементов третьей и пятой групп периодической системы кристаллизуются в структуре, которая носит название цинковой обманки или сфалерита, и имеют полупроводниковый характер проводимости*). Структура цинковой обманки аналогична структуре алмаза. Обе структуры состоят из взаимно проникающих кубических гранецентрированных подрешеток. Только, в отличие от алмаза, в решетке типа цинковой обманки эти подрешетки составлены из разных атомов: Zn и S, In и Sb, Ga и As и т. д. Поэтому в структуре цинковой обманки отсутствует элемент симметрии — инверсия, переводящая обе подрешетки друг в друга в структуре алмаза. Решетка цинковой обманки, так же как и решетка алмаза, относится к тетраэдрической фазе, только здесь каждый атом A^{III} окружен четырьмя атомами B^V , находящимися на вершинах правильного тетраэдра, и наоборот. Первая зона Бриллюэна для структуры цинковой обманки такая же, как и для алмаза (рис. 1).

Структура зон соединений $A^{III}B^V$ теоретически исследована в работах [26—28]. Основные параметры зоны этих соединений приведены в табл. 2.

Без учета спина верхний край валентной зоны $A^{III}B^V$ находится в точке $k = 0$ и имеет такую же структуру, как у Ge и Si, схематически изображенную на рис. 3 или на левой схеме рис. 6. Следовательно, закон дисперсии для валентных зон при малых k и для $A^{III}B^V$ будет иметь вид (3.4) или (3.6) и (3.8)**). Значения постоянных A , B и C , а также m_1 , m_2 и m_3 , входящих в эти законы дисперсии для некоторых $A^{III}B^V$, приведены в табл. 2.

Как видно из табл. 2, дно зоны проводимости не для всех полупроводников $A^{III}B^V$ лежит в центре зоны Бриллюэна. Например, самый низкий минимум зоны проводимости GaP и AlSb находится в направлении типа [100], Δ -минимумы. Изоэнергетические поверхности вблизи этих минимумов, естественно, есть эллипсоиды вращения с осью вращения вдоль [100]. Поэтому структура краев зоны в GaP и AlSb точно такая же, как и для Si, схематически изображенная на рис. 3. Интересно заметить, что многие зонные параметры GaP и AlSb даже численно близки к параметрам зоны Si (ср. табл. 1 и 2). Однако дно зоны

*) Отметим, что в структуре цинковой обманки кристаллизуются также соединения типа $A^{IV}B^{VI}$ и A^IVB^{VII} .

**) Однако валентная зона $A^{III}B^V$ от зоны Ge и Si отличается тем, что в них, как видно из (3.20), зона легких дырок непараболическа.

Основные параметры краев зон некоторых полупроводниковых соединений АШВ

Параметры		InSb	InAs	GaSb	GaAs	InP	GaP	AlSb
1. Положение наиболее низкого минимума — дно зоны проводимости		Г	Г	Г	Г	Г	Δ	Δ
2. Вышележащие минимумы зоны проводимости				Λ, Δ	Λ	Δ	Г	Г
3. Расстояние между дном и вышележащими минимумами в зоне проводимости $\varepsilon(\Lambda) - \varepsilon(\Gamma)$, эВ $\varepsilon(\Delta) - \varepsilon(\Gamma)$, эВ								
4. Ширина запрещенной зоны ε_g , эВ	при 4 К при 300 К	0,23 0,18	0,42 0,36	0,81 0,70	1,52 1,43	1,42 1,26	2,32 2,24	1,7 1,6
5. Термический коэффициент ширины запрещенной зоны $10^4 \cdot \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T}$, гр		-2,8	-2,8	-3,5	-5	-4,6	-5,5	-3,5
6. Спин-орбитальное расщепление валентных зон Δ_0 , эВ		0,90	0,38	0,75	0,34	0,10	0,13	0,75
7. Постоянные, входящие в закон дисперсии валентных зон (3.4)	A B C	-26,5 -24,1 13,9	-17,1 -14,9 10,9	-11,2 -7,9 10,2	-7,4 -4,9 5,06	-8,1 -5,8 5,11	-4,7 -2,5 2,7	-5,5 -2,8 3,55
8. Эффективная масса на дне зоны проводимости m_n в ед. массы свободного электрона m_0	0,016 (4 К) 0,011 (300 К)	0,023— 0,027	0,047	0,065	0,073	$m_{\perp} = 0,22$ $m_{\parallel} = 1,1$	$m_{\perp} = 0,25$ $m_{\parallel} = 0,95$	
9. Эффективная масса дырок в ед. массы свободного электрона m_0	m_1 m_2 m_3	0,5 0,015 0,12	0,3—0,8 0,025 0,11	0,23—0,71 0,053 0,16	0,5—1,0 0,11 0,15	0,2—1,0 0,08 0,18	0,5 0,13 0,22	0,4—0,9 0,12 0,27

проводимости для большинства полупроводников $A^{III}B^V$ расположено в центре зоны Бриллюэна, Γ_6 -минимумы (см. табл. 2). Полупроводниковые соединения $A^{III}B^V$, у которых дно зоны проводимости находится в точке Γ , называются полупроводниками типа InSb. Структура краев зоны проводимости и валентной зоны для полупроводников типа InSb показана на рис. 6.

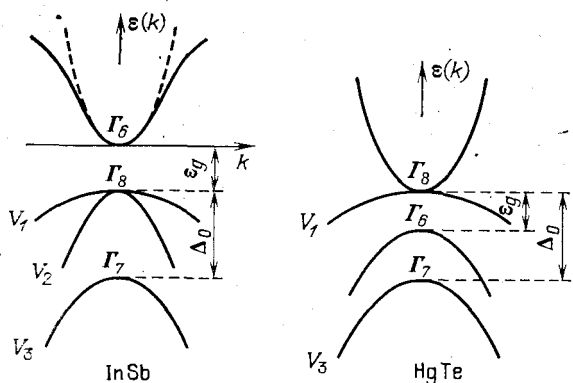


Рис. 6. Модель краев зоны проводимости и валентной зоны с учетом спин-орбитального взаимодействия для полупроводников типа $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$. Штриховой линией показано параболическое приближение для зоны проводимости

Закон дисперсии зон в окрестности точки Γ для InSb был найден Кейном [20, 21]. Используя метод Лёвдина [29], Кейн [20] точно учел взаимодействие зоны проводимости с валентными зонами V_1, V_2, V_3 (рис. 6), а влияние далеко лежащих зон учитывалось обычным $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ -методом теории возмущений. Оказалось, что валентная зона V_1 (рис. 6) не взаимодействует с зоной проводимости, и поэтому форма зоны определяется взаимодействием с удаленными зонами. Учет этих взаимодействий приводит к анизотропному закону дисперсии для зоны V_1 , который содержит линейный и квадратичный члены по \mathbf{k} . Как было отмечено выше, можно пренебречь линейным членом по \mathbf{k} и провести усреднение в \mathbf{k} -пространстве. Если за начало отсчета энергии взять дно зоны проводимости, то для зоны тяжелых дырок V_1 в указанном приближении получаем простую параболическую форму с эффективной массой m_1 (см. табл. 2):

$$\epsilon_{V_1} = -\epsilon_g - \hbar^2 k^2 / 2m_1. \quad (3.9)$$

Зона проводимости в InSb взаимодействует с остальными двумя валентными зонами: V_2 — зоной легких дырок и V_3 — спин-орбитально расщепленной зоной. Точно учитывая эти взаимодействия, Кейн [20, 21] получил следующее уравнение для энергии, из которого можно определить закон дисперсии взаимодействующей

ющих зон:

$$\varepsilon' (\varepsilon' + \varepsilon_g) (\varepsilon' + \varepsilon_g + \Delta_0) - k^2 P^2 \left(\varepsilon' + \varepsilon_g + \frac{2}{3} \Delta_0 \right) = 0. \quad (3.10)$$

Здесь энергия отсчитывается от дна зоны проводимости Γ_6 ,

$$\varepsilon' = \varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \varepsilon - \varepsilon_0, \quad m_0 - \text{масса свободного электрона, } \varepsilon_g = \varepsilon(\Gamma_0) - \varepsilon(\Gamma_6) - \text{ширина запрещенной зоны при } k = 0,$$

$$P = -i(\hbar/m_0) \langle S | \hat{p}_x | X \rangle \quad (3.11)$$

— матричный элемент, учитывающий взаимодействие между зоной проводимости и валентной зоной, S и X — волновые функции s - и p -симметрии, \hat{p}_x — оператор компоненты импульса,

$$\Delta_0 = -3i(\hbar/4m_0^2 c^2) \langle X | (\Delta V \times p)_g | Z \rangle \quad (3.12)$$

— энергия спин-орбитального расщепления валентных зон.

Из уравнения (3.10) видно, что при $k = 0$ имеется три собственных значения энергии:

$$\varepsilon = 0, \quad \varepsilon_{v_2} = -\varepsilon_g, \quad \varepsilon_{v_3} = -\varepsilon_g - \Delta_0, \quad (3.13)$$

соответствующие дну зоны проводимости и потолку валентных зон V_2 и V_3 (рис. 6).

Подставляя соответствующие нулевые решения (3.13) в уравнение (3.10), получим законы дисперсии для каждой зоны в следующем приближении по k , которые справедливы при малых k и имеют вид

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{k^2 P^2}{3} \left(\frac{2}{\varepsilon_g} + \frac{1}{\Delta_0 + \varepsilon_g} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}, \quad (3.14)$$

$$\varepsilon_{v_2} = -\varepsilon_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{2k^2 P^2}{2\varepsilon_g} = -\varepsilon_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2}, \quad (3.15)$$

$$\varepsilon_{v_3} = -\varepsilon_g - \Delta_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{k^2 P^2}{3(\varepsilon_g + \Delta_0)} = -\varepsilon_g - \Delta_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_3}, \quad (3.16)$$

где m_n , m_2 и m_3 — эффективные массы на дне зоны проводимости, на потолке зоны легких дырок и зоны спин-орбитально расщепленной валентной зоны соответственно.

Если ввести более удобный параметр

$$s = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{P}{\hbar}, \quad (3.17)$$

то для указанных эффективных масс, согласно (3.14) — (3.16), получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} 1/m_n &= s^2 (2/\varepsilon_g + 1/(\varepsilon_g + \Delta_0)) + 1/m_0, \\ 1/m_2 &= 2s^2/\varepsilon_g - 1/m_0, \\ 1/m_3 &= s^2/(\varepsilon_0 + \Delta_0) - 1/m_0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Отметим, что законы дисперсии (3.14) — (3.16), которые спра-

ведливы около-краев зон, т. е. при малых k , могут быть получены также $k \cdot \hat{p}$ -методом, и поэтому, естественно, эффективные массы (3.18) будут определяться соответствующими энергетическими расстояниями ε_g и $\varepsilon_g + \Delta_0$ между взаимодействующими зонами *) и параметром взаимодействия зон s . Этот параметр, согласно (3.11) и (3.17), имеет размерность скорости и может быть оценен, используя (3.18), если из эксперимента определить ε_g , Δ_0 и одну из эффективных масс m_n , m_2 или m_3 . Используя данные табл. 2, легко оценить параметр $s \approx 10^8$ см/с.

Из (3.10) видно, что точный учет взаимодействия зоны проводимости с двумя валентными зонами приводит к кубическому уравнению, которое содержит только квадрат волнового вектора k^2 . При малых k из этого уравнения получаются параболические законы дисперсии (3.14) — (3.16). В общем виде из (3.10) должны получаться непараболические, но сферически-симметричные законы дисперсии. Рассмотрим случаи, когда удается написать явный вид закона дисперсии отдельных зон.

Двухзонное приближение $\Delta_0 \gg \varepsilon_g$, которое хорошо оправдывается для InSb. В этом приближении (3.10) превращается в квадратное уравнение, решение которого дает следующие непараболические законы дисперсии для зоны проводимости:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 + \left(\frac{2s\hbar k}{\varepsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{\varepsilon_g}{2} \quad (3.19)$$

и для зоны легких дырок:

$$\varepsilon_{v_2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 + \left(\frac{2s\hbar k}{\varepsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{\varepsilon_g}{2}, \quad (3.20)$$

где учтено обозначение (3.17). Если наряду с условием $\Delta_0 \gg \varepsilon_g$ учтем тот факт, что для InSb $m_n \ll m_0$, то, согласно (3.18), получим простое соотношение между эффективной массой на дне зоны проводимости и шириной запрещенной зоны

$$\varepsilon_g = 2m_n s^2. \quad (3.21)$$

Пренебрегая членами $\sim 1/m_0$, (3.19) перепишем в виде

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_g}{2} \left\{ \left[1 + \left(\frac{2s\hbar k}{\varepsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - 1 \right\}. \quad (3.22)$$

Интересно отметить, что с учетом (3.21) последняя формула принимает вид закона дисперсии свободной релятивистской частицы

$$\varepsilon = \sqrt{m_n^2 s^4 + s^2 p^2} - m_n s^2, \quad (3.23)$$

где s соответствует скорости света, $p = \hbar k$ — импульсу, m_n — массе покоя, $m_n s^2$ — энергии покоя, а ε — энергии движения частицы.

*) Валентные зоны между собой не взаимодействуют, а каждая из них взаимодействует с зоной проводимости.

Приближение $\Delta_0 \ll \varepsilon_g$, которое имеет место для InP и GaAs (см. табл. 2). В этом случае, чтобы найти закон дисперсии для зоны проводимости в (3.10), можно Δ_0 стремиться к нулю, $\Delta_0 \rightarrow 0$. При этом получаем квадратное уравнение, одно из решений которого дает следующий закон дисперсии для зоны проводимости:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 + \frac{3}{2} \left(\frac{2s\hbar k}{\varepsilon_g} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{\varepsilon_g}{2}. \quad (3.24)$$

Отметим, что при нахождении закона дисперсии для зоны легких дырок в (3.10) Δ_0 нельзя стремиться к нулю, так как в этом случае $\varepsilon'|_{k=0} + \varepsilon_g = 0$, и следует ограничить Δ_0 снизу, т. е. предположить $s\hbar k \ll \Delta_0 \ll \varepsilon_g$. В этом приближении для зоны легких дырок получаем параболический закон дисперсии (3.15).

Приближение $\varepsilon' \ll \varepsilon_g + \frac{2}{3} \Delta_0$, которое справедливо при любом соотношении между величинами ε_g и Δ_0 , за исключением случая одновременного стремления их к нулю. Поэтому это приближение содержит не только предыдущие два случая $\Delta_0 \gg \varepsilon_g$ и $\Delta_0 \ll \varepsilon_g$, но оно применимо, когда $\Delta_0 \approx \varepsilon_g$. Последнее имеет место в некоторых полупроводниках, таких как InAs и GaSb (см. табл. 2). В приближении $\varepsilon' \ll \varepsilon_g + \frac{2}{3} \Delta_0$ уравнение (3.10) становится квадратным. Одно решение этого уравнения дает закон дисперсии для зоны проводимости

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 + \frac{2(s\hbar k)^2}{\varepsilon_g} \left(\frac{2}{\varepsilon_g} + \frac{1}{\varepsilon_g + \Delta_0} \right) \right]^{1/2} - \frac{\varepsilon_g}{2}. \quad (3.24a)$$

Этот закон дисперсии при $\Delta_0 \gg \varepsilon_g$ и $\Delta_0 \ll \varepsilon_g$ переходит в (3.19) и (3.24) соответственно. Кроме того, (3.24a) при не очень больших заполнениях описывает зону проводимости полупроводников InAs и GaSb, у которых $\Delta_0 \approx \varepsilon_g$.

Трехзонное приближение. В общем случае при произвольных значениях ширины запрещенной зоны ε_g и спин-орбитального расщепления валентных зон Δ_0 , когда между ними нельзя написать какое-либо сильное неравенство, для определения законов дисперсии зон следует решить кубическое уравнение (3.10) относительно $\varepsilon' = \varepsilon - \varepsilon_0$, что не всегда удается. Однако для вычисления кинетических коэффициентов решать это уравнение даже не надо, а достаточно знать зависимость k от ε (а не наоборот). Для полупроводников с очень малой эффективной массой ($m_n \ll m_0$) всегда можно пренебречь ε_0 по сравнению с энергией электрона в решетке ε . Тогда зависимость k от ε легко получается из (3.10):

$$k^2(\varepsilon) = \frac{2}{3\hbar^2 s^2} \frac{\varepsilon(\varepsilon + \varepsilon_g)(\varepsilon + \varepsilon_g + \Delta_0)}{\left(\varepsilon + \varepsilon_g + \frac{2}{3} \Delta_0 \right)}. \quad (3.25)$$

В полупроводниках типа n -InAs вместо закона дисперсии (3.22) можно использовать соотношение (3.25). Этот случай мы будем называть трехзонной моделью Кейна.

В частном случае, когда $\Delta_0 \gg \varepsilon_g$, т. е. в двухзонном приближении из (3.25) получается простое соотношение между k и ε . С учетом (3.21) оно имеет вид

$$\varepsilon(1 + \varepsilon/\varepsilon_g) = \hbar^2 k^2 / 2m_n. \quad (3.26)$$

Одно решение этого квадратного уравнения дает зону проводимости (3.22), а другое — зону легких дырок. При $\varepsilon_g \gg \varepsilon$ (3.26) сводится к закону дисперсии стандартной — параболической зоны проводимости.

4. Полупроводники $A^{II}B^{VI}$; сильно непараболическая зона $Cd_xHg_{1-x}Te$ и $Zn_xHg_{1-x}Se$. Многие полупроводники $A^{II}B^{IV}$ кристаллизуются в структуре цинковой обманки. Многочисленные теоретические и экспериментальные работы показывают, что структура краев зоны в этих полупроводниках полностью аналогична структуре зоны для $A^{III}B^V$, за исключением соединений HgTe и HgSe. Например, структура краев зон полупроводников типа CdTe такая же, как и для InSb, что показана на левой схеме рис. 6 и на правой схеме рис. 7. Параметры зоны для CdTe

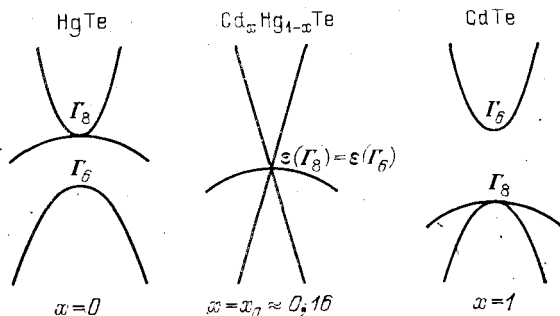


Рис. 7. Схема краев зон системы $Cd_xHg_{1-x}Te$. Для состава $x < x_0$ система — полуметалл, а для $x > x_0$ — полупроводник

следующие: $\varepsilon_g = 1,59$ эВ, $\Delta_0 = 0,95$ эВ, $m_n = 0,09m_0$; для CdSe $\varepsilon_g = 1,83$ эВ, $\Delta_0 = 0,41$ эВ, $m_n = 0,11m_0$.

Теллурид и селенид ртути занимают особое место среди полупроводников типа $A^{II}B^{VI}$. Структура зоны этих соединений подробно изучена во многих работах путем кинетических и оптических исследований. Все экспериментальные факты можно объяснить, если предположить, что эти соединения имеют перевернутую зону по сравнению с соединениями $A^{III}B^V$ и с другими соединениями $A^{II}B^{VI}$. Модель перевернутых зон, предложенная впервые Гроувсом и Подом [24, 25] для серого олова, применительно к этим соединениям означает, что уровень Γ_6 , который соответствует зоне проводимости в соединениях $A^{III}B^V$ и в других соединениях $A^{II}B^{VI}$ типа CdTe, в них лежит ниже уровня Γ_8 .

(рис. 6). Поэтому из-за $k \cdot \hat{p}$ -взаимодействия с уровнем Γ_6 одна из зон Γ_8 (зона легких дырок в CdTe) имеет положительную кривизну и образует зону проводимости, а зона Γ_6 становится зоной легких дырок (зона проводимости в CdTe). При этом спин-орбитально расщепленная дырочная зона остается неизменной (рис. 6). Что касается зоны тяжелых дырок, то ее кривизна не меняется, так как она взаимодействует только с вышележащими зонами. Из рис. 6 видно, что HgTe и HgSe являются бесщелевыми полупроводниками.

Было установлено, что зона проводимости теллурида и селенида ртути непараболична и хорошо описывается моделью Кейна. В двухзонном приближении закон дисперсии зоны проводимости теллурида ртути имеет вид (3.19), в котором под ϵ_g понимается энергетическое расстояние $\epsilon(\Gamma_8) - \epsilon(\Gamma_6) = \epsilon_g$ (см. рис. 6). Значения некоторых параметров зоны теллурида и селенида ртути при комнатной температуре приведены в табл. 3. С уменьшением температуры величина ϵ_g , следовательно и m_n , растёт.

Таблица 3

Некоторые параметры зон HgTe и HgSe при комнатной температуре

Соединение	$\epsilon_g = \epsilon(\Gamma_8) - \epsilon(\Gamma_6)$, эВ	$\Delta_0 = \epsilon(\Gamma_8) - \epsilon(\Gamma_7)$	m_n/m_0	m_1/m_0
HgTe	0,20	0,92	0,017	0,53
HgSe	0,22	0,45	0,019	0,60

Непараболичность зоны проводимости HgTe увеличивается под давлением. Под давлением уровень Γ_8 опускается, а Γ_6 поднимается и в результате $\epsilon_g = \epsilon(\Gamma_8) - \epsilon(\Gamma_6)$ уменьшается, следовательно, непараболичность растёт. Непараболичность зоны можно изменять также изменением состава твердого раствора $Cd_xHg_{1-x}Te$. Если при $x = 0$, т. е. HgTe имеет перевернутую зону, $\epsilon(\Gamma_6) < \epsilon(\Gamma_8)$ по сравнению с составом $x = 1$, т. е. CdTe, для которого $\epsilon(\Gamma_6) > \epsilon(\Gamma_8)$, то тогда с увеличением x энергетическое расстояние ϵ_g должно изменить свой знак и при определенном значении $x = x_0$ пройти через нуль. Действительно, при $x_0 \approx 0,16$ $\epsilon(\Gamma_6) = \epsilon(\Gamma_8)$, т. е. $\epsilon_g = 0$ и зона проводимости и зона легких дырок становятся сильно непараболическими. Это изменение зоны с изменением состава $Cd_xHg_{1-x}Te$ схематически показано на рис. 7.

Таким образом, имеется возможность непрерывно изменять ϵ_g , тем самым изменять степень непараболичности зоны проводимости. В случае сильной непараболичности $\epsilon_g \rightarrow 0$, который имеет место в $Cd_xHg_{1-x}Te$ при $x_0 \approx 0,16$, из (3.22) получаем простейший закон дисперсии зоны проводимости

$$\epsilon = s\hbar k, \quad (3.27)$$

напоминающий спектр ультрарелятивистской частицы.

Как видно из рис. 7, кристалл твердого раствора $Cd_xHg_{1-x}Te$ при $x < 0,16$ является полуметаллом (бесщелевым полупроводником), а при $x > 0,16$ — полупроводником. Следовательно, с изменением состава в $Cd_xHg_{1-x}Te$ при $x = x_0 = 0,16$ осуществляется переход полуметалл — полупроводник. Аналогичные свойства наблюдаются у твердых растворов $Zn_xHg_{1-x}Se$, но переход полуметалл — полупроводник в этом растворе имеет место при составе $x = x_0 = 0,06$.

Бесщелевые полупроводники-полуметаллы и полупроводники с малой шириной запрещенной зоны в последние годы интенсивно изучаются (см. обзоры [30—32]).

5. Структура краев зон халькогенидов свинца $PbTe$, $PbSe$ и PbS ; многодолинная непараболическая модель. Кристалл халькогенидов свинца $PbTe$, $PbSe$ и PbS состоит из двух грациентрированных кубических решеток, сдвинутых относительно друг друга на половину пространственной диагонали куба. В узлах одной грациентрированной кубической решетки находятся атомы Pb , а в узлах другой — атомы Te , Se или S . Зона Бриллюэна имеет такой же вид, как и для структуры алмаза и цинковой обманки (см. рис. 1).

Полупроводники $PbTe$, $PbSe$ и PbS обладают рядом интересных физических свойств. Эти свойства подробно изложены в монографии [33].

Теоретические и экспериментальные исследования показали [33], что зонные структуры халькогенидов свинца $PbTe$, $PbSe$ и PbS подобны: у всех этих материалов минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны находятся в одной и той же точке k -пространства на краю зоны Бриллюэна в направлениях типа [111], т. е. в L -точке.

Изоэнергетические поверхности вблизи экстремальных точек L представляют собой эллипсоиды вращения с осью, направленной вдоль [111], как для зоны проводимости, так и валентной зоны.

Таким образом, зона проводимости и валентная зона халькогенидов свинца являются многоэллипсоидальными — четыре полных эллипсоида в каждой зоне (число долин зоны проводимости и число вершин валентной зоны — восемь). Расположение эллипсоидов такое же, как и в n - Ge (см. рис. 4). Некоторые параметры краев зон $PbTe$, $PbSe$ и PbS приведены в табл. 4, из которой видно, что самый большой коэффициент анизотропии эффективных масс имеет $PbTe$ и он падает почти на порядок при переходе от $PbTe$ к PbS . Электроны проводимости и дырки в PbS имеют почти изотропные эффективные массы.

Обычно при построении теории явлений переноса для халькогенидов свинца используют две модели закона дисперсии. Здесь их рассмотрим в отдельности.

Обобщенная модель Кейна, которая получается обобщением двухзонной модели Кейна [20] для зоны $InSb$ на случай эллипсоидальных изоэнергетических поверхностей.

Уравнение Кейна (3.10) написано около точки Γ -центра зоны Бриллюэна, где изоэнергетические поверхности являются сферами. Это уравнение можно переписать для точки L -края зоны Бриллюэна, около которой изоэнергетические поверхности являются эллипсоидами вращения и взаимодействие зоны проводимости и валентной зоны характеризуется двумя постоянными P_{\perp}

Таблица 4

Некоторые параметры краев зон халькогенидов свинца

Параметры		PbTe	PbSe	PbS
Ширина запрещенной зоны $\varepsilon_g = \varepsilon(L^{\theta'}) - \varepsilon(L^{\theta})$, эВ	при 4,2 К	0,190	0,165	0,286
	при 77 К	0,217	0,176	0,307
	при 300 К	0,32	0,29	0,41
Эффективные массы на дне зоны проводимости и на вершине валентной зоны при 0 К в ед. массы свободного электрона m_0	$m_{\parallel p}$	$0,31 \pm 0,05$	$0,068 \pm 0,015$	$0,105 \pm 0,015$
	$m_{\parallel n}$	$0,24 \pm 0,05$	$0,070 \pm 0,015$	$0,105 \pm 0,015$
	$m_{\perp p}$	$0,022 \pm 0,003$	$0,034 \pm 0,007$	$0,075 \pm 0,01$
	$m_{\perp n}$	$0,024 \pm 0,003$	$0,040 \pm 0,008$	$0,080 \pm 0,01$
Коэффициент анизотропии эффективных масс электронов проводимости $\gamma = m_{\parallel n}/m_{\perp n}$		10	1,8	1,3
Термический коэффициент ширины запрещенной зоны в интервале 77÷300 К, $\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T}$, эВ/гр		$4 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$

и P_{\parallel} . В двухзонном приближении $\Delta_0 \gg \varepsilon_g$ обобщенное уравнение (3.10) будет иметь вид

$$\varepsilon'(\varepsilon' + \varepsilon_g) = 2/3(P_{\perp}^2 k_{\perp}^2 + P_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2), \quad (3.28)$$

где $\varepsilon' = \varepsilon - \hbar^2 k^2 / 2m_0$, \mathbf{k} — волновой вектор, отсчитанный от точки L , m_0 — масса свободного электрона, $\varepsilon_g = \varepsilon(L^{\theta'}) - \varepsilon(L^{\theta})$ — ширина запрещенной зоны (см. левую схему рис. 8). Если пренебречь величинами $\sim 1/m_0$, то (3.28) будет иметь вид

$$\varepsilon(1 + \varepsilon/\varepsilon_g) = \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m_{\perp 0} + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m_{\parallel 0}, \quad (3.29)$$

где

$$1/m_{\perp 0} = 4P_{\perp}^2 / 3\hbar^2 \varepsilon_g, \quad 1/m_{\parallel 0} = 4P_{\parallel}^2 / 3\hbar^2 \varepsilon_g. \quad (3.30)$$

— компоненты эффективной массы электронов и дырок на краях зоны, которые в этом приближении оказываются одинаковыми: $m_{\perp n} = m_{\perp p} = m_{\perp 0}$, $m_{n\parallel} = m_{p\parallel} = m_{\parallel 0}$. Решение квадратного урав-

нения (3.29) дает непараболические и анизотропные законы дисперсии для электронов и дырок

$$\varepsilon = -\varepsilon_g/2 \pm [\varepsilon_g^2/4 + \varepsilon_g(\hbar^2 k_{\perp}^2/2m_{\perp 0} + \hbar^2 k_{\parallel}^2/2m_{\parallel 0})]^{1/2}, \quad (3.31)$$

где знаки \pm относятся к зоне проводимости и валентной зоне соответственно.

Модель Коэна [34], которая предполагает, что поперечная масса значительно меньше массы свободного электрона, а также продольные массы электронов и дырок не зависят от энергии. В этой модели поперечные массы электронов и дырок равны между собой: $m_{\perp n} = m_{\perp p} \equiv m_{\perp 0}$. Для простоты, если дополнительно предположить, что и продольные массы электронов и дырок одинаковы: $m_{\parallel n} = m_{\parallel p} \equiv m_{\parallel 0}$, то тогда вместо (3.29) в случае модели Коэна имеем

$$(\varepsilon - \hbar^2 k_{\parallel}^2/2m_{\parallel 0})(\varepsilon + \varepsilon_g + \hbar^2 k_{\parallel}^2/2m_{\parallel 0}) = \varepsilon_g \hbar^2 k_{\perp}^2/2m_{\perp 0}. \quad (3.32)$$

Решая уравнение (3.32), найдем следующие законы дисперсии для электронов и дырок в рамках упрощенной модели Коэна:

$$\varepsilon = -\varepsilon_g/2 \pm \pm [\varepsilon_g^2/4 + \varepsilon_g(\hbar^2 k_{\perp}^2/2m_{\perp 0} + \hbar^2 k_{\parallel}^2/2m_{\parallel 0}) + (\hbar^2 k_{\parallel}^2/2m_{\parallel 0})^2]^{1/2}. \quad (3.33)$$

Из последней формулы следует, что при малых k , когда $\hbar^2 k_{\parallel}^2/2m_{\parallel 0} \ll \varepsilon_g$, закон дисперсии в модели Коэна (3.33) совпадает с законом дисперсии в модели Кейна (3.31) и изоэнергетические поверхности представляют собой эллипсоиды вращения. С увеличением k эти модели отличаются друг от друга, а изоэнергетические поверхности становятся уже не эллипсоидами, их только приближенно можно представить как эллипсоиды. В модели Коэна коэффициент анизотропии зон $\gamma = m_{\parallel}/m_{\perp}$ с ростом энергии уменьшается, так как m_{\parallel} от энергии не зависит, а m_{\perp} растет с энергией.

Многочисленные исследования показали, что приведенные выше простые модели описывают структуру зоны халькогенидов свинца только приближенно [33]. Модель Кейна лучше всего соответствует структуре зоны PbSe и PbS, а модель Коэна приближенно описывает зону PbTe.

Эти модели зон, как видно из (3.31) и (3.33), характеризуются непараболическим законом дисперсии. Степень непараболичности определяется шириной запрещенной зоны ε_g . Величину ε_g можно менять различными внешними воздействиями. Так, например, под давлением ширина запрещенной зоны халькогенидов свинца уменьшается. В отличие от Ge и Si, а также от полупроводников $A^{III}B^V$, с ростом температуры ширина запрещенной зоны халькогенидов свинца увеличивается (см. табл. 4). Однако ширина запрещенной зоны существенно меняется с частичным изменением состава этих соединений [35—37]. Было показано, что при добавлении SnTe в PbTe ширина запрещенной

зоны последнего уменьшается, причем ϵ_g линейно зависит от состава x в системе $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$. Если предположить, что такая линейная зависимость имеет место для всех $0 \leq x \leq 1$, то величину ширины запрещенной зоны при произвольном значении x можно представить в виде

$$\epsilon_g(x) = |(1-x)\epsilon_g(0) - x\epsilon_g(1)|, \quad (3.34)$$

где: $\epsilon_g(0)$ — ширина запрещенной зоны PbTe , $\epsilon_g(1)$ — ширина запрещенной зоны чистого SnTe . Отметим, что, в отличие от PbTe ,

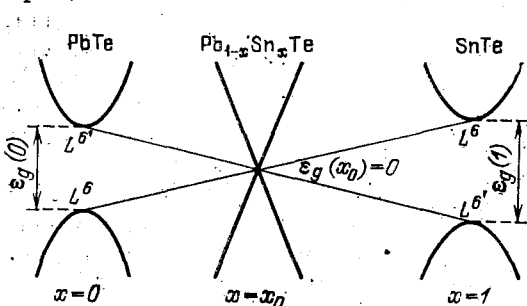


Рис. 8. Схема изменения краев зон системы $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ в зависимости от состава

показано на рис. 8. Используя соответствующие значения $\epsilon_g(0)$ и $\epsilon_g(1)$ при 4,2 К, получим состав $x_0 \approx 0,38$, при котором дно зоны проводимости и вершина валентной зоны совпадают, т. е. исчезает ширина запрещенной зоны. При $x > x_0$ происходит инверсия зон (L^6 становится зоной проводимости, а L^6' — валентной зоной) и они вновь расходятся (см. рис. 8).

Из рис. 8 видно, что для составов $x \rightarrow x_0$ ширина запрещенной зоны $\epsilon_g \rightarrow 0$ и зона проводимости и валентная зона становятся сильно непараболическими. Закон дисперсии этих зон при этом ($\epsilon_g \rightarrow 0$), согласно (3.29) или (3.31), будет иметь анизотропный ультрарелятивистский вид

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \pm \hbar (s_{\perp}^2 k_{\perp}^2 + s_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2)^{1/2}, \quad (3.35)$$

где

$$\begin{aligned} s_{\perp} &= (\epsilon_g/2m_{\perp 0})^{1/2} = \sqrt{2/3} P_{\perp}/\hbar, \\ s_{\parallel} &= (\epsilon_g/2m_{\parallel 0})^{1/2} = \sqrt{2/3} P_{\parallel}/\hbar. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Отметим, что вышеприведенные особенности структуры краев зоны $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ могут иметь место и в аналогичных твердых растворах.

Особенность структуры края валентной зоны PbTe . Исследования температурной зависимости эффекта Холла, термо-э. д. с. и электронной теплопроводности [39—45] в p - PbTe показали, что, в отличие от PbSe и PbS , валентная зона PbTe имеет более

сложную структуру. Край валентной зоны РbTe состоит из двух вершин: зоны легких дырок и зоны тяжелых дырок. В зависимости от температуры относительные расположения верхних краев зоны легких и тяжелых дырок могут меняться. Для объяснения экспериментальных данных, по кинетическим свойствам *p*-РbTe Андреев и Радионов [42] предложили модель изменения края валентной зоны РbTe с температурой. Эта модель показана на рис. 9. При низких температурах зона тяжелых дырок находится ниже, чем край зоны легких дырок, на величину $\Delta\varepsilon \approx \approx 0,17$ эВ. Поэтому при низких температурах и слабых заполнениях играют роль только легкие дырки. С ростом температуры ширина запрещенной зоны ε_g растет, а $\Delta\varepsilon$ уменьшается. Когда

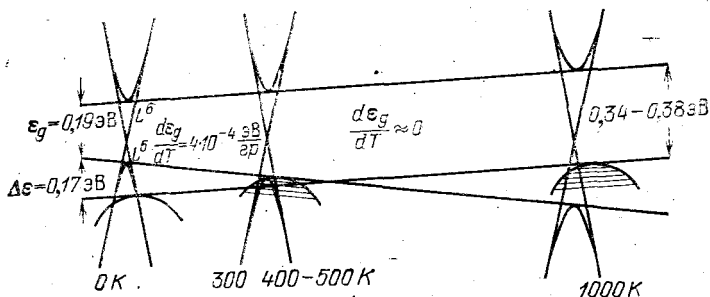


Рис. 9. Изменение положения краев валентных зон и зоны проводимости РbTe с температурой

температура достигает $400 \div 500$ К, $\Delta\varepsilon$ полностью исчезает и высоты зон легких и тяжелых дырок становятся одинаковыми. При таких температурах для интерпретации экспериментов в *p*-РbTe необходимо учитывать оба сорта дырок. Дальнейший рост температуры опускает зону легких дырок еще ниже, а расстояние между зоной проводимости и зоной тяжелых дырок не меняется ($d\varepsilon_g/dT = 0$). Следовательно, при высоких температурах край валентной зоны составляет зона тяжелых дырок, и можно не учитывать роль легких дырок в явлениях переноса.

СТАТИСТИКА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Настоящая глава посвящена статистике носителей заряда в полупроводниках. Знание статистических свойств, в частности распределения носителей заряда в энергетических зонах, и знание связи концентрации свободных носителей тока с уровнем Ферми необходимы при рассмотрении явлений переноса в полупроводниках.

§ 4. Концентрация электронов в зоне проводимости и уровень Ферми. Зависимость эффективной массы от концентрации

Допустим, что в зоне проводимости кристалла объемом V находится N электронов. Кристалл может быть металлом, полуметаллом или полупроводником. Исследуем статистику этого электронного газа в зависимости от закона дисперсии зоны проводимости и от температуры.

1. Функция распределения и критерий вырождения. Как известно, электронный газ подчиняется квантовой статистике Ферми — Дирака, согласно которой среднее число заполнения состояния \mathbf{k} с энергией $\varepsilon(\mathbf{k})$ электронами определяется функцией распределения

$$f_0(\mathbf{k}) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \xi}{k_0 T}\right) \right]^{-1} \quad (4.1)$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия электрона, отсчитанная от дна зоны проводимости, k_0 — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, ξ — уровень Ферми или химический потенциал — свободная энергия в расчете на один электрон. В условиях термодинамического равновесия ξ должен быть постоянен всюду в образце, а его величина и знак определяются температурой, эффективной массой электрона и заданной концентрацией электронного газа, т. е. $\xi = \xi(n, m, T)$, где $n = N/V$ — концентрация электронов проводимости. В зависимости от указанных параметров ξ для электронного газа может принимать значения в интервале $-\infty < \xi < +\infty$.

Поскольку $f_0(\mathbf{k})$ есть среднее число электронов в состоянии \mathbf{k} с энергией $\epsilon(\mathbf{k})$, и электронный газ подчиняется принципу Паули, то $f_0(\epsilon)$ может принимать значения только в интервале $0 \leq f_0(\epsilon) \leq 1$.

При больших отрицательных значениях химического потенциала

$$-\zeta/k_0T > 4 \text{ или } \exp(-\zeta/k_0T) \gg 1 \quad (4.2)$$

из (4.1) следует, что для всех $\epsilon(\mathbf{k}) > 0$ функция $f_0(\epsilon) \ll 1$ и переходит в классическое распределение Больцмана

$$f_0(\mathbf{k}) = \exp\left(\frac{\zeta - \epsilon(\mathbf{k})}{k_0T}\right). \quad (4.3)$$

Электронный газ с химическим потенциалом, удовлетворяющим условию (4.2), называется *невыврожденным*, и, следовательно, (4.2) в общем виде есть критерий того, что электронный газ невырожден.

При больших положительных значениях химического потенциала

$$\zeta/k_0T > 10 \text{ или } \exp(\zeta/k_0T) \gg 1 \quad (4.4)$$

электронный газ называется *сильно вырожденным*. Интервал $-4 < \zeta/k_0T < 10$ составляет промежуточный случай, когда электронный газ находится в частично вырожденном состоянии.

Рассмотрим зависимость $f_0(\epsilon)$ от энергии ϵ для различных значений температуры T при заданном положительном значении химического потенциала $\zeta = \zeta_F$, что соответствует определенному постоянно значению концентрации электронов в зоне проводимости. Из (4.1) следует, что при $T = 0$ для всех значений $\epsilon < \zeta_F$ $f_0(\epsilon) = 1$, а для $\epsilon > \zeta_F$ $f_0(\epsilon) = 0$ (рис. 10), т. е. при абсолютном нуле все состояния в зоне проводимости ниже уровня ζ_F заполнены, а выше — пусты. Значение энергии $\epsilon = \zeta_F$, ниже которого все уровни в зоне проводимости заняты, а выше — все уровни пусты, называется *границей Ферми*.

При конечной температуре $T > 0$, согласно (4.1), $f_0(\epsilon) = 1$ при энергиях $(\epsilon - \zeta_F)/k_0T < -1$, $f_0(\epsilon) = 0$ при $(\epsilon - \zeta_F)/k_0T > 1$ и $f_0(\epsilon) = 1/2$ при $\epsilon = \zeta_F$. В этом случае функция распределения (число заполнения) с ростом энергии плавно переходит от значения $f_0 = 1$ к значению $f_0 = 0$, причем, чем выше температура, тем больше «расплывчатость» этого перехода (рис. 10).

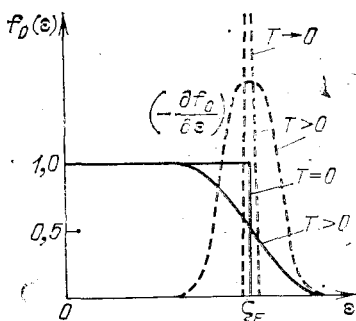


Рис. 10. Функция распределения для вырожденного электронного газа. Штриховой линией показана производная функции распределения (без соблюдения масштаба)

На рис. 10 также показана производная функции $f_0(\epsilon)$. Видно, что при $T > 0$ производная $(-\partial f_0/\partial \epsilon)$ имеет острый симметричный максимум в точке $\epsilon = \zeta_F$. Когда температура приближается к абсолютному нулю, он ведет себя как δ -функция

$$(-\partial f_0/\partial \epsilon)_{T \rightarrow 0} = \delta(\epsilon - \zeta_F). \quad (4.5)$$

Теперь установим явный вид критериев невырождения (4.2) и вырождения (4.4), находя связь между химическим потенциалом, концентрацией, эффективной массой электронов проводимости и температурой. Для этого вычислим равновесную концентрацию электронов в зоне проводимости. Поскольку $f_0(\mathbf{k})$ есть среднее число электронов в \mathbf{k} -состоянии, то полное среднее число электронов в зоне проводимости

$$N = 2 \sum_{\mathbf{k}} f_0(\mathbf{k}), \quad (4.6)$$

где множитель 2 учитывает тот факт, что в одном \mathbf{k} -состоянии могут находиться два электрона с противоположными спинами.

Учитывая (2.15), из (4.6) для концентрации электронов $n = N/V$ получим

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f_0(\mathbf{k}) d\mathbf{k}. \quad (4.7)$$

Как видно из (4.1), $f_0(\mathbf{k})$ от \mathbf{k} зависит через $\epsilon(\mathbf{k})$. Поэтому для вычисления интеграла (4.7) необходимо знать закон дисперсии $\epsilon = \epsilon(\mathbf{k})$ для зоны проводимости. В первой главе мы изложили некоторые основные модели зоны проводимости. Определим концентрацию электронов проводимости для этих моделей.

2. Сферически-симметричные зоны. Рассмотрим зону, в которой изоэнергетическая поверхность представляет собой сферу, но энергия электрона является произвольной функцией величины волнового вектора. В частности, это имеет место в модели Кейна (п. 3 § 3). В этом случае функция f_0 также будет зависеть только от модуля k , так как она зависит от \mathbf{k} через $\epsilon(\mathbf{k})$, и поэтому в (4.7) можно переходить к сферической системе координат в \mathbf{k} -пространстве и легко проинтегрировать по углам. После этого удобно от интегрирования по $d\mathbf{k}$ переходить к интегралу по $d\epsilon$. Тогда получим

$$n = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} f_0(k) k^2 dk = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} f_0(\epsilon) k^2(\epsilon) \frac{dk}{d\epsilon} d\epsilon. \quad (4.8)$$

Из последнего выражения видно, что

$$g(\epsilon) = (1/\pi^2) k^2(\epsilon) dk(\epsilon)/d\epsilon = (1/3\pi^2) dk^3(\epsilon)/d\epsilon \quad (4.9)$$

есть плотность состояний, рассчитанная на единицу объема для произвольной сферически-симметричной зоны.

Интегрируя (4.8) один раз по частям, получим простое выражение для концентрации электронов проводимости в произ-

вольной сферической зоне

$$n = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^{\infty} (-\partial f_0/\partial \varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (4.10)$$

В случае сильного вырождения, согласно (4.5), из (4.10) находим, что электронный газ с концентрацией n при абсолютном нуле заполняет все состояния в k -пространстве внутри сферы с радиусом

$$k(\zeta_F) = (3\pi^2 n)^{1/3}; \quad (4.11)$$

независимо от конкретного вида закона дисперсии для зоны проводимости $k(\zeta_F) \equiv k_F$ носит название *границный радиус Ферми*.

Теперь для некоторых конкретных законов дисперсии зоны проводимости определим связь концентрации носителей заряда с границей Ферми и выпишем явный вид критерия вырождения.

Для простой параболической зоны выражения (3.1) и (4.9) дают следующую функцию плотности состояний:

$$g(\varepsilon) = \frac{(2m_n)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \varepsilon^{1/2}, \quad (4.12)$$

а (3.1) и (4.11) определяют границу Ферми

$$\zeta_F = \frac{\hbar^2}{2m_n} (3\pi^2 n)^{2/3}. \quad (4.13)$$

Тогда критерий полного вырождения электронного газа (4.4) в простой зоне будет иметь явный вид

$$\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3} / 2m_n k_0 T > 10. \quad (4.14)$$

В случае непараболической зоны с законом дисперсии (3.26), полученным в двухзонном приближении Кейна, из (4.9) для плотности состояний получаем выражение

$$g(\varepsilon) = \frac{(2m_n)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \varepsilon^{1/2} \left(1 + \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_g}\right) \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}\right)^{1/2}. \quad (4.15)$$

Граница Ферми в непараболической зоне, согласно (3.22), (3.24) и (4.11), связана с концентрацией электронов проводимости следующим образом:

$$\zeta_F = \frac{\varepsilon_g}{2} \left[\left(1 + \frac{2\hbar^2}{m_n \varepsilon_g} (3\pi^2 n)^{2/3}\right)^{1/2} - 1 \right]. \quad (4.16)$$

При $\varepsilon_g \rightarrow \infty$ (4.16) переходит в (4.13). Если при этом, кроме нулевого члена, который соответствует параболической зоне, оставить и первый член $\sim 1/\varepsilon_g$, то получим

$$\zeta_F = \frac{\hbar^2}{2m_n} (3\pi^2 n)^{2/3} \left[1 - \frac{\hbar^2}{2m_n \varepsilon_g} (3\pi^2 n)^{2/3} \right]. \quad (4.17)$$

Отсюда видно, что учет непараболичности зоны снижает границу Ферми. Это следует и из того, что плотность состояний (4.15) в непараболической зоне больше плотности состояний (4.12) в параболической зоне с эффективной массой m_n , равной эффективной массе на дне непараболической зоны.

В случае сильно непараболической зоны из (3.27) и (4.9) для плотности состояний имеем

$$g(\epsilon) = \epsilon^2 / \pi^2 \hbar^3 s^3, \quad (4.18)$$

а граница Ферми определяется (3.27) и (4.11):

$$\zeta_F = \hbar s (3\pi^2 n)^{1/3}. \quad (4.19)$$

Это выражение также следует из (4.16) при $\epsilon_s \rightarrow 0$, если учесть (3.21).

Сравним границы Ферми для сильно непараболической зоны $\zeta_F(0)$ и параболической зоны $\zeta_F(\infty)$ при одной и той же концентрации. Для этого границы Ферми $\zeta_F(\infty)$ для параболической зоны (4.13) и сильно непараболической (4.19) представим соответственно в виде

$$\zeta_F(\infty) = 2m_n s^2 (n/n_0)^{2/3}; \quad \zeta_F(0) = 2m_n s^2 (n/n_0)^{1/3}, \quad (4.20)$$

где $n_0 = (1/3\pi^2) (2m_n s / \hbar)^3$ — концентрация, при которой уровни Ферми для параболической зоны с эффективной массой m_n и сильно непараболической зоны совпадают, т. е. n_0 определяется из уравнения

$$(\hbar^3 / 2m_n) (3\pi^2 n_0)^{2/3} = \hbar s (3\pi^2 n_0)^{1/3}.$$

Из (4.20) видно, что при $n < n_0$ граничная энергия Ферми в сильно непараболической зоне больше, чем в параболической с эффективной массой m_n : $\zeta_F(0) > \zeta_F(\infty)$; при $n > n_0$, наоборот, уровень Ферми в параболической зоне больше, чем в сильно непараболической зоне: $\zeta_F(\infty) > \zeta_F(0)$. Отметим, что при $m_n = 0,01m_0$ и $s \approx 10^8$ см/с концентрация $n_0 \approx 10^{18}$ см⁻³. Такое поведение уровня Ферми связано с различной зависимостью плотности состояний от энергии в параболической (4.12) и сильно непараболической (4.19) зонах. Таким образом, в зависимости от того, что концентрация n больше или меньше n_0 , вырождение легко снять в параболической или сильно непараболической зоне.

До сих пор на основе (4.10) и (4.5) мы рассматривали электронный газ с заданной концентрацией в зоне проводимости при абсолютном нуле температуры. Предположим, что температура отлична от нуля, но $k_0 T / \zeta \ll 1$, и вычислим концентрацию. Из (4.10) видно, что для этого нужно вычислить интеграл вида

$$\mathcal{J} = \int_0^{\infty} (-\partial f_0 / \partial \epsilon) \varphi(\epsilon) d\epsilon \quad (4.21)$$

в первом исчезающем приближении по параметру $k_0 T / \zeta \ll 1$, где $\varphi(\epsilon)$ — любая дифференцируемая функция энергии.

В нулевом приближении $k_0 T / \zeta_F \rightarrow 0$, т. е. когда электронный газ предельно сильно вырожден, в силу (4.5) $\mathcal{J} = \varphi(\zeta_F)$. Для вычисления \mathcal{J} при конечных температурах воспользуемся свойством $(-\partial f_0 / \partial \varepsilon)$. Из рис. 10 видно, что эта производная имеет максимум при $\varepsilon = \zeta_F$ и в основном отлична от нуля вблизи ζ_F . Поэтому в (4.21) функцию $\varphi(\varepsilon)$ можно разложить в ряд по степеням $(\varepsilon - \zeta)$. Если при этом учтем, что $\int_0^\infty (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) d\varepsilon = f_0(0) - f_0(\infty) = 1$, то получим

$$\mathcal{J} = \varphi(\zeta) + \mathcal{J}_1 \left(\frac{d\varphi}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\zeta} + \frac{1}{2} \mathcal{J}_2 \left(\frac{d^2\varphi}{d\varepsilon^2} \right)_{\varepsilon=\zeta} + \dots, \quad (4.22)$$

где

$$\mathcal{J}_1 = \int_0^\infty (\varepsilon - \zeta) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad \mathcal{J}_2 = \int_0^\infty (\varepsilon - \zeta)^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad (4.23)$$

Введем новую переменную интегрирования $x = (\varepsilon - \zeta) / k_0 T$, заменим нижний предел интегралов $(-\zeta / k_0 T)$ на $-\infty$, так как $\zeta / k_0 T \gg 1$, и учтем, что $(-\partial f_0 / \partial x) = e^x / (e^x + 1)^2$ есть четная функция $e^x / (e^x + 1)^2 = e^{-x} / (e^{-x} + 1)^2$. Тогда соответственно $(-\partial f_0 / \partial x)x$ будет нечетной функцией и $\mathcal{J}_1 = 0$. Для второго интеграла имеем

$$\mathcal{J}_2 = (k_0 T)^2 \int_{-\infty}^\infty x^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) dx = 2 (k_0 T)^2 \int_0^\infty x^2 \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) dx. \quad (4.24)$$

Проинтегрируем один раз по частям и учтем, что $\int_0^\infty (x / (e^x + 1)) dx = \pi^2 / 12$. В результате $\mathcal{J}_2 = (\pi^2 / 3) (k_0 T)^2$. Подставляя значения \mathcal{J}_1 и \mathcal{J}_2 в (4.22), для интеграла вида (4.21) получим выражение, учитывающее температурную поправку к полному вырождению электронного газа:

$$\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varphi(\varepsilon) d\varepsilon = \varphi(\zeta) + \left(\frac{\pi^2}{6} \right) (k_0 T)^2 \left(\frac{d^2\varphi}{d\varepsilon^2} \right)_{\varepsilon=\zeta} + \dots \quad (4.25)$$

Это есть первые два члена асимптотического ряда по степеням температуры.

В случае простой параболической зоны из (4.10), (4.25) и (3.1) для температурной зависимости уровня Ферми в первом приближении по вырождению имеем

$$\zeta(T) = \zeta_F [1 - (\pi^2 / 12) (k_0 T / \zeta_F)^2], \quad (4.26)$$

где ζ_F дается (4.13).

Для сильно непараболической зоны (4.10), (4.25) и (3.17) для этой зависимости дают

$$\zeta(T) = \zeta_F [1 - (\pi^2/3) (k_0 T / \zeta_F)^2]; \quad (4.27)$$

здесь ζ_F определяется (4.19).

Сравнение последних двух формул показывает, что понижение уровня Ферми при данной температуре в сильно непараболической зоне больше, чем в параболической зоне, что связано с более сильной зависимостью плотности состояний от энергии в сильно непараболической зоне [см. формулы (4.18) и (4.12)].

В более общем случае при любой степени вырождения и непараболичности зоны связь между концентрацией и уровнем Ферми дается выражением, полученным подстановкой (3.26) в (4.10):

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) (x + \beta x^2)^{3/2} dx, \quad (4.28)$$

где обозначена переменная интегрирования $x = \epsilon / k_0 T$ и введены параметры: $\beta = k_0 T / \epsilon_g$ — характеризующий непараболичность зоны, $\eta = \zeta_1 / k_0 T$ — приведенный химический потенциал, характеризующий степень вырождения электронного газа [см. (4.2) и (4.4)], $f_0(x, \eta) = [1 + \exp(x - \eta)]^{-1}$ — функция распределения Ферми — Дирака.

Интегралы типа (4.28) нам в дальнейшем понадобятся во многих разделах, и поэтому для них введем единое обозначение

$$I_{n,k}^m(\eta, \beta) = \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \frac{x^m (x + \beta x^2)^n dx}{(1 + 2\beta x)^k}. \quad (4.29)$$

Эти интегралы носят название *обобщенных* или *двухпараметрических интегралов Ферми*.

Обобщенные интегралы Ферми (4.29) со всеми индексами, встречающимися в кинетической теории, были табулированы Завадским, Ковальчуком и Колодзайчаком [1] в широком интервале параметров η и β . В этой же работе были исследованы некоторые асимптотические свойства этих интегралов. Таблицы обобщенных интегралов Ферми в интервалах параметров $-5 \leq \eta \leq 10$ и $0 \leq \beta \leq 1$ приведены в приложении книги [2]. Подробный метод вычисления интегралов типа (4.29) можно найти в книге [3].

В сильно вырожденном случае $\eta > 10$, согласно (4.25), интеграл (4.29) для произвольного значения параметра β можно вычислить приближенно по формуле

$$I_{n,k}^m(\eta > 10, \beta) \approx \frac{\eta^{n+m} (1 + \beta\eta)^n}{(1 + 2\beta\eta)^k} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{6} \left[\frac{(n+m)(n+m-1)}{\eta^2} + \frac{2n(n+m)\beta}{\eta(1+\beta\eta)} - \frac{4k(n+m)\beta}{\eta(1+2\beta\eta)} + \frac{n(n-1)\beta^2}{(1+\beta\eta)^2} - \frac{4nk\beta^2}{(1+2\beta\eta)(1+\beta\eta)} + \frac{4k(k+1)\beta^2}{(1+2\beta\eta)^2} \right] \right\}. \quad (4.30)$$

В двух предельных случаях интегралы $I_{n,k}^m(\eta, \beta)$ выражаются через однопараметрические интегралы Ферми.

1) Параболические зоны $\varepsilon_g \rightarrow \infty$, т. е. $\beta \rightarrow 0$,

$$I_{n,k}^m(\eta, 0) = F_{n+m}(\eta). \quad (4.31)$$

2) Сильно непараболические зоны $\varepsilon_g \rightarrow 0$, т. е. $\beta \rightarrow \infty$,

$$I_{n,k}^m(\eta, \infty) = \frac{1}{2^k} \beta^{n-k} F_{2n+m-k}(\eta), \quad (4.32)$$

где

$$F_r(\eta) = \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^r dx \quad (4.33)$$

есть однопараметрические интегралы Ферми или просто интегралы Ферми.

Интегралы Ферми определяются по-разному: обычно в литературе они определяются как

$$\mathcal{F}_r(\eta) = \int_0^\infty x^r f_0(x, \eta) dx = \int_0^\infty \frac{x^r dx}{1 + e^{x-\eta}}, \quad (4.34)$$

а Блекмор [4] определил их как отношение (4.34) к $\Gamma(r+1)$, где $\Gamma(r)$ — гамма-функция (см. ниже). Однако определение (4.33) является самым удобным по двум причинам: во-первых, при таком определении интегралы Ферми, которые входят во все кинетические коэффициенты для параболической зоны, не имеют отрицательных индексов; самый минимальный индекс есть нуль, для которого, согласно (4.33),

$$F_0(\eta) = [1 + \exp(-\eta)]^{-1}; \quad (4.35)$$

во-вторых, при определении (4.33) формулы для кинетических коэффициентов имеют более компактный вид и эти формулы легко обобщаются на более сложные случаи, где вместо однопараметрических интегралов Ферми входят двух- и трехпараметрические интегралы. Что касается табулирования интегралов (4.33), то отметим, что их таблицы легко получаются из таблиц (3.34), имеющих в литературе, так как они связаны простым соотношением

$$F_r(\eta) = r \mathcal{F}_{r-1}(\eta). \quad (4.36)$$

Приведем асимптотику интегралов Ферми в двух предельных случаях. Для сильно вырожденного газа, когда $\eta > 10$, применяя (4.25), для (4.33) получим

$$F_r(\eta)_r = \eta^r \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \frac{r(r-1)}{\eta^2} \right]. \quad (4.37)$$

В случае невырожденного электронного газа, когда $e^{-\eta} \gg 1$, т. е. $\eta < -4$, из (4.33) непосредственно следует

$$F_r(\eta) = \Gamma(r+1) \exp(\eta), \quad (4.38)$$

где

$$\Gamma(r) = \int_0^{\infty} x^{r-1} e^{-x} dx \quad (4.39)$$

— интеграл Эйлера первого рода или гамма-функция. Укажем некоторые свойства гамма-функции, которые в дальнейшем нам понадобятся:

$$\Gamma(r+1) = r\Gamma(r) \quad (4.40)$$

при любом r ,

$$\Gamma(r) = (r-1)! \quad (4.41)$$

при r целом и положительном и

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}. \quad (4.42)$$

Из (4.28) и (4.29) получим связь между концентрацией и приведенным уровнем Ферми для общего непараболического случая в неявном виде

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} I_{3/2,0}^0(\eta, \beta). \quad (4.43)$$

Отсюда, в силу (4.30), в случае сильного вырождения можно получить (4.16).

Для параболической зоны (4.43), согласно (4.31), дает

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\eta), \quad (4.44)$$

а для сильно непараболической зоны из (4.43) и (4.32) с учетом (3.21) получим

$$n = \frac{(k_0 T)^3}{3\pi^2 \hbar^3 s^3} F_3(\eta). \quad (4.45)$$

В случае сильного вырождения (4.44) и (4.45) с учетом (4.37) соответственно переходят в (4.13) и (4.19). Когда электронный газ невырожден, то, согласно (4.38), для параболической зоны из (4.44) имеем

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} \exp(\eta) = N_n \exp(\eta), \quad (4.46)$$

а для сильно непараболической зоны из (4.45) получим

$$n = \frac{2(k_0 T)^3}{\pi^2 \hbar^3 s^3} \exp(\eta). \quad (4.47)$$

Отметим, что в сильно непараболической зоне при $T = 100$ К вырождение отсутствует, т. е. $e^{\eta} \ll 1$, если $n \ll 5 \cdot 10^{15}$ см⁻³, тогда

как в параболической зоне с эффективной массой $m_n = 0,1m_0$ при такой же температуре вырождение отсутствует, когда $n \ll 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Это связано с поведением плотности состояний: при малых значениях энергии ϵ плотность состояний в параболической зоне больше, чем плотность состояний в сильно непараболической зоне, так как в первом случае $g(\epsilon) \sim \epsilon^{1/2}$, а во втором $g(\epsilon) \sim \epsilon^2$. Из сравнения (4.12) и (4.18) следует, что плотность состояний в параболической зоне будет сравнима и больше плотности состояний в сильно непараболической зоне только при энергиях $\epsilon \gtrsim 2m_n s^2$.

3. Многодолинные зоны; эллипсоидальные изоэнергетические поверхности; эффективная масса плотности состояний. В предыдущей главе мы увидели, что во многих полупроводниках зона проводимости имеет не один минимум в центре зоны Бриллюэна, а обладает несколькими минимумами, расположенными в других симметричных точках k -пространства. Вблизи каждой из этих экстремальных точек изоэнергетические поверхности являются эллипсоидами. В общем виде эти изоэнергетические поверхности можно описать уравнением дисперсии

$$A(\epsilon) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_1} + \frac{k_y^2}{m_2} + \frac{k_z^2}{m_3} \right), \quad (4.48)$$

написанным в главных осях эллипсоида, где \mathbf{k} — волновой вектор, отсчитанный от экстремальной точки, m_i — компоненты эффективной массы на дне зоны, $A(\epsilon)$ — произвольная функция энергии.

Если (4.7) умножим на число долин N_0 , то получим полную концентрацию в зоне проводимости

$$n = \frac{2N_0}{(2\pi)^3} \int f_0(\mathbf{k}) d\mathbf{k}. \quad (4.49)$$

Для вычисления этого интеграла от k -пространства перейдем в k' -пространство преобразованием

$$k_x = \sqrt{v_1} k'_x, \quad k_y = \sqrt{v_2} k'_y, \quad k_z = \sqrt{v_3} k'_z, \quad (4.50)$$

где $v_i = m_i/m_0$, m_0 — величина размерности массы. Тогда (4.48) примет вид

$$A(\epsilon) = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_0}, \quad (4.51)$$

а концентрация

$$n = \frac{2N_0 (v_1 v_2 v_3)^{1/2}}{(2\pi)^3} \int f_0(\mathbf{k}') d\mathbf{k}'. \quad (4.52)$$

Из (4.51) видно, что в k' -пространстве изоэнергетические поверхности сферически-симметричны. Поэтому в (4.52) можно переходить к сферической системе координат в k' -пространстве и интегрировать по углам. После этого в силу (4.51), переходя от

интеграла по dk' к интегралу по $d\varepsilon$, получим

$$n = \frac{N_0 (v_1 v_2 v_3)^{1/2}}{\pi^2} \int_0^\infty f_0(k') k'^2 dk' =$$

$$= \frac{N_0 (v_1 v_2 v_3)^{1/2}}{\pi^2} \int f_0(\varepsilon) k'^2(\varepsilon) \left(\frac{dk'}{d\varepsilon}\right) d\varepsilon. \quad (4.53)$$

Следовательно, для функции плотности состояний в этом случае имеем

$$g(\varepsilon) = \frac{N_0 (v_1 v_2 v_3)^{1/2}}{\pi^2} k'^2(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon)}{d\varepsilon}, \quad (4.54)$$

где

$$k'(\varepsilon) = (2m_0)^{1/2} \hbar^{-1} \sqrt{A(\varepsilon)}. \quad (4.55)$$

Рассмотрим теперь конкретную эллипсоидальную непараболическую модель Кейна (3.39), в которой $m_1 = m_2 \equiv m_\perp$, $m_3 \equiv m_\parallel$ и, следовательно,

$$v_1 = v_2 \equiv v_\perp = \frac{m_{\perp 0}}{m_0}, \quad v_3 \equiv v_\parallel = \frac{m_{\parallel 0}}{m_0} \text{ и } A(\varepsilon) = \varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}\right). \quad (4.56)$$

Тогда (4.54) дает

$$g(\varepsilon) = \frac{N_0 (2m_{\perp 0}^2 m_{\parallel 0})^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \varepsilon^{1/2} \left(1 + \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_g}\right) \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}\right)^{1/2}. \quad (4.57)$$

Заметим, что если в (4.15) m_n заменить величиной m_{d_0} , т. е.

$$m_n \rightarrow m_{d_0} \equiv N_0^{2/3} (m_{\perp 0}^2 m_{\parallel 0})^{1/3}, \quad (4.58)$$

то функции (4.15) и (4.57) совпадают. Величина m_{d_0} носит название *эффективной массы плотности состояний* на дне зоны проводимости.

Таким образом, все формулы, полученные в п. 2 настоящего параграфа для полупроводников со сферической изоэнергетической поверхностью, применимы для полупроводников с эллипсоидальной поверхностью, если в них m_n заменить на m_{d_0} (4.58). Причем для n -Ge и n -Si это надо сделать в формулах для параболической зоны, полученных на основе функции (4.12) с учетом числа полных эллипсоидов в зоне проводимости для n -германия $N_0 = 4$, а для n -кремния $N_0 = 6$. Для полупроводников RbTe, PbSe и PbS n -типа замену $m_n \rightarrow m_{d_0}$ следует сделать в формулах для непараболической зоны с учетом $N_0 = 4$.

В заключение отметим, что в модели Коэна (3.40) изоэнергетические поверхности не являются эллипсоидами, и поэтому замена $m_n \rightarrow m_{d_0}$ для этой модели неприменима. Плотность состояний в модели Коэна (3.40) определяется выражением

$$g(\varepsilon) = \frac{(2m_{d_0})^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \varepsilon^{1/2} \left(1 + \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_g}\right), \quad (4.59)$$

а концентрация носителей заряда в силу (4.10) и (4.59) связана

с уровнем Ферми следующим образом:

$$n = \frac{(2m_{d0} k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \left[F_{3/2}(\eta) + \frac{6}{5} \beta F_{5/2}(\eta) \right], \quad (4.60)$$

где m_{d0} дается (4.58), $\eta = \zeta/k_0 T$, $\beta = k_0 T/\varepsilon_g$ и интеграл Ферми определяется (4.33).

4. Зависимость эффективной массы от концентрации и от энергии. Эффективная масса $m(\varepsilon)$, определенная формулой (1.12), не зависит от энергии только в том случае, когда закон дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ параболический. При непараболическом законе дисперсии m зависит от энергии $\varepsilon(\mathbf{k})$ или от концентрации носителей тока, что можно выявить, определив эффективную массу на границе Ферми в сильно вырожденных полупроводниковых образцах с различными концентрациями электронов проводимости.

Закон дисперсии (3.24а), полученный из уравнения Кейна (3.10) в приближении $\varepsilon' \ll \varepsilon_g + \frac{2}{3}\Delta_0$, с учетом (3.18) принимает вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 + \frac{2}{\varepsilon_g} \left(\frac{1}{m_n} - \frac{1}{m_0} \right) \hbar^2 k^2 \right]^{1/2} - \frac{\varepsilon_g}{2}. \quad (4.61)$$

Тогда, согласно (1.12), для зависимости m от k получим выражение

$$\frac{1}{m(k)} = \frac{1}{m_0} + \frac{\left(\frac{1}{m_n} - \frac{1}{m_0} \right)}{\left[1 + \left(\frac{2}{\varepsilon_g} \right) \left(\frac{1}{m_n} - \frac{1}{m_0} \right) \hbar^2 k^2 \right]^{1/2}}, \quad (4.62)$$

где m_n — эффективная масса на дне зоны проводимости.

Если полупроводник сильно вырожден, то из (4.11) и (4.62) получим зависимость эффективной массы на границе Ферми от концентрации электронов проводимости n :

$$\frac{m(n)/m_0}{1 - m(n)/m_0} = \frac{m_n/m_0}{1 - m_n/m_0} \left[1 + \frac{2\hbar^2}{\varepsilon_g m_n} \left(1 - \frac{m_n}{m_0} \right) (3\pi^2 n)^{2/3} \right]^{1/2}. \quad (4.63)$$

Отсюда видно, что если определить из опыта $m(n)$ и n независимыми методами и построить зависимость $\left[\frac{m(n)/m_0}{1 - m(n)/m_0} \right]$ от $n^{2/3}$, то должна получиться прямая линия. По наклону этой прямой можно оценить ε_g или m_n . Получение такой зависимости было бы доказательством правильности модели Кейна для зоны проводимости данного полупроводника.

Для полупроводников, у которых $m_n \ll m_0$, таких как InSb, из (4.63) получим простую зависимость эффективной массы от концентрации

$$m(n) = m_n \left[1 + (2\hbar^2/m_n \varepsilon_g) (3\pi^2 n)^{2/3} \right]^{1/2}. \quad (4.64)$$

Как видно из графика, приведенного в работе [5] для антимо-нида индия, эта зависимость довольно существенна: при росте концентрации от 10^{18} до $5 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$ эффективная масса растёт почти в четыре раза.

Исследования зависимости эффективной массы от концентрации кинетическим и оптическим методами были проведены для многих полупроводников типа $A^{III}B^V$ и $A^{IV}B^{VI}$. Результаты этих работ, обобщенные в обзоре Завадского [6], показывают, что двухзонная модель Кейна хорошо описывает зону проводимости этих полупроводников, если концентрация электронов проводимости не слишком большая ($n < 10^{19}$ см $^{-3}$); для эффективной массы эксперимент даёт больше, чем двухзонная модель Кейна (4.63). Учет влияния вышележащих зон на эффективную массу [7] уменьшает различие между экспериментом и теорией Кейна в InSb, а в InAs, хотя согласие теории с экспериментом улучшается, это различие остается и при учете вышележащих зон [8].

В случае сильно непараболической зоны с линейным законом дисперсии (3.27) зависимость эффективной массы от k и, следовательно, в силу (4.11), зависимость m от концентрации n имеют простой вид

$$m(k) = \hbar k/s, \quad m(n) = (\hbar/s) (3\pi^2 n)^{1/3}. \quad (4.65)$$

Видно, что зависимость m от $n^{1/3}$ должна быть прямой, проходящей через начало координат. Наклон этой прямой непосредственно определяет параметр s , следовательно, и матричный элемент P в (3.17). Линейная зависимость m от $n^{1/3}$ при комнатной температуре была получена в работе [9] для раствора $Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te$.

Отметим, что (4.65) также следует из (4.64) при $\epsilon_g \rightarrow 0$, если учесть (3.21).

В том случае, когда электронный газ не является полностью вырожденным, т. е. когда $-\infty < \xi/k_0 T < 4$, из эксперимента определяется некоторое среднее значение $m(\epsilon)$. Это среднее можно оценить следующим образом:

$$\overline{m(\epsilon)} = \frac{1}{n} \int_0^{\infty} m(\epsilon) g(\epsilon) f_0(\epsilon, \eta) d\epsilon \quad \text{при} \quad \frac{\xi}{k_0 T} < 4, \quad (4.66)$$

где $g(\epsilon)$ — плотность состояний, $f_0(\epsilon, \eta)$ — функция распределения (4.1), а интеграл нужно вычислить при значении химического потенциала ξ , найденного из равенства для заданной концентрации электрона проводимости

$$n = \int_0^{\infty} g(\epsilon) f_0(\epsilon, \xi) d\epsilon. \quad (4.67)$$

Функцию $m(\epsilon)$ в двухзонной модели Кейна можно получить, если из (4.61) определить $k = k(\epsilon)$ и подставить в (4.62). По-

сколько эта функция будет иметь довольно громоздкий вид, то мы сделаем это в предположении $m_n \ll m_0$. В результате имеем простую зависимость эффективной массы от энергии

$$m(\varepsilon) = m_n(1 + 2\varepsilon/\varepsilon_g). \quad (4.68)$$

В этом случае подстановка (4.68) в (4.66) дает

$$\overline{m(\varepsilon)} = m_n(1 + 2\overline{\varepsilon}/\varepsilon_g), \quad (4.69)$$

где ε определяется из

$$\varepsilon = \frac{1}{n} \int_0^{\infty} \varepsilon g(\varepsilon) f_0(\varepsilon, \zeta) d\varepsilon \quad (4.70)$$

с учетом (4.67).

Для эллипсоидальной непараболической двухзонной модели Кейна (см. п. 5 § 3), применяемой к зоне проводимости и валентной зоне халькогенидов свинца, из (3.38) следует одинаковая зависимость компонент эффективной массы

$$1/m_{\perp} = (1/\hbar^2 k_{\perp}) \partial\varepsilon/\partial k_{\perp} \quad \text{и} \quad 1/m_{\parallel} = (1/\hbar^2 k_{\parallel}) \partial\varepsilon/\partial k_{\parallel} \quad (4.71)$$

от энергии ε , а именно

$$m_{\perp} = m_{\perp 0}(1 + 2\varepsilon/\varepsilon_g) \quad \text{и} \quad m_{\parallel} = m_{\parallel 0}(1 + 2\varepsilon/\varepsilon_g). \quad (4.72)$$

В сильно вырожденных полупроводниках PbSe, PbTe и PbS измеряется обычно эффективная масса плотности состояний

$$m_d = (N_0^2 m_{\perp}^2 m_{\parallel})^{1/3} \quad (4.73)$$

на границе Ферми ζ_F :

$$m_d(\zeta_F) = m_{d0}(1 + 2\zeta_F/\varepsilon_g), \quad (4.74)$$

где m_{d0} дается (4.58).

Подставляя (4.16) в (4.74) и учитывая (4.58), в двухзонной модели Кейна для зависимости эффективной массы плотности состояний от концентрации получаем выражение

$$m_d(n) = m_{d0} [1 + (2\hbar^2/m_{d0}\varepsilon_g)(3\pi^2 n)^{2/3}]^{1/2}. \quad (4.75)$$

Экспериментальные результаты по зависимости m_d от концентрации в халькогенидах свинца, как видно из графика, приведенного в [6], хорошо согласуются с (4.75). Это свидетельствует о применимости двухзонной модели Кейна к зонам халькогенидов свинца.

Таким образом, исследования зависимости эффективной массы от концентрации позволяют делать вывод о непараболическости зоны и определить модель, соответствующую зоне данного полупроводника.

§ 5. Статистика носителей заряда в собственных полупроводниках и полуметаллах

Рассмотрим идеальный беспримесный полупроводниковый кристалл. При абсолютном нуле температуры он находится в основном — непроводящем состоянии, т. е. валентная зона заполнена электронами полностью, а зона проводимости совершенно пуста. Когда температура отлична от нуля, часть электронов переходит из валентной зоны в зону проводимости и кристалл приобретает свойство проводимости. В этом — возбужденном — состоянии в зоне проводимости имеются свободные электроны с соответствующей данной температуре концентрацией n , а в валентной зоне — свободные дырки с концентрацией p .

В предыдущем параграфе мы установили связь между концентрацией электронов в зоне проводимости n с уровнем Ферми или химическим потенциалом, температурой и параметрами зоны [см. (4.43) или (4.44)]. Для того чтобы найти явный вид температурной зависимости концентрации, необходимо знать химический потенциал как функцию температуры и параметров зоны $\zeta = \zeta(T, m_n, \varepsilon_g)$. Эту функцию можно определить из какого-нибудь уравнения или физического условия. Этим условием может быть *условие нейтральности* кристалла, которое в случае собственных полупроводников и полуметаллов гласит: число свободных электронов в зоне проводимости равно числу дырок в валентной зоне:

$$n(T, \zeta) = p(T, \zeta). \quad (5.1)$$

Явный вид левой части этого уравнения в различных случаях мы нашли в § 4. Теперь найдем концентрацию дырок $p(T, \zeta)$. Для этого прежде всего определим функцию распределения для дырок. Поскольку $f_0(\varepsilon)$ есть вероятность того, что уровень с энергией ε занят электроном, то $f_{0p}(\varepsilon) = 1 - f_0(\varepsilon)$ определяет вероятность того, что уровень с энергией ε свободен от электрона, т. е. вероятность наличия дырки на этом уровне. Таким образом, функция распределения дырок имеет вид

$$f_{0p}(\varepsilon) = 1 - f_0(\varepsilon) = [1 + \exp((\zeta - \varepsilon)/k_0 T)]^{-1}. \quad (5.2)$$

Если энергию отсчитываем от дна зоны проводимости вверх, то энергию в валентной зоне можно представить в виде

$$\varepsilon = -\varepsilon_g - \varepsilon', \quad (5.3)$$

где ε' — энергия, отсчитанная от потолка валентной зоны [см. рис. 3 и формулу (3.2)]. Подставляя (5.3) в (5.2) и вводя химический потенциал для дырок

$$\zeta_p = -\varepsilon_g - \zeta, \quad (5.4)$$

увидим, что функция распределения дырок в валентной зоне имеет такой же вид, что и функция распределения электронов

в зоне проводимости:

$$f_{0p}(\varepsilon') = [1 + \exp(\varepsilon' - \zeta_p)/k_0T)]^{-1}, \quad (5.5)$$

где ε и ζ заменены ε' и ζ_p соответственно.

Тогда, очевидно, для получения выражения концентрации дырок $p(T, \zeta)$ достаточно в выражениях $n(T, \zeta)$ заменить m_n и ζ на m_p и ζ_p соответственно. Например, концентрация дырок в параболической валентной зоне при любой степени вырождения будет иметь вид

$$p = \frac{(2m_p k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\eta_p), \quad \eta_p = \frac{\zeta_p}{k_0 T}, \quad (5.6)$$

аналогичный (4.44).

Критерием отсутствия вырождения дырочного газа является неравенство

$$\exp(\eta_p) \ll 1 \quad \text{или} \quad (\varepsilon_g + \zeta)/k_0 T > 4. \quad (5.7)$$

Тогда в этом случае (5.6), в силу (4.38), примет вид, аналогичный (4.46):

$$p = \frac{(2m_p k_0 T)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} \exp(\eta_p) = N_p \exp(\eta_p). \quad (5.8)$$

Теперь распишем уравнение нейтральности (5.1) для некоторых моделей зоны и определим температурную зависимость концентрации электронов и дырок.

1. Собственные полупроводники с запрещенной зоной конечной ширины. Вначале рассмотрим собственный полупроводник со стандартной зоной, изображенный на рис. 2, с законом дисперсии (3.1) и (3.2). Уравнение нейтральности (5.1) в этом случае, согласно (4.4) и (5.6), имеет вид

$$m_n^{3/2} F_{3/2}(\eta) = m_p^{3/2} F_{3/2}(-\eta - \varepsilon_g^*), \quad (5.9)$$

где $\varepsilon_g^* = \frac{\varepsilon_g}{k_0 T}$. Это уравнение можно решить только численно.

Однако обычно электронный и дырочный газы в таких полупроводниках бывают невырожденными. Тогда, в силу (4.38), уравнение (5.9) для определения химического потенциала имеет простую форму

$$m_n^{3/2} \exp(\eta) = m_p^{3/2} \exp(-\varepsilon_g^* - \eta). \quad (5.10)$$

Отсюда получим

$$\zeta = -\varepsilon_g/2 + \frac{3}{4} k_0 T \ln(m_p/m_n). \quad (5.11)$$

Видно, что при абсолютном нуле уровень химического потенциала, как и следовало ожидать, проходит посередине запрещенной зоны. С ростом температуры уровень ζ от середины ε_g отклоняется вверх или вниз в зависимости от соотношения масс. Обычно в полупроводниках $m_n < m_p$, и поэтому уровень химического потенциала с ростом температуры приближается к дну

зоны проводимости. При $m_n = m_p$ уровень Ферми ξ от температуры не зависит, если не учесть зависимость ε_g от T .

Подставляя (5.11) в (4.46) и (5.8), получим концентрацию электронов проводимости и дырок в собственном полупроводнике со стандартной зоной:

$$n_i = p_i = \frac{(2 \sqrt{m_n m_p} k_0 T)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} \exp\left(-\frac{\varepsilon_g}{2k_0 T}\right). \quad (5.12)$$

Исследуя экспериментально температурную зависимость концентрации в собственных полупроводниках и сравнивая ее с экспоненциальной зависимостью (5.12), можно найти термическую ширину запрещенной зоны.

Как следует из (5.11), приближение (5.10), т. е. предположение о том, что электроны и дырки невырождены, законно, когда эффективные массы m_n и m_p отличаются не очень сильно и ширина запрещенной зоны ε_g не очень мала. В этом случае, когда $m_n \ll m_p$ и ε_g достаточно мала, электронный газ нельзя считать невырожденным, он будет частично вырожденным, а дырочный газ можно считать невырожденным. Тогда уровень химического потенциала, согласно (5.9) и (4.38), нужно численно определить из уравнения

$$(m_n/m_p)^{3/2} F_{3/2}(\eta) = (3 \sqrt{\pi}/4) \exp(-\eta - \varepsilon_g^*). \quad (5.9a)$$

В § 3 мы видели, что валентная зона многих полупроводников, таких как Ge, Si и CdTe, и полупроводников типа $A^{III}B^V$ имеет сложную форму. В частности, в точке k смыкаются две дырочные зоны, поэтому при конечных температурах в таких полупроводниках имеется два типа дырок: тяжелые и легкие дырки. Рассмотрим статистику носителей заряда в собственных полупроводниках с двумя типами дырок. В этом случае условие нейтральности будет иметь вид

$$n = p_1 + p_2, \quad (5.13)$$

где p_1 и p_2 — концентрации тяжелых и легких дырок соответственно. Подставляя соответствующие выражения в невырожденном случае, из (5.13) имеем

$$m_n^{3/2} \exp(\eta) = (m_{p_1}^{3/2} + m_{p_2}^{3/2}) \exp(-\eta - \varepsilon_g^*), \quad (5.14)$$

m_{p_1} — эффективная масса тяжелых дырок, m_{p_2} — масса легких дырок. Из (5.14) получим

$$\xi = -\frac{\varepsilon_g}{2} + \frac{3}{4} k_0 T \ln\left(\frac{m_{p_1}}{m_n}\right) + \frac{1}{2} k_0 T \ln\left[1 + \left(\frac{m_{p_2}}{m_{p_1}}\right)^{3/2}\right]. \quad (5.15)$$

Из (4.46) и (5.15) для концентрации электронов в собственном невырожденном полупроводнике имеем

$$n = \frac{(2 \sqrt{m_n m_{p_1}} k_0 T)^{3/2}}{4\pi^{3/2} \hbar^3} \left[1 + \left(\frac{m_{p_2}}{m_{p_1}} \right)^{3/2} \right]^{1/2} \exp \left(-\frac{\varepsilon_g}{2k_0 T} \right). \quad (5.16)$$

В случае Ge и Si во всех формулах (5.14)–(5.16) вместо m_n входит эффективная масса плотности состояний $m_d = (N_0^2 m_{\perp}^2 m_{\parallel})^{1/3}$. Соотношения

$$p_1 + p_2 = n, \quad p_2/p_1 = (m_{p_2}/m_{p_1})^{3/2} \quad (5.17)$$

и (5.16) позволяют определить p_1 и p_2 в отдельности.

2. **Собственные полупроводники с нулевой запрещенной зоной** — бесщелевые полупроводники (БП), к таким полупроводникам относятся HgTe, HgSe (рис. 6), $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ при $x < 0,16$ (рис. 7) и $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ при $x = x_0$ (рис. 8). При $T = 0$ К в собственных БП носители заряда отсутствуют и уровень Ферми проходит через точку касания зон. При любых конечных температурах в них появляются носители заряда, а температурные зависимости концентрации и уровня Ферми определяются конкретной моделью соприкасающихся зон, поэтому, исследуя зависимость $n = n(T)$ в чистых БП, можно судить о применимости той или другой модели. Рассмотрим некоторые известные модели зон БП. Допустим, что зона проводимости и валентная зона, края которых касаются в одной точке зоны Бриллюэна, параболически с эффективными массами m_n и m_p . Тогда условие нейтральности при любой температуре будет иметь вид

$$m_n^{3/2} F_{3/2}(\eta) = m_p^{3/2} F_{3/2}(-\eta). \quad (5.18)$$

Поскольку $F_{3/2}(\eta)$ является монотонной функцией η , то из (5.18) следует, что при $m_n < m_p$ корень этого уравнения $\eta = \eta_0 > 0$, при $m_n > m_p$ $\eta_0 < 0$, а при $m_n = m_p$ $\eta_0 = 0$. Общим является то, что при любом значении отношения m_n/m_p решение (5.18) $\eta = \eta_0$ от температуры не зависит, т. е. уровень Ферми $\zeta = k_0 T \eta_0$ независимо от значения эффективных масс всегда пропорционален T . Тогда, подставляя $\eta = \eta_0 = \text{const}$ в (4.44), для температурной зависимости концентрации получим

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\eta_0) \sim T^{3/2}. \quad (5.19)$$

В чистых БП закон $n \sim T^{3/2}$ наблюдается в довольно широкой области температур [10–13].

В случае, когда $m_n \ll m_p$, что имеет место в HgTe и HgSe, в БП электронный газ можно считать сильно вырожденным, а дырочный — невырожденным, и приближенно можно найти решение (5.18) $\eta = \eta_0$. Тогда для левой части (5.18) можно применять асимптотику (4.37), а для правой — (4.38). В резуль-

тате для приведенного уровня Ферми получим

$$\eta_0 = \ln [(3\sqrt{\pi}/4) (m_p/m_n)^{3/2}] - (3/2) \ln \eta_0 \quad (5.20)$$

или с логарифмической точностью при $m_p \gg m_n$ имеем

$$\eta_0 \approx \ln [(3\sqrt{\pi}/4) (m_p/m_n)^{3/2}]. \quad (5.21)$$

Следует отметить, что независимость η от температуры и, следовательно, закон $n \sim T^{3/2}$ связаны с параболичностью зоны проводимости и валентной зоны в БП. Теперь рассмотрим случаи, когда закон $n \sim T^{3/2}$ может нарушаться.

а) Зависимость $n \sim T^{3/2}$ может наблюдаться в α -Sn только при низких температурах, пока в L -минимуме зоны проводимости α -Sn не появляются электроны.

При более высоких температурах, когда и в L -минимуме появляются электроны, в α -Sn приведенный уровень Ферми должен определяться из условия $n_1 + n_2 = p$, где n_1 — концентрация электронов в Γ -минимуме, а n_2 — в L -минимуме. В явном виде это условие пишется следующим образом:

$$m_n^{3/2} F_{3/2}(\eta) + m_d^{3/2} F_{3/2}(\eta - \Delta\epsilon^*) = m_p^{3/2} F_{3/2}(-\eta), \quad (5.22)$$

где m_d — эффективная масса плотности состояний в L -минимуме, $\Delta\epsilon^* = \Delta\epsilon/k_0T$, $\Delta\epsilon = 0,08$ эВ — разность энергии между L - и Γ -минимумами. Подставляя численное решение (5.22) при различных температурах в выражение типа (4.44), получим температурную зависимость концентрации. В области достаточно высоких температур эта зависимость должна быть скорее экспоненциальной, чем степенной.

б) Отклонение от закона $n \sim T^{3/2}$ может наблюдаться, если одна из зон, скажем, зона проводимости, как в HgTe и HgSe, непараболична. В этом случае, в силу (4.43), η нужно определить из уравнения

$$m_n^{3/2} I_{3/2,0}^0(\eta, \beta) = m_p^{3/2} F_{3/2}(-\eta), \quad (5.23)$$

где m_n — эффективная масса электрона на дне зоны проводимости, $\beta = k_0T/\epsilon_g$, ϵ_g — энергетическое расстояние между дном зоны проводимости и потолком зоны легких дырок (рис. 6). Очевидно, численное решение уравнения (5.23) за счет параметра β будет зависеть от температуры, и, следовательно, зависимость n от T должна отличаться от закона $n \sim T^{3/2}$. Это отличие особенно заметно, когда зона проводимости в БП сильно непараболична, как это имеет место в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с составом $x = 0,16$ (см. рис. 7). Если пренебречь легкими дырками, то уравнение нейтральности в этом случае, согласно (4.45) и (5.6), будет иметь вид

$$[(k_0T)^{3/2}/s^3] F_s(\eta) = (2m_p)^{3/2} F_{s/2}(-\eta). \quad (5.24)$$

В предположении о сильном вырождении электронов в зоне проводимости и невырождении дырок, в силу (4.37) и (4.38), из

приведенного уровня Ферми получим

$$\eta = \ln \left[\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4} \right) \left(\frac{2m_p s^2}{k_0 T} \right)^{3/2} \right]. \quad (5.25)$$

Подстановка (5.25) в (4.45) с учетом (4.37) для температурной зависимости концентрации электронов проводимости дает

$$n = \frac{(k_0 T)^3}{3\pi^2 \hbar^3 s^3} \ln^3 \left[\frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{2m_p s^2}{k_0 T} \right)^{3/2} \right]. \quad (5.26)$$

Видно, что в этом случае зависимость n от T чуть слабее, чем $n \sim T^3$.

в) Предельным в смысле отступления от закона $n \sim T^{3/2}$ является случай, когда обе зоны сильно непараболически, что имеет место в $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ определенного состава (рис. 8). Условие нейтральности $n = p$, согласно (4.45), сводится к уравнению $F_3(\eta) = F_3(-\eta)$, решение которого есть $\eta = 0$, т. е. уровень Ферми при любой температуре проходит через точку касания зон. Следовательно, если учтем, что $F_3(0) = 5,4$ (см. таблицы в [2]), то из (4.45) имеем

$$n = 5,4 \cdot (k_0 T)^3 / 3\pi^2 \hbar^3 s^3 \sim T^3. \quad (5.27)$$

Таким образом, в зависимости от законов дисперсии соприкасающихся зон в БП концентрация носителей заряда от температуры может изменяться по-разному: $n \sim T^{3/2}$, когда обе зоны параболически, и $n \sim T^3$, когда обе зоны сильно непараболически. БП, у которых только одна из зон непараболическа, составляют промежуточный случай. Видно, что исследования зависимости n от T дают возможность судить о структуре краев зон в бесцелевых полупроводниках.

3. Полуметаллы. В предыдущих пунктах мы рассмотрели полупроводники с конечной и нулевой запрещенной зоной. В чистых кристаллах с такой зоной носители заряда появляются только при конечных температурах. Имеются вещества, у которых зона проводимости и валентная зона перекрываются. Такие кристаллы называются полуметаллами, классическим примером которых является висмут. Схематически перекрытие зон в полуметаллах показано на рис. 11. Даже при $T = 0$ в полуметаллах часть электронов из валентной зоны переходит в зону проводимости, и в равновесном состоянии в них имеется в равном количестве определенное число свободных электронов и свободных дырок $n = p$. Уровень Ферми системы электронов и дырок в этом случае находится из уравнения нейтральности $n = p$, явный вид

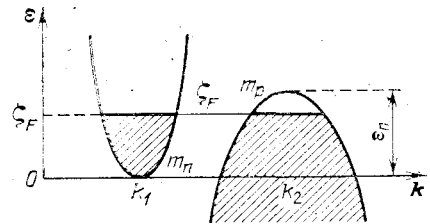


Рис. 11. Схема перекрытия зон в полуметаллах

которого есть

$$\frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\eta_F) = \frac{(2m_p k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\varepsilon_{\Pi}^* - \eta_F), \quad (5.28)$$

где $\varepsilon_{\Pi}^* = \varepsilon_{\Pi}/k_0 T$, ε_{Π} — перекрытие зоны проводимости и валентной зоны, $\eta_F = \zeta_F/k_0 T$, m_n и m_p — эффективные массы электронов и дырок соответственно.

При низких температурах $k_0 T \ll \varepsilon_{\Pi}$ электронный и дырочный газы находятся в сильно вырожденном состоянии. Тогда, в силу (4.37), из (5.28) для уровня Ферми при $T = 0$ имеем

$$\zeta_F = \frac{m_p}{(m_n + m_p)} \varepsilon_{\Pi}, \quad (5.29)$$

а для концентрации электронов и дырок при $T = 0$ получим

$$n = p = (3\pi^2 \hbar^3)^{-1} (2m_n m_p \varepsilon_{\Pi} / (m_n + m_p))^{3/2}. \quad (5.30)$$

§ 6. Статистика носителей заряда в примесных полупроводниках

В предыдущем параграфе была рассмотрена статистика носителей заряда в идеально чистых полупроводниках, найден уровень Ферми и определена температурная зависимость концентрации носителей заряда для различных моделей зон. В реальных кристаллах обычно имеются дефекты, такие как посторонние атомы — примеси, пустые узлы, собственные атомы в междоузлиях, сдвиги, трещины и т. д. Нас будут интересовать только примеси в полупроводниках.

Известно, что если концентрация примесных атомов невелика, то они создают дискретные уровни, попадающие в запрещенную зону. Это имеет место при концентрациях примесей N_i , когда среднее расстояние между примесными атомами $N_i^{-1/3} \gg a_0$, где $a_0 = \chi \hbar^2 / e^2 m$ — радиус первой боровской орбиты в кристалле с диэлектрической проницаемостью χ , m — эффективная масса. В этом случае электроны будут локализованы на примесных атомах и их волновые функции не будут перекрываться. Полупроводники с примесями такой малой концентрации называются *слабо легированными*. С ростом концентрации примесей расстояние между ними уменьшается и волновые функции электронов на них перекрываются, поэтому дискретные примесные уровни уширяются и превращаются в «примесную зону», отделенную от зоны проводимости и валентной зоны кристалла, — *промежуточно легированные полупроводники*. Дальнейшее увеличение концентрации примесей приводит к тому, что «примесная зона» перекрывается с одной из зон, т. е. с зоной проводимости или с валентной зоной, — *сильно легированные полупроводники*. В последних двух случаях наличие примесей меняет спектр электронной системы и существенно меняет свойства полупроводников [14—18].

Физическим свойствам сильно легированных полупроводников посвящен обстоятельный обзор В. Л. Бонч-Бруевича [19]. Здесь мы ограничимся только слабо легированными полупроводниками.

Когда примесные уровни располагаются вблизи дна зоны проводимости — *донорные уровни*, естественно, что тепловому движению легче перебросить электроны в зону проводимости с этого уровня примеси, чем из валентной зоны. При этом возникают свободные электроны в зоне проводимости и локализованный положительно заряженный примесный ион, поэтому полупроводник с такими примесями при не слишком высоких температурах будет иметь электронную проводимость и называться *электронным полупроводником* или полупроводником *n*-типа. Примером может служить Ge или Si с примесями элементов пятой группы (Sb, As).

Если локальные незаполненные примесные уровни располагаются вблизи валентной зоны — *акцепторные уровни*, то они могут играть роль уровней «прилипания» электронов. В этом случае термическое возбуждение в первую очередь будет забрасывать электроны из валентной зоны на эти пустые примесные уровни. Носителями заряда в таком кристалле будут только дырки в валентной зоне, так как электроны, заброшенные на акцепторные уровни, «прилипают» к ним и не участвуют в электропроводности. Полупроводник с такими примесями при не слишком высоких температурах будет иметь дырочную проводимость и называться *дырочным полупроводником* или полупроводником *p*-типа, как, например, Ge или Si с примесями элементов третьей группы (In, Ga).

1. Общий вид уравнения нейтральности. В общем случае допустим, что полупроводник содержит донорные и акцепторные примеси с концентрациями N_d и N_a соответственно и они создают дискретные уровни в запрещенной зоне с энергиями $-\varepsilon_d$ и $-\varepsilon_a$, отсчитанными от дна зоны проводимости (рис. 12). Очевидно, при абсолютном нуле температуры электроны с донорных уровней перейдут на акцепторные уровни, и в зависимости от отношения N_d/N_a произойдет полная компенсация доноров или акцепторов. Если $N_d > N_a$, то полностью компенсируются акцепторные уровни, а часть донорных уровней $N'_d = N_d - N_a$ останется нейтральной. Наоборот, если $N_a > N_d$, то донорные уровни ионизируются полностью, а число акцепторов $N'_a = N_a - N_d$ будет нейтральным.

При конечной температуре благодаря тепловым переходам будет иметь место перераспределение электронов и появится

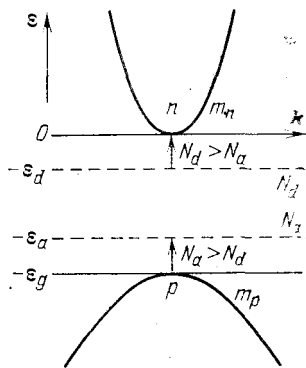


Рис. 12. Схема зоны полупроводников с донорными и акцепторными примесями

определенное количество электронов n в зоне проводимости и дырок p в валентной зоне, а также часть примесей будет в ионизованном виде, а часть — в нейтральном виде. В термодинамически равновесном состоянии в полупроводнике установится некоторый уровень Ферми, соответствующий данному распределению зарядов и значению температуры, который определяется из уравнения нейтральности с учетом наличия примесей.

В общем случае уровень Ферми находится из следующего условия нейтральности: сумма концентраций электронов в зоне проводимости n и на акцепторных уровнях $n_a = N_a^-$ равна сумме концентраций дырок в валентной зоне p и свободных состояний на донорных уровнях («связанных дырок») $p_d = N_d^+ = N_d - n_d$, где n_d — концентрация электронов на донорных уровнях. Таким образом, уравнение нейтральности в общем случае имеет вид

$$n + n_a = p + p_d. \quad (6.1)$$

Выражения n и p через уровень Ферми нам известны для различных моделей зон из § 4. Чтобы определить n_d и n_a , воспользуемся выражением для среднего числа электронов на примесном уровне с энергией ε_i :

$$n(\varepsilon_i) = [1 + \beta \exp((\varepsilon_i - \zeta)/k_0 T)]^{-1}, \quad (6.2)$$

которое получено с учетом вырождения примесных уровней в работах [20—22]. Множитель β в (6.2) учитывает кратность вырождения примесного состояния с энергией ε_i .

В случае простой одновалентной донорной примеси, для которой имеет место только спиновое вырождение $\beta = 1/2$, концентрация электронов на донорных уровнях с энергией $\varepsilon_i = -\varepsilon_d$, согласно (6.2), будет

$$n_d = N_d \left[1 + \frac{1}{2} \exp(-(\varepsilon_d + \zeta)/k_0 T) \right]^{-1}. \quad (6.3)$$

Следовательно,

$$p_d = N_d - n_d = N_d [1 + 2 \exp((\varepsilon_d + \zeta)/k_0 T)]^{-1}. \quad (6.4)$$

В случае акцепторного типа примеси, захватывающей дополнительный электрон для укомплектования парной связи, фактором спинового вырождения будет $\beta = 2$, так как отсутствие этого электрона может быть описано двояким способом [4]. Тогда, согласно (6.2), концентрация электронов на акцепторных уровнях с энергией $\varepsilon_i = -\varepsilon_a$ (см. рис. 12) будет определяться выражением

$$n_a = N_a \left[1 + 2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_a + \zeta}{k_0 T}\right) \right]^{-1}. \quad (6.5)$$

Для простоты предположим, что зона проводимости и валентная зона параболически (рис. 12). Тогда, подставляя (4.44), (5.6), (6.4) и (6.5) в (6.1), получим явный вид уравнения нейтраль-

ности в полупроводниках со стандартной зоной при наличии доноров и акцепторов:

$$\frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\eta) + N_a [1 + 2 \exp(-\varepsilon_a^* - \eta)]^{-1} = \\ = \frac{(2m_p k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(-\varepsilon_g^* - \eta) + N_d [1 + 2 \exp(\varepsilon_d^* + \eta)]^{-1}, \quad (6.6)$$

где $\varepsilon_d^* = \varepsilon_d/k_0 T$ и $\varepsilon_g^* = \varepsilon_g/k_0 T$. Отметим, что для учета непараболическости зоны проводимости в уравнение (6.1) вместо n надо подставить выражение n из (4.43).

Если известны параметры зон m_n , m_p , ε_g и примесей ε_d , ε_a , N_d , N_a , то уравнение (6.6) в принципе дает возможность определить приведенный уровень Ферми как функцию температуры и тем самым найти концентрации свободных носителей заряда $n(T)$ и $p(T)$. Однако трансцендентное уравнение (6.6) в общем виде относительно η решить невозможно. Достаточно отметить, что даже в том случае, когда электроны и дырки невырождены и для интегралов Ферми справедлива асимптотика (4.38), уравнение (6.6) является уравнением четвертого порядка относительно $\exp(\eta)$, и аналитически его решить нельзя. Поэтому для определения температурной зависимости $\eta(T)$ уравнение (6.6) приходится решать графически или приближенно-аналитическим путем (см., например, [23]).

Уравнение нейтральности (6.6) допускает аналитическое решение только в некоторых частных случаях. Один случай, когда в полупроводнике никаких примесей не имеется ($N_d = N_a = 0$) — собственные полупроводники, был нами рассмотрен в предыдущем параграфе. Здесь остановимся на случаях, относящихся к примесным полупроводникам.

2. Полупроводники с примесями одного типа. Рассмотрим электронный полупроводник: $N_d \neq 0$, $N_a = 0$. Предположим, что температура не так высока и переходы электронов имеют место только с донорных уровней в зону проводимости. Поэтому концентрация свободных дырок в валентной зоне $p = 0$ и уравнение нейтральности (6.6) в этом случае принимает вид

$$\frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\eta) = N_d [1 + 2 \exp(\varepsilon_d^* + \eta)]^{-1}. \quad (6.7)$$

При любой степени вырождения уравнение (6.7) не допускает аналитического решения, и найти η можно только численными методами. Аналитическое выражение η можно найти, если электронный газ невырожден, т. е. когда $\eta < -4$ и для интеграла Ферми справедлива асимптотика (4.38). Область применимости, полученную при этом, можно расширить и охватить частично вырожденный случай $\eta < +1$, если использовать аппроксимационную формулу для интеграла Ферми, предложенную в работах

[24, 25]. Из (4.36), согласно (5.43) в книге [26], имеем

$$F_{3/2}(\eta) \approx (3\sqrt{\pi}/4) \exp(\eta)/(1 + C \exp(\eta)) \text{ при } \eta < +1,3, \quad (6.8)$$

где $C = 0,25$ [24].

Подставляя (6.8) в (6.7), получим квадратное уравнение, нужное решение которого есть

$\exp(\eta) =$

$$= \left[\sqrt{\left(\frac{N_n - CN_d}{4N_n} \right)^2 + \frac{N_d}{2N_n} \exp(\epsilon_d^*)} - \frac{(N_n - CN_d)}{4N_n} \right] \exp(-\epsilon_d^*); \quad (6.9)$$

здесь

$$N_n = (2m_n k_0 T)^{3/2} / 4\pi^{3/2} \hbar^3. \quad (6.10)$$

Концентрация электронов проводимости в этом случае, согласно (4.44) и (6.8), определяется формулой

$$n = N_n \exp \eta / (1 + C \exp(\eta)) \text{ при } \eta < +1,3, \quad (6.11)$$

где $\exp \eta$ дается (6.9).

Выражение (6.9) весьма ненаглядно, поэтому для его анализа рассмотрим два предельных случая.

а) Область низких температур, в которой удовлетворяется неравенство

$$8N_n N_d / (N_n - CN_d)^2 \exp(\epsilon_d^*) \gg 1. \quad (6.12)$$

Тогда из (6.9) получим

$$\zeta = -\epsilon_d/2 + (k_0 T/2) \ln^*(N_d/2N_n). \quad (6.13)$$

Из последнего выражения видно, что при абсолютном нуле температуры уровень Ферми проходит строго посередине между дном зоны проводимости и донорными уровнями (рис. 13). Вторым член в (6.13) при низких температурах, пока $2N_n < N_d$, положителен, а при более высоких температурах, когда $2N_n > N_d$ [но пока сохраняется сильное неравенство (6.12)], отрицателен. Поэтому уровень химического потенциала с ростом температуры сначала поднимается, а затем начинает опускаться, становясь

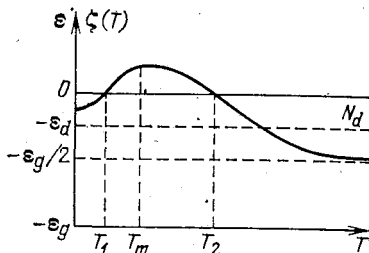


Рис. 13: Зависимость уровня Ферми от температуры в электронном полупроводнике

ниже $-\epsilon_d/2$. Таким образом, $\zeta(T)$ является функцией с максимумом. Значение температуры T_m , при котором ζ имеет максимум, естественно, зависит от концентрации доноров N_d и определяется из условия $\partial \zeta / \partial T = 0$. Это условие, согласно (6.13) и (6.10), дает

$$\ln [N_d/2N_n(T_m)] = 3/2. \quad (6.14)$$

Из (6.14) и (6.10) для температуры, при которой $\xi = \xi_m$, получаем

$$T_m = \pi \hbar^2 N_d^{2/3} / 2^{1/3} e k_0 m_n; \quad (6.15)$$

здесь $e \approx 2,72$ — основание натуральных логарифмов. Тогда, согласно (6.13) и (6.14), для максимального значения химического потенциала при заданной концентрации доноров N_d получим

$$\xi_m = -\varepsilon_d/2 + (3/4) k_0 T_m, \quad (6.16)$$

где T_m определяется (6.15).

Видно, что с ростом концентрации доноров N_d величина T_m , и следовательно ξ_m , увеличивается. При определенном значении $N_d = N_{d0}$ максимум химического потенциала может достичь дна зоны проводимости, т. е. $\xi_m = 0$. Величину T_m , при которой $\xi_m = 0$, обозначим через T_0 и определим ее из (6.16):

$$T_0 = 2\varepsilon_d/3k_0. \quad (6.17)$$

Подставляя в (6.15) вместо T_m величину T_0 , получим то значение концентрации доноров N_{d0} , при котором максимум уровня химического потенциала совпадает с дном зоны проводимости:

$$N_{d0} = (4/\hbar^3) \left(\frac{em_n}{3\pi} \right)^{3/2} \varepsilon_d^{3/2}. \quad (6.18)$$

Таким образом, получаем, что если донорные примеси с энергией ионизации ε_d имеют концентрацию N_{d0} , то электронный газ в зоне проводимости при $T = T_0$ будет находиться в частично вырожденном состоянии $\xi = 0$. При температурах ниже ($T < T_0$) и выше ($T > T_0$) температуры вырождения T_0 полупроводник невырожден. Оценим N_{d0} и T_0 для следующих значений параметров: $\varepsilon_d = 0,005$ эВ, $m_n = 0,02m_0$. Согласно (6.18) и (6.17) получим $N_{d0} = 2 \cdot 10^{16}$ см⁻³ и $T_0 \approx 30$ К.

Из вышеизложенного следует, что если $N_d > N_{d0}$, то максимум химического потенциала $\xi(T_m)$ будет находиться выше дна зоны проводимости, и поэтому полупроводник будет иметь две температуры вырождения T_1 и T_2 (см. рис. 13). Очевидно, тогда электроны проводимости будут вырожденными в области температур $T_1 < T < T_2$, а вне этого интервала полупроводник будет невырожденным. Естественно, когда концентрация доноров значительно больше, чем N_{d0} , вышеприведенные формулы для $\xi(T)$ становятся неприменимыми, и нижнюю и верхнюю температуры вырождения (T_1 и T_2) нужно найти из уравнения (6.7) при условии $\eta = 0$. Если учтем, что $F_{3/2}(0) \approx 1$ (см. таблицы в [2]), то из (6.7) получим уравнение для определения T_1 и T_2 :

$$(2m_n k_0 T)^{3/2} [1 + \exp(\varepsilon_d/k_0 T)] = 3\pi^2 \hbar^3 N_d, \quad (6.19)$$

которое можно решить только численно.

Подставляя (6.13) в (4.46), получим экспоненциальную зависимость концентрации электронов проводимости от температуры

в области низких температур

$$n = (N_d N_n / 2)^{1/2} \exp(-\varepsilon_d / 2k_0 T). \quad (6.20)$$

б) Область высоких температур, в которой имеет место $N_n \gg N_d$ и неравенство, обратное (6.12). Но будем по-прежнему предполагать, что собственная проводимость еще не играет существенной роли. В этом случае корень в (6.9) можно разложить в ряд и тогда получим

$$\xi = k_0 T \ln [N_d / (N_n - CN_d)]. \quad (6.21)$$

Согласно (6.21) и неравенству, обратному (6.12), в этом интервале температур, когда $N_n \gg N_d$, уровень химического потенциала опускается ниже донорных уровней (рис. 13). Поэтому электроны проводимости невырождены.

Подставляя (6.21) в (6.11), получим

$$n = N_d, \quad (6.22)$$

т. е. все электроны с донорных уровней переходят в зону проводимости, когда $N_n \gg N_d$. Концентрация электронов проводимости в этом интервале температур будет оставаться постоянной, $n = N_d$, пока с повышением температуры не начнет играть роль собственная проводимость. При таких «очень больших» температурах уровень химического потенциала приближается к середине запрещенной зоны (рис. 13).

Таким образом, в слабо легированном полупроводнике в зависимости от температуры электронный газ в зоне проводимости в основном будет невырожденным и в очень узком интервале температур $T_1 \leq T \leq T_2$ частично вырожден. Очевидно, для того чтобы получить сильно вырожденный полупроводник с постоянной концентрацией, нужно сильно легировать полупроводник, т. е. $N_d > 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В этом случае образуется примесная зона, перекрывающаяся с зоной проводимости, исчезает энергия активации и вместе с ней исчезает нижняя температура вырождения T_1 . Во всей области низких температур сильно легированный полупроводник находится в сильно вырожденном состоянии и имеет всего одну температуру вырождения T_2 , выше которой вырождение снимается [19].

В заключение отметим, что аналогичные результаты получаются для дырочного полупроводника. Для этого достаточно в исходных формулах заменить N_d , m_n , ε_d и ξ на N_a , m_p , ε_a и $\xi_p = -\xi - \varepsilon_g$ соответственно. В случае дырочного полупроводника при абсолютном нуле температуры уровень химического потенциала проходит строго посередине между верхним краем валентной зоны и акцепторными уровнями. С ростом температуры ξ приближается к потолку валентной зоны и при $T = T_0$ имеет максимум, совпадающий с краем валентной зоны, т. е. $\xi = -\varepsilon_g$.

3. Компенсированные полупроводники. В реальных полупроводниках обычно присутствуют одновременно и донорные, и акцепторные примеси. Эти примеси в запрещенной зоне могут

образовать разные дискретные уровни с различными энергиями активации. Для простоты предположим, что все донорные примеси с концентрацией N_d образуют дискретные уровни ε_d , а все акцепторные примеси с концентрацией N_a создают уровни ε_a (см. рис. 12). Рассмотрим статистику носителей заряда и температурную зависимость электронов проводимости и свободных дырок в рамках такой простой модели компенсированных полупроводников.

При $T = 0$, очевидно, электроны с донорных уровней перейдут на акцепторные уровни и никаких свободных носителей заряда в кристалле не будет, т. е. $n = p = 0$. Если $N_d = N_a$, то произойдет полная компенсация примесей и полупроводник будет вести себя как собственный, так как свободные носители заряда будут возникать только при очень высоких температурах, когда становятся возможными переходы электронов с валентной зоны или с близко расположенных к ней акцепторных уровней в зону проводимости. Однако отметим, что кинетические свойства таких полностью компенсированных полупроводников будут отличаться от свойств чистых собственных полупроводников, поскольку заряженные донорные и акцепторные примеси будут существенно влиять на процесс рассеяния свободных носителей заряда.

Если $N_d > N_a$, то при $T = 0$ все акцепторные примеси будут отрицательно заряженными, а число доноров $N_d - N_a$ будет нейтральным, и они могут ионизоваться при конечных температурах, когда возникает возможность перехода с нейтральных донорных уровней в зону проводимости (см. рис. 12). Полупроводник в этом случае будет иметь проводимость n -типа. Если $N_a > N_d$, то при $T = 0$ все донорные примеси будут положительно заряженными, а $N_a - N_d$ — число акцепторов будет нейтральным. При конечной температуре электроны из валентной зоны перейдут на эти нейтральные акцепторные уровни (рис. 12) и полупроводник будет иметь проводимость p -типа.

Определим уровень химического потенциала в полупроводниках с любой степенью компенсации, кроме нулевой ($N_a \neq 0$, $N_d \neq 0$), при очень низких температурах ($T \rightarrow 0$), когда можно пренебречь концентрацией электронов проводимости n и дырок p в валентной зоне. Тогда уравнение нейтральности (6.6) принимает вид

$$N_a [1 + 2 \exp(-\varepsilon_a^* - \eta)]^{-1} = N_d [1 + 2 \exp(\varepsilon_d^* + \eta)]^{-1}, \quad (6.23)$$

нужное решение которого есть

$$\begin{aligned} \exp(\eta) = & (N_d - N_a) / 4N_a \exp(-\varepsilon_d^*) + \\ & + \frac{|N_d - N_a|}{4N_a} \exp(-\varepsilon_d^*) \left[1 + \left(\frac{4N_a}{N_d - N_a} \right)^2 \frac{N_d}{N_a} \exp(-\varepsilon_a^* + \varepsilon_d^*) \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Из этого решения следует, что при полной компенсации, когда $N_d = N_a$,

$$\xi = -(\varepsilon_a + \varepsilon_d)/2, \quad (6.25)$$

т. е. уровень химического потенциала проходит посередине между донорными и акцепторными уровнями при низких температурах, пока справедливо (6.23).

В случае частично компенсированного электронного полупроводника $N_d > N_a \neq 0$ в (6.24) подкоренное выражение можно заменить единицей (т. е. отбросить экспоненциально малый член) и тогда получим

$$\xi = -\varepsilon_d + k_0 T \ln [(N_d - N_a)/2N_a]. \quad (6.26)$$

Видно, что в электронных полупроводниках с частичной компенсацией уровень химического потенциала при $T \rightarrow 0$ совпадает с донорным уровнем, тогда как в некомпенсированных электронных полупроводниках, согласно (6.13), при $T \rightarrow 0$ химический потенциал $\xi = -\varepsilon_d/2$.

В случае частично компенсированного дырочного полупроводника $N_a > N_d \neq 0$ в (6.24) подкоренное выражение нужно разложить и при этом необходимо оставить, кроме единицы, и следующий член. В результате имеем аналогичное выражение для химического потенциала

$$\xi = -\varepsilon_a - k_0 T \ln [(N_a - N_d)/2N_d], \quad (6.27)$$

из которого следует, что при $T \rightarrow 0$ $\xi = -\varepsilon_a$, в отличие от некомпенсированных акцепторных полупроводников.

Выражение (6.26) справедливо для любой промежуточной степени компенсации [кроме нулевой ($N_a = 0$) и полной ($N_a = N_d$) компенсации] при низких температурах, когда концентрацией электронов проводимости можно пренебречь в условии нейтральности. Его также можно получить непосредственно из уравнения (6.23), если левую часть заменить просто на N_a , т. е. исходить из уравнения нейтральности $N_a = p_d$, где p_d дается формулой (6.4).

Теперь решим уравнение нейтральности для частично компенсированного электронного полупроводника с учетом электронов в зоне проводимости и определим температурную зависимость концентрации электронов проводимости в таких полупроводниках. В этом случае $N_d > N_a$ из донорных уровней N_a электронов переходят в акцепторные уровни, ионизуя их полностью, и имеет место переход электронов из донорных уровней в зону проводимости за счет термического возбуждения (рис. 12). Поэтому уравнение нейтральности (6.1) принимает вид

$$n + N_a = N_d [1 + 2 \exp(\varepsilon_d^* + \eta)]^{-1}. \quad (6.28)$$

Предположим, что электронный газ в зоне проводимости невырожден и его концентрация дается формулой (4.46) $n = N_n \exp(\eta)$. Тогда (6.28) можно решить и найти химический

потенциал η . Подставляя это решение в (4.46), определяем концентрацию электронов проводимости

$$n = \frac{1}{4} (2N_a + N_n \exp(-\varepsilon_d^*)) \times \left[\left(1 + \frac{8(N_d - N_a) N_n \exp(-\varepsilon_d^*)}{(2N_a + N_n \exp(-\varepsilon_d^*))^2} \right)^{1/2} - 1 \right]. \quad (6.29)$$

Эта формула для концентрации справедлива при любой степени компенсации $N_d \geq N_a \geq 0$. Область применимости (6.29) определяется двумя условиями: во-первых, концентрация N_d не должна быть слишком большой (слабо легированные полупроводники), так чтобы электроны проводимости при всех температурах были невырожденными; во-вторых, температура не должна быть слишком высокой, чтобы не имели места переходы электронов из акцепторных уровней и из валентной зоны в зону проводимости.

При $N_a = 0$ из (6.29) следует известный результат для некомпенсированных электронных полупроводников, а при полной компенсации $N_a = N_d$, как и следовало ожидать, из (6.29) получается, что $n = 0$.

На основе формулы (6.29) рассмотрим некоторые частные случаи.

а) Слабо компенсированные полупроводники: $N_a \ll N_d$. В этом случае можно найти область температур, в которой одновременно выполняются сильные неравенства

$$2N_a \ll N_n \exp(-\varepsilon_d^*) \ll 8N_d, \quad (6.30)$$

соответствующие тому, что концентрация электронов проводимости намного больше концентрации акцепторов и намного меньше концентрации доноров, $N_a \ll n \ll N_d$. Тогда из (6.29) приближенно получаем

$$n \approx (N_d N_n / 2)^{1/2} \exp(-\varepsilon_d / 2k_0 T), \quad (6.31)$$

что совпадает с (6.20).

б) Низкие температуры и не очень слабо компенсированные полупроводники:

$$N_n \exp(-\varepsilon_d^*) \ll 2N_a < 2N_d. \quad (6.32)$$

В этом случае для концентрации электронов проводимости из (6.29) следует выражение

$$n \approx [(N_d - N_a) / 2N_a] N_n \exp(-\varepsilon_d / k_0 T), \quad (6.33)$$

в котором энергия активации по сравнению с (6.31) в два раза больше.

в) Высокие температуры и произвольная степень компенсации:

$$N_n \exp(-\varepsilon_d^*) \gg 8(N_d - N_a). \quad (6.34)$$

Из условия (6.34) при $N_a < N_d$ непосредственно следует неравенство $N_n \exp(-\varepsilon_d^*) \gg 2N_a$. Тогда из (6.29) имеем для концентрации постоянную величину

$$n = N_d - N_a, \quad (6.35)$$

что означает, что при высоких температурах (6.34) все нескомпенсированные донорные примеси $N_d - N_a$ ионизуются, отдавая свои электроны в зону проводимости.

Таким образом, в температурной зависимости концентрации электронов проводимости компенсированных полупроводников явно проявляются три области: низкие (6.32), средние (6.30) и высокие (6.34) температуры. В зависимости от степени компенсации меняются ширины первых двух областей. При $N_a \rightarrow 0$ сужается и исчезает область температур (6.32) и расширяется область (6.30). Поэтому во всей области температур $N_n \exp(-\varepsilon_d^*) \ll 8N_d$ изменение концентрации определяется формулой (6.31). При сильной компенсации $N_a \rightarrow N_d$, наоборот, область (6.30) почти исчезает и расширяется область температур (6.32). Поэтому во всей области температуры $N_n \exp(-\varepsilon_d^*) \ll \ll 2N_d$ концентрация изменяется по закону (6.33).

Следовательно, при определении энергии донорных уровней из температурной зависимости концентрации необходимо знать степень компенсации полупроводника, иначе можно ошибиться в два раза.

В заключение этого пункта отметим следующее важное обстоятельство, которое относится к статистике носителей заряда в невырожденных полупроводниках. Мы увидели, что концентрации свободных носителей тока n и p зависят от химического потенциала, а последний в свою очередь определяется количеством и распределением примесей в полупроводнике. Если электроны проводимости и дырки невырождены, то, как видно из (4.46), (5.8) и (5.4), произведение np от химического потенциала не зависит, следовательно, не зависит и от количества, и распределения различных примесей. Действительно, из (4.46), (5.8) и (5.12) получим

$$np = \frac{(2\sqrt{m_n m_p} k_0 T)^3}{(4\pi^{3/2} \hbar^3)^2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_g}{k_0 T}\right) = n_i^2 = p_i^2, \quad (6.36)$$

т. е. произведение np в невырожденном примесном полупроводнике равно квадрату концентрации электронов (или дырок) в собственном полупроводнике при той же температуре, поэтому определяется только шириной запрещенной зоны и не зависит от количества и распределения имеющихся примесей, тогда как n и p от них зависят существенно.

Из (6.36) также следует, что при любой конечной температуре в невырожденном полупроводнике имеется определенное количество и электронов, и дырок. Когда $n \gg n_i$, основными но-

стегелями заряда являются электроны (полупроводник n -типа), а дырки с концентрацией $p = n_i^2/n \ll n_i$ являются неосновными носителями заряда; и, наоборот, когда $p \gg n_i$, основными носителями являются дырки (полупроводник p -типа), а электроны являются неосновными носителями заряда.

4. Бесщелевые полупроводники с примесями. Статистика носителей заряда в бесщелевых полупроводниках (БП) без примеси была рассмотрена в п. 2 § 5. Было показано, что концентрация свободных носителей заряда в таких БП монотонно растет с температурой по степенному закону. Примесным полупроводникам с конечной шириной запрещенной зоны были посвящены предыдущие два пункта этого параграфа, в которых показано, что концентрация свободных носителей тока при низких температурах экспоненциально растет, а при высоких температурах остается постоянной, пока не начнется собственная проводимость; БП с примесями мы рассмотрим отдельно, так как они обладают некоторыми особенностями — концентрация от температуры не всегда зависит монотонно.

Теория примесных состояний в БП типа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ была развита в работах [27—31]. Показано, что в таких полупроводниках, где эффективная масса тяжелых дырок m_p значительно больше эффективной массы электронов проводимости m_n , резких донорных уровней не существует, а имеются квазидискретные акцепторные уровни, попадающие на непрерывный спектр зоны проводимости (рис. 14). Величина энергии квазидискретных акцепторных уровней ϵ_0 , отсчитанная от дна зоны проводимости, следовательно, и от потолка валентной зоны, зависит от расстояния между зоной проводимости и взаимодействующей с ней зоной легких дырок ϵ_g . С уменьшением ϵ_g ϵ_0 растет [29—31].

Рассмотрим статистику носителей заряда в БП в рамках модели, приведенной на рис. 14. В этой модели ϵ_g меняется от 0,2 эВ для $x=0$ (HgTe) до 0 для $x=0,16$ (см. рис. 7). Поэтому зона проводимости существенно непараболична. Энергия электрона на акцепторном уровне для HgTe $\epsilon_0 \approx 0,0022$ эВ [32].

Отметим, что при $m_p \gg m_n$ связанных состояний электронов на донорах не существует, поэтому все донорные атомы ионизируются даже при абсолютном нуле. Учитывая это обстоятельство, а также применяя выражение (6.2) для определения концентрации электронов на акцепторных уровнях с энергией $\epsilon_i = \epsilon_0$, напишем следующее уравнение нейтральности, справедливое при

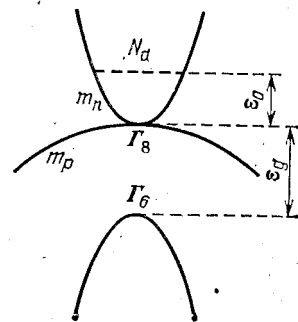


Рис. 14. Квазидискретные акцепторные уровни в зоне проводимости бесщелевых полупроводников типа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ при $x < x_0$ (см. рис. 7)

любой температуре:

$$N_d + p = n + N_a [1 + 4 \exp(\epsilon_0 - \zeta_F) / k_0 T]^{-1}, \quad (6.37)$$

где N_d и N_a — концентрации доноров и акцепторов соответственно. Множитель 4 учитывает кратность вырождения основного уровня [33].

Поскольку зона тяжелых дырок параболична, то их концентрация, согласно (5.6), дается формулой

$$p = [(2m_p k_0 T)^{3/2} / 3\pi^2 \hbar^3] F_{3/2}(-\eta), \quad (6.38)$$

а зона проводимости в общем случае непараболична, и поэтому концентрация свободных электронов определяется выражением (4.43), в котором $\eta = \zeta_F / k_0 T$ и $\beta = k_0 T / \epsilon_g$, где $\epsilon_g = \epsilon(\Gamma_s) - \epsilon(\Gamma_6)$ (см. рис. 14).

Для определения концентрации электронов и дырок в общем случае нужно подставить (6.38) и (4.43) в уравнение (6.37) и, решая его, найти приведенный уровень Ферми η при заданных значениях параметров зоны и примесей*). Используя таким образом найденные значения η , из (4.43) и (6.38) находим n и p .

Приведем здесь явный вид уравнения нейтральности в простом случае. Допустим, что зона проводимости, так же как и зона тяжелых дырок, параболична. Кроме того, в силу неравенства $m_p \gg m_n$ предположим, что электроны проводимости сильно вырождены, а дырки невырождены. Тогда их концентрации даются выражениями (4.13) и (5.8) соответственно. Перепишем их в виде

$$n = N_0 (\zeta_F / \epsilon_0)^{3/2} = N_0 (\eta k_0 T / \epsilon_0)^{3/2} \quad (6.39)$$

и

$$p = (3\sqrt{\pi}/4) [(m_p/m_n) (k_0 T / \epsilon_0)]^{3/2} N_0 \exp(-\eta), \quad (6.40)$$

где

$$N_0 = (2m_n \epsilon_0)^{3/2} / 3\pi^2 \hbar^3 \quad (6.41)$$

есть такая концентрация, при которой уровень Ферми совпадает с энергией акцепторного уровня, т. е. когда $n = N_0$, то $\zeta_F = \epsilon_0$.

Подставляя (6.39) и (6.40) в (6.37), для приведенного уровня Ферми $\eta = \zeta_F / k_0 T$ получим следующее уравнение:

$$\begin{aligned} & (3\sqrt{\pi}/4) (m_p/m_n)^{3/2} \exp(-\eta) - \eta^{3/2} = \\ & = (\epsilon_0/k_0 T)^{3/2} \{ (N_d/N_0) [1 + 4 \exp(\epsilon_0/k_0 T - \eta)]^{-1} - N_d/N_0 \}. \end{aligned} \quad (6.42)$$

На рис. 15 приведены рассчитанные на ЭВМ зависимости [34] концентрации электронов проводимости n от температуры T в безразмерных единицах для значения $m_p/m_n = 18$, что соответствует $(3\sqrt{\pi}/4) (m_p/m_n)^{3/2} = 100$. Видно, что характер зави-

*) Когда $\epsilon_g \rightarrow 0$, в валентной зоне, кроме тяжелых дырок, возникнут и легкие дырки (рис. 14). Однако их концентрация по сравнению с концентрацией тяжелых дырок мала, как $(m_n/m_p)^{3/2} f$ где m_n — эффективная масса легких дырок. Поэтому концентрацией легких дырок в (6.37) можно пренебречь.

симости n от T определяется количеством донорных и акцепторных примесей, имеющих в полупроводнике. Эти зависимости качественно можно объяснить [35] на основе модели, указанной на рис. 14. Проанализируем следующие случаи:

1) Донорные примеси отсутствуют, $N_d = 0$, и имеются только акцепторы N_a . Поскольку для ионизации акцепторов требуется конечная энергия, то при низких температурах в БП сперва возникает собственная проводимость. Только при более высоких температурах, когда заполняются локализованные акцепторные уровни электронами, забранными из валентной зоны, БП будет обладать преимущественно примесной p -проводимостью.

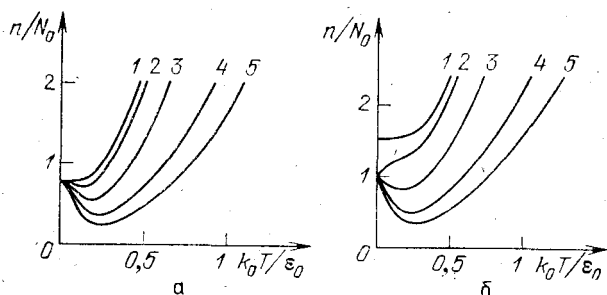


Рис. 15. Теоретические кривые [34] зависимости концентрации свободных электронов n от температуры T для концентрации доноров: а) $N_d/N_0 = 0,8$ и б) $N_d/N_0 = 1,6$ при различных концентрациях акцепторов: 1 — $N_a/N_0 = 0$; 2 — $N_a/N_0 = 1$; 3 — $N_a/N_0 = 10$; 4 — $N_a/N_0 = 50$; 5 — $N_a/N_0 = 100$

2) Донорные примеси присутствуют, но их концентрация $N_d < N_0$. В этом случае при $T = 0$ уровень Ферми ζ_F проходит ниже основного акцепторного уровня ϵ_0 , т. е. $\zeta_F < \epsilon_0$, так как, несмотря на то, что все доноры ионизованы, $n = N_d < N_0$, эта концентрация недостаточна для достижения уровнем Ферми акцепторного уровня ϵ_0 . Равенство $\zeta_F = \epsilon_0$ имеет место, по определению N_0 , только тогда, когда $n = N_0$. В отсутствие акцепторов, $N_a = 0$, при низких температурах концентрация электронов остается постоянной, $n = N_d$, а затем монотонно увеличивается с ростом температуры благодаря переходам электронов из валентной зоны в зону проводимости (кривая 1 на рис. 15, а). Наличие акцепторов, $N_a \neq 0$, при очень низких температурах не меняет n , так как из-за того, что $\zeta_F < \epsilon_0$, компенсации не происходит. С повышением температуры происходит компенсация — часть электронов, освободившихся из донорных уровней теплом, перебрасывается на акцепторные уровни и концентрация электронов уменьшается. Дальнейший рост температуры обуславливает переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости, что приводит к увеличению n . Поэтому, если в БП имеются и доноры, и акцепторы, то на кривой зависимости $n(T)$ должен иметь место минимум (кривые 2—5 на рис. 15, а).

3) Концентрация доноров $N_d > N_0$, что соответствует случаю, когда при $T = 0$ уровень Ферми выше уровня акцептора, т. е. $\zeta_F > \epsilon_0$. В отсутствие акцепторов, $N_a = 0$, так же как и в случае 2), при низких температурах n остается постоянной и равной N_d , а затем с ростом температуры монотонно растет (кривая 1 на рис. 15, б). Когда $N_a \neq 0$, в отличие от предыдущего случая, происходит частичная компенсация даже при $T = 0$ и с ростом концентрации акцепторов N_a до значения $N_a = N_d - N_0$. Концентрация уменьшается до значения $n = N_0$ *). Дальнейшее увеличение N_a не приводит к уменьшению концентрации свободных электронов, так как при этом уровень Ферми ζ_F стал бы меньше ϵ_0 , и поэтому захват их акцепторами был бы энергетически выгодным (см. рис. 15, б). Если $N_a > (N_d - N_0)$, то при $T \neq 0$ идут два конкурирующих процесса: тепловой заброс электронов на незанятые акцепторные уровни и тепловая генерация электрон-дырочных пар [35]. При низких температурах доминирует первый процесс; при более высоких — второй. В результате, как и в случае $N_d < N_0$, функция $n(T)$ должна иметь минимум (кривые 3—5 на рис. 15, б).

Уменьшение концентрации электронов проводимости с ростом температуры наблюдалось в ряде работ [36, 37]. Немонотонная зависимость концентрации свободных электронов от температуры в БП с донорами и акцепторами может проявляться как в эффекте Холла, так и в электропроводности. Очевидно, минимум в температурной зависимости электропроводности $\sigma(T)$ должен быть более резко выраженным, так как с ростом температуры акцепторы ионизируются, что приводит к возрастанию числа рассеивающих центров.

*) Этот результат непосредственно следует из (6.42). Действительно, из этого уравнения получается, что, когда $N_a = N_d - N_0$, при $T \rightarrow 0$ $\zeta = \epsilon_0$ и, согласно (6.39), $n = N_0$.

РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ. МЕХАНИЗМЫ РАССЕЯНИЯ

Неравновесные процессы, связанные с перемещением носителей тока в кристалле под действием внешних возмущений, таких как электрическое поле, градиент температуры, магнитное поле и т. д., называются *электронными явлениями переноса* или *кинетическими эффектами*. К ним относятся электропроводность, теплопроводность, термоэлектрические, гальваномангнитные и термомагнитные эффекты.

Если величины, определяющие явления переноса, — плотность электрического тока, тепловой поток, напряженность электрического поля и т. д. — не зависят от времени, то процесс переноса заряда или энергии называется *стационарным*. Здесь мы будем рассматривать только стационарные явления переноса. Ниже дается определение и классификация этих явлений.

В классической области для построения микроскопической теории явлений переноса используется кинетическое уравнение для неравновесной функции распределения носителей тока, которое учитывает их взаимодействие с кристаллической решеткой. Прежде чем перейти к формулировке и решению кинетического уравнения, приведем некоторые соотношения, носящие общий характер.

§ 7. Феноменологическое определение кинетических коэффициентов и их взаимная связь

1. Общие соотношения. Чтобы феноменологически определить интересующие нас эффекты, надо иметь соотношения, связывающие компоненты токов, электрического поля и градиента температуры. Эти соотношения могут быть записаны в виде уравнения переноса, т. е. в виде обобщенного закона Ома и теплопроводности. В самом общем виде уравнения переноса, применимые и к анизотропным проводникам, имеют вид [2]

$$j_i = \sigma_{ik} E_k - \beta_{ik} \nabla_k T, \quad (7.1a)$$

$$w_i = \gamma_{ik} E_k - \chi_{ik} \nabla_k T, \quad i, k = x, y, z; \quad (7.1b)$$

здесь $E_k = -\nabla_k \varphi$, $w_i = w_i^* - \Phi j_i$, где $\varphi = \varphi_0 - (\xi/e)$ — электрохи-

мический потенциал, Φ_0 — электростатический потенциал, $(-e)$ — заряд электрона, w_i^* — компонента плотности потока энергии, переносимой электронами проводимости. Величина f_j^* , выделенная из плотности полной энергии, связана с тем, что каждый электрон переносит с собой энергию $e\Phi$, и, следовательно, w_i есть не что иное, как плотность потока кинетической или тепловой энергии, переносимой электронами проводимости.

Все компоненты тензоров, входящие в (7.1), являются функциями магнитного поля \mathbf{H} и удовлетворяют следующим соотношениям, вытекающим из принципа симметрии кинетических коэффициентов [1]:

$$\sigma_{ik}(\mathbf{H}) = \sigma_{ki}(-\mathbf{H}), \quad (7.2)$$

$$\kappa_{ik}(\mathbf{H}) = \kappa_{ki}(-\mathbf{H}), \quad (7.3)$$

$$\gamma_{ik}(\mathbf{H}) = T\beta_{ki}(-\mathbf{H}). \quad (7.4)$$

Запись в виде (7.1) имеет то преимущество, что входящие в нее коэффициенты определяются непосредственно из решения кинетического уравнения, но она неудобна для сравнения теории с экспериментом и установления связи между отдельными эффектами. Поэтому мы выразим \mathbf{E} и \mathbf{w} из (7.1) через \mathbf{j} и ∇T . Тогда получим

$$E_i = \rho_{ik}j_k + \alpha_{ik}\nabla_k T, \quad (7.5a)$$

$$w_i = \pi_{ik}j_k - \lambda_{ik}\nabla_k T. \quad (7.5b)$$

Здесь ρ_{ik} , α_{ik} , π_{ik} и λ_{ik} представляют собой соответственно тензоры удельного электросопротивления, абсолютной термо-э. д. с., эффекта Пельтье и теплопроводности. Эти тензоры определенным образом выражаются через σ_{ik} , β_{ik} , γ_{ik} и κ_{ik} и обладают следующими свойствами симметрии [1], вытекающими из соотношений (7.2) — (7.4):

$$\rho_{ik}(\mathbf{H}) = \rho_{ki}(-\mathbf{H}), \quad (7.6)$$

$$\lambda_{ik}(\mathbf{H}) = \lambda_{ki}(-\mathbf{H}), \quad (7.7)$$

$$\pi_{ik}(\mathbf{H}) = \pi_{ki}(-\mathbf{H}). \quad (7.8)$$

Если магнитное поле направлено по оси z , то из (7.5) в случае изотропного проводника получим [2]

$$E_x = \rho_{11}j_x - \rho_{12}j_y + \alpha_{11}\nabla_x T + \alpha_{12}\nabla_y T, \quad (7.9)$$

$$E_y = \rho_{12}j_x + \rho_{11}j_y - \alpha_{12}\nabla_x T + \alpha_{11}\nabla_y T, \quad (7.10)$$

$$E_z = \rho_{33}j_z + \alpha_{33}\nabla_z T \quad (7.11)$$

и тепловой поток

$$w_x = \pi_{11}j_x + \pi_{12}j_y - (\lambda_{11} + \kappa_\Phi)\nabla_x T + \lambda_{12}\nabla_y T, \quad (7.12)$$

$$w_y = -\pi_{12}j_x + \pi_{11}j_y - \pi_{12}\nabla_x T - (\lambda_{11} + \kappa_\Phi)\nabla_y T, \quad (7.13)$$

$$w_z = \pi_{33}j_z - (\lambda_{33} + \kappa_\Phi)\nabla_z T. \quad (7.14)$$

Здесь κ_Φ — фоновая часть теплопроводности кристалла. Теперь определим основные кинетические эффекты.

2. Продольные эффекты в продольном магнитном поле.

1) *Изменение электрического сопротивления.* Из условия $\nabla_z T = 0$ и из (7.11) имеем

$$E_z(H)/j_z = \rho_{33}(H), \quad \Delta\rho = \rho_{33}(H) - \rho_{33}(0). \quad (7.15)$$

2) *Изменение термо-э.д.с.* Из условия $j_z = 0$ и из (7.11) следует

$$E_z(H)/\nabla_z T = \alpha_{33}(H), \quad (\Delta\alpha) = \alpha_{33}(H) - \alpha_{33}(0). \quad (7.16)$$

3) *Изменение теплопроводности.* Из условия $j_z = 0$ и из (7.14) получим

$$\kappa = -w_z/\nabla_z T = \lambda_{33} + \kappa_\phi, \quad (\Delta\kappa) = \lambda_{33}(H) - \lambda_{33}(0). \quad (7.17)$$

3. Гальваномагнитные эффекты. В зависимости от условий опыта различают изотермические и адиабатические эффекты. Если исследуемый образец помещен в термостат, эффекты называются *изотермическими*, а если он изолирован от внешней среды — *адиабатическими*.

1) *Эффект Холла* — возникновение поперечного электрического поля E_y при наличии тока j_x в направлении x и при отсутствии тока j_y — определяется из условий $j_y = 0$, $\nabla_x T = \nabla_y T = 0$ и характеризуется постоянной R . Тогда из (7.10) имеем

$$R = E_y/j_x H = \rho_{12}/H. \quad (7.18)$$

2) *Изменение сопротивления в магнитном поле — магнетосопротивление:* $j_y = 0$, $\nabla_x T = \nabla_y T = 0$. Из (7.9) получим

$$\rho(H) = E_x/j_x = \rho_{11}, \quad \Delta\rho/\rho_{11}(0) = [\rho_{11}(H) - \rho_{11}(0)]/\rho_{11}(0). \quad (7.19)$$

3) *Эффект Нернста* — возникновение продольного градиента температуры при отсутствии теплового потока в этом направлении: $w_x = 0$, $j_y = 0$, $\nabla_y T = 0$. Из (7.12) следует

$$B = \nabla_x T/j_x = \pi_{11}/(\lambda_{11} + \kappa_\phi). \quad (7.20)$$

Отметим, что этот эффект имеет место и в отсутствие магнитного поля. Наличие поперечного магнитного поля изменяет только величину B .

Теперь определим эти эффекты в адиабатическом случае и соответствующие коэффициенты снабдим индексом «ад». В этом случае условие изотермичности $\nabla_y T = 0$ нужно заменить условием адиабатичности $w_y = 0$. Тогда из уравнений (7.9), (7.10), (7.12) и (7.13) получим

$$R_{ад} = \frac{1}{H} (\rho_{12} - \alpha_{11}\pi_{12}/(\lambda_{11} + \kappa_\phi)), \quad (7.21)$$

$$\rho_{ад} = \rho_{11} - \alpha_{12}\pi_{12}/(\lambda_{11} + \kappa_\phi), \quad (7.22)$$

$$B_{ад} = [\pi_{11}(\lambda_{11} + \kappa_\phi) - \pi_{12}\lambda'_{12}]/[(\lambda_{11} + \kappa_\phi)^2 + \lambda_{12}^2]. \quad (7.23)$$

Кроме этих эффектов, есть еще один эффект, который имеет место только при адиабатическом условии.

4) *Эффект Эттингсгаузена* — возникновение поперечной разности температур при наличии электрического тока в x -направлении ($j_x \neq 0$) и при отсутствии токов в направлении y : $j_y = 0$, $w_y = 0$, а также при отсутствии градиента $\nabla_x T = 0$. Тогда из (7.13) для коэффициента Эттингсгаузена P получаем

$$P = -\nabla_y T / H j_x = \pi_{12} / [H(\lambda_{11} + \kappa_\Phi)]. \quad (7.24)$$

4. Термомагнитные эффекты.

1) *Поперечный эффект Нернста — Эттингсгаузена* — поперечное электрическое поле E_y , связанное с наличием градиента температуры $\nabla_x T$, — определяется из условий $j_x = j_y = 0$, $\nabla_y T = 0$ и характеризуется коэффициентом Q . Из (7.10) следует *)

$$Q = -E_y / H \nabla_x T = \alpha_{12} / H. \quad (7.25)$$

2) *Продольный эффект Нернста — Эттингсгаузена* — изменение термо-э. д. с. в поперечном магнитном поле — определяется из условий $j_x = j_y = 0$, $\nabla_y T = 0$. Тогда из (7.9) получим

$$\alpha(H) = E_x / \nabla_x T = \alpha_{11}, \quad \Delta\alpha = \alpha_{11}(H) - \alpha_{11}(0). \quad (7.26)$$

3) *Эффект Маджи — Риги — Ледюка* — изменение теплопроводности в поперечном магнитном поле — определяется из условий $j_x = j_y = 0$, $\nabla_y T = 0$. Из (7.12) имеем

$$\kappa(H) = -w_x / \nabla_x T = \lambda_{11} + \kappa_\Phi, \quad \Delta\kappa = \lambda_{11}(H) - \lambda_{11}(0). \quad (7.27)$$

В адиабатическом случае ($w_y = 0$) для соответствующих термомагнитных коэффициентов получим

$$Q_{ад} = H^{-1}(\alpha_{12} + \alpha_{11}\alpha_{12}/(\lambda_{11} + \kappa_\Phi)), \quad (7.28)$$

$$\alpha_{ад}(H) = \alpha_{11} - \alpha_{12}\lambda_{12}/(\lambda_{11} + \kappa_\Phi), \quad (7.29)$$

$$\kappa_{ад}(H) = \lambda_{11} + \kappa_\Phi + \lambda_{12}^2/(\lambda_{11} + \kappa_\Phi). \quad (7.30)$$

4) *Эффект Риги — Ледюка* — поперечная разность температур, связанная с наличием градиента $\nabla_x T$, — определяется из условий $j_x = j_y = 0$, $w_y = 0$ и характеризуется коэффициентом S . Из (7.13) имеем

$$S = -\nabla_y T / H \nabla_x T = \lambda_{12} / H(\lambda_{11} + \kappa_\Phi). \quad (7.31)$$

5. *Связь между кинетическими коэффициентами.* Из формул (7.18) — (7.31) легко получить некоторые соотношения между гальваномагнитными и термомагнитными эффектами, не связанные с принципом симметрии кинетических коэффициентов и являющиеся следствием только гиротропии среды:

$$R_{ад} = R - \alpha(H)P, \quad (7.32)$$

$$\rho_{ад}(H) = \rho(H) - H^2 P Q, \quad (7.33)$$

$$Q_{ад} = Q + \alpha(H)S, \quad (7.34)$$

*) Отметим, что в некоторых работах Q определяют со знаком плюс, т. е. $Q = E_y / H \nabla_x T$. Но мы везде будем иметь в виду определение (7.25).

$$\alpha_{ад}(H) = \alpha(H) - H^2QS, \quad (7.35)$$

$$\kappa_{ад}(H) = \kappa(H)(1 + H^2S^2). \quad (7.36)$$

Для вывода добавочных связей между рассматриваемыми явлениями необходимо привлечь соотношение Кельвина (7.8), вытекающее из принципа симметрии кинетических коэффициентов (7.2) — (7.4).

Тогда в силу (7.8) и вышеприведенных определений получаем

$$B\kappa(H) = T\alpha(H), \quad (7.37)$$

$$P\kappa(H) = TQ, \quad (7.38)$$

$$B_{ад}\kappa_{ад}(H) = T\alpha_{ад}(H). \quad (7.39)$$

Имеются и другие соотношения, но они не вытекают из общих соображений симметрии кинетических коэффициентов, а основываются на частных моделях. Так, например, из электронной теории металлов для сферически изоэнергетической поверхности следует [3, 4], что

$$R = \rho S_e, \quad (7.40)$$

где S_e — коэффициент Риги — Ледюка без учета фоновой теплопроводности.

Физический смысл (7.40) заключается в том, что в заданном поперечном магнитном поле угол вращения эквипотенциальных линий (эффект Холла) равен углу вращения изотермических линий (эффект Риги — Ледюка).

Равенство (7.38) совместно с (7.40) дает

$$RQ/PS_e = \rho\kappa/T. \quad (7.41)$$

Для металлов, в которых тепло переносится главным образом электронами проводимости ($\kappa_f \ll \kappa_{эл}$), это отношение равняется числу Лоренца $L = (\pi^2/3)(k_0/e)^2$ и (7.41) представляет собой обобщенный закон Видемана — Франца.

§ 8. Кинетическое уравнение и условия его применимости

1. Неравновесная функция распределения. Электроны проводимости*) в состоянии термодинамического равновесия описываются равновесной функцией распределения Ферми — Дирака (4.1). При наличии внешнего электрического поля, градиента температуры или концентрации и других воздействий электронный газ находится в неравновесном состоянии, поэтому не может быть описан равновесной функцией распределения $f_0(\mathbf{k})$. В квазиклассическом приближении и в неравновесном случае можно ввести функцию распределения $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$, придавая ей физический смысл: локальная концентрация электронов вблизи точки \mathbf{r} в

*) Для определенности здесь мы будем говорить об электронах проводимости. Аналогично можно рассмотреть и дырочный газ.

момент времени t , находящихся в состоянии k . Зная неравновесную функцию распределения $f(k, r, t)$, можно вычислить плотности тока

$$j(r, t) = -\frac{2e}{V} \sum_k v(k) f(k, r, t) = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int v(k) f(k, r, t) dk \quad (8.1)$$

и потока тепловой энергии

$$w(r, t) = \frac{2}{V} \sum_k (\epsilon(k) - \zeta) v(k) f(k, r, t) = \\ = \frac{2}{(2\pi)^3} \int (\epsilon(k) - \zeta) v(k) f(k, r, t) dk, \quad (8.2)$$

что дает возможность найти явный вид уравнения переноса (7.1). В выражениях (8.1) и (8.2) множитель 2 появляется из-за спина электрона, $v(k)$ — скорость электрона (1.8) в состоянии k с энергией $\epsilon(k)$, ζ — химический потенциал электронного газа. Если в (8.1) и (8.2) $f(k, r, t)$ заменить $f_0(k) = f_0(\epsilon(k))$, то, в силу четности энергии $\epsilon(k) = \epsilon(-k)$, нечетности скорости $v(-k) = -v(k)$, электрический ток и поток энергии равняются нулю, т. е. в равновесном состоянии в системе отсутствуют всякие токи и потоки.

Для того чтобы вычислить j и w , необходимо знать неравновесную функцию распределения $f(k, r, t)$, которую можно найти из кинетического уравнения Больцмана.

2. Кинетическое уравнение. По определению неравновесная функция распределения $f(k, r, t)$ есть число электронов, находящихся в момент времени t в единице объема около точки r и имеющих волновой вектор k . Кроме $(\partial f/\partial t)$, это число может изменяться благодаря следующим трем физическим процессам: *диффузии*, связанной с градиентом температуры или концентрации и приводящей к изменению r ; *ускорению* внешними полями, приводящему к изменению волнового вектора электрона k ; *рассеянию* электрона на фононах или других дефектах решетки, также приводящему к изменению k .

Суммарное действие всех этих трех процессов должно равняться изменению функции распределения за единицу времени, т. е. мы можем написать

$$\partial f/\partial t = (\partial f/\partial t)_{\text{дифф}} + (\partial f/\partial t)_{\text{поле}} + (\partial f/\partial t)_{\text{расс.}} \quad (8.3)$$

Это и есть символическая запись кинетического уравнения, где члены на правой стороне соответствуют скорости изменения за счет вышеуказанных процессов. Чтобы найти явный вид кинетического уравнения (8.3), рассмотрим эти процессы в отдельности.

При наличии градиента температуры или концентрации в проводнике имеет место диффузия, поэтому носители заряда приходят в область пространства вблизи точки r и уходят из нее.

Нас интересует изменение концентрации электронов с волновым вектором \mathbf{k} . Они обладают скоростью $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})$. Концентрация таких \mathbf{k} -электронов вблизи точки \mathbf{r} в момент времени t есть $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$. Через промежуток времени Δt эти электроны будут находиться около точки $\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}$ с концентрацией $f(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}, t + \Delta t)$. Согласно теореме Лиувилля об инвариантности фазового объема системы концентрация носителей тока в окрестности точки \mathbf{r} в момент времени t равна концентрации их в окрестности точки $\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}$ в момент времени $t + \Delta t$, т. е.

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = f(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}, t + \Delta t). \quad (8.4)$$

Разлагая правую часть около точки \mathbf{r} , учитывая $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) \Delta t$ и стремясь $\Delta t \rightarrow 0$, для скорости изменения неравновесной функции распределения из-за диффузии получим

$$(\partial f / \partial t)_{\text{дифф}} = -\mathbf{v}(\mathbf{k}) \partial f / \partial \mathbf{r} = -\mathbf{v}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{r}} f. \quad (8.5)$$

Внешняя сила \mathbf{F} , ускоряя электроны, согласно (1.9), изменяет их волновой вектор $\mathbf{k} = \hbar^{-1} \mathbf{F}$ и, следовательно, число \mathbf{k} -электронов вблизи точки \mathbf{r} . Если повторить эти рассуждения и для \mathbf{k} -пространства, то можно написать

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = f(\mathbf{k} + \Delta \mathbf{k}, \mathbf{r}, t + \Delta t), \quad (8.6)$$

что для скорости изменения $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ благодаря действию внешней силы \mathbf{F} дает

$$(\partial f / \partial t)_{\text{поле}} = -\dot{\mathbf{k}} (\partial f / \partial \mathbf{k}) = -\hbar^{-1} \mathbf{F} \nabla_{\mathbf{k}} f. \quad (8.7)$$

Допустим, проводник находится во внешних электрическом \mathbf{E}_0 и магнитном \mathbf{H} полях. Тогда на электрон с зарядом $(-e)$ действует сила Лоренца

$$\mathbf{F} = -e \left(\mathbf{E}_0 + \frac{1}{c} [\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{H}] \right), \quad (8.8)$$

где $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})$ — скорость электрона, c — скорость света.

Кинетическое уравнение (8.3) для электронов проводимости с учетом (8.5), (8.7) и (8.8) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} \left(\mathbf{E}_0 + \frac{1}{c} [\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{H}] \right) \nabla_{\mathbf{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{расс}}. \quad (8.9)$$

Для того чтобы найти $(\partial f / \partial t)_{\text{расс}}$, введем величину $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — вероятность в единицу времени перехода электрона из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' в результате рассеяния на каком-нибудь дефекте решетки. Переходы из состояния \mathbf{k} во всевозможные \mathbf{k}' -состояния будут иметь место, если в \mathbf{k} -состоянии есть электрон, а \mathbf{k}' -состояния вакантны (принцип Паули). Поэтому из-за переходов $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ число \mathbf{k} -электронов за единицу времени уменьшается на величину $\sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}) (1 - f(\mathbf{k}'))$ — уход из \mathbf{k} -состоя-

ния. Число k -электронов, т. е. функция $f(k, r)$, увеличивается за счет переходов электронов из всевозможных k' -состояний в k -состояние на величину $\sum_{k'} W(k', k) f(k') (1 - f(k))$ — приход в k -состояние. Разность чисел приходящих и уходящих электронов дает скорость изменения неравновесной функции распределения $(\partial f / \partial t)_{\text{расс}} = \sum_{k'} \{W(k', k) f(k') [1 - f(k)] -$

$$- W(k, k') f(k) [1 - f(k')]\}. \quad (8.10)$$

В дальнейшем будем рассматривать стационарный случай, когда внешние поля от времени явно не зависят и, следовательно, $\partial f / \partial t = 0$. В стационарном случае из (8.9) и (8.10) получим явный вид кинетического уравнения для электронов проводимости в электрическом и магнитном полях

$$v(k) \nabla_r f - (e/\hbar) (E_0 + (1/c) [v(k) \cdot H]) \nabla_k f = \\ = \sum_{k'} \{W(k', k) f(k') [1 - f(k)] - W(k, k') f(k) [1 - f(k')]\}. \quad (8.11)$$

Если от суммирования по k' перейдем к интегрированию, то увидим, что кинетическое уравнение (8.11) представляет собой интегро-дифференциальное уравнение. Функция $W(k, k')$, входящая в столкновительную часть кинетического уравнения, зависит от природы взаимодействия электронов проводимости с рассеивателем и для конкретного механизма определяется квантовой теорией рассеяния.

Таким образом, основная задача теории явлений переноса — вычисление токов (8.1) и (8.2) — сводится к двум самостоятельным задачам: вычислению $W(k, k')$ для различных механизмов рассеяния и решению кинетического уравнения (8.11) для нахождения неравновесной функции распределения $f(k, r)$. Разумеется, эти задачи в общем виде не решаются. Приближенные решения кинетического уравнения будут рассмотрены в последующих параграфах, а пока мы остановимся на критериях применимости самого кинетического уравнения.

3. Условия применимости кинетического уравнения. Некоторые аспекты этого вопроса обсуждались в книгах [4—6]. Как из определения неравновесной функции распределения $f(k, r)$, так и из вывода кинетического уравнения (8.9) видно, что оно справедливо только в квазиклассическом случае, когда имеет место понятие траектории и состояния электронного газа задаются в фазовом пространстве. Условие квазиклассичности [7, 8] налагает ограничение на обобщенную силу — градиент электрохимического потенциала $-\nabla(\phi_0 - (\xi/e))$, а также на величину напряженности магнитного поля H , и определяет предел применимости кинетического уравнения. На нем остановимся более подробно.

Условие квазиклассичности гласит: свойства свободной системы могут быть рассмотрены классической механикой, если

длины дебройлевской волны частиц λ малы по сравнению с размерами L , характерными для данной задачи, т. е. $\lambda \ll L$. Если система не свободна, а на нее действует некоторая сила F , то условие квазиклассичности имеет вид [7]

$$(\lambda/2\pi) |d\lambda/dx| \ll \lambda, \quad (8.12)$$

т. е. длина волны электрона λ должна мало меняться на протяжении расстояний порядка ее самой. Учитывая, что $\lambda = h/p(x)$, где h — постоянная Планка, $p(x)$ — импульс электрона, условие квазиклассичности (8.12) может быть записано [7] как

$$(mh/p^3) |F| \ll 1; \quad (8.13)$$

здесь m — эффективная масса электрона проводимости, F — сила, действующая на электрон. В общем случае, когда имеются динамическое (электрическое поле) и статистическое (градиент температуры или концентрации) возмущения, сила F определяется градиентом электрохимического потенциала:

$$F = e\nabla(\varphi_0 - \xi/e), \quad (8.14)$$

где φ_0 — электростатический, а ξ — химический потенциалы.

С учетом соотношений $h/p = \lambda$ и $p^2 \approx m\bar{\epsilon}$ (8.13) превращается в условие применимости кинетического уравнения в общем виде

$$\lambda |F| \ll \bar{\epsilon}, \quad (8.15)$$

имеющее явный физический смысл: энергия, приобретенная электроном благодаря действию возмущающей силы F на расстоянии λ , должна быть намного меньше средней энергии электрона $\bar{\epsilon}$.

Из (8.15) для электрического поля E_0 легко получим условие

$$\lambda e E_0 \ll \bar{\epsilon}, \quad (8.16)$$

при котором применимо кинетическое уравнение. В невырожденных полупроводниках $\bar{\epsilon} \approx k_0 T$, а в вырожденных полупроводниках $\bar{\epsilon} \approx \xi_F$. При $T = 100$ К и $\lambda = 10^{-7}$ см для невырожденных полупроводников из (8.16) получим $E_0 \ll 10^5$ В/см. Таким образом, кинетическое уравнение справедливо вплоть до очень сильных электрических полей.

Условие (8.15) с учетом (8.14) в случае неоднородных полупроводников определяет также и градиент химического потенциала

$$(\partial\xi/\partial x)\lambda \ll \bar{\epsilon}, \quad (8.17)$$

при котором справедливо кинетическое уравнение. Если неоднородность связана с наличием градиента температуры, то (8.17) имеет вид

$$(\partial\xi/\partial T)\lambda \nabla T \ll \bar{\epsilon}. \quad (8.17')$$

Находя $\partial \xi / \partial T$ из (4.46), а также из (4.26), соответственно получим для невырожденного электронного газа

$$|\xi / k_0 T - 3/2 |\lambda| |\nabla T| \ll T \quad (8.18)$$

и для вырожденного электронного газа

$$(k_0 T / \zeta_F) \lambda |\nabla T| \ll T_0, \quad (8.19)$$

где $T_0 = \zeta_F / k_0$ — температура вырождения электронного газа. Условия, аналогичные (8.17) — (8.19), из (8.17) можно получить также и для градиента концентрации ∇n .

Теперь рассмотрим ограничения, налагаемые на величину напряженности магнитного поля H , для применения кинетического уравнения. Как известно, в однородном магнитном поле под действием силы Лоренца $F = (e/c) v_{\perp} H$ электрон движется по винтовой линии с осью, параллельной магнитному полю, и с радиусом

$$r = v_{\perp} / \Omega, \quad (8.20)$$

где v_{\perp} — составляющая скорости в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, а

$$\Omega = eH / mc \quad (8.21)$$

— циклическая частота вращения электрона в этой плоскости, которую называют *циклотронной частотой*, m — эффективная масса электрона.

Подставляя силу Лоренца $F = (e/c) v_{\perp} H$ в общее условие (8.15) и учитывая $\lambda \approx \hbar / mv_{\perp}$, получим критерий применимости кинетического уравнения в магнитном поле для невырожденных полупроводников

$$\hbar \Omega \ll k_0 T \quad \text{или} \quad e \hbar H / mc \ll k_0 T \quad (8.22)$$

и для вырожденных полупроводников

$$\hbar \Omega \ll \zeta_F \quad \text{или} \quad e \hbar H / mc \ll \zeta_F. \quad (8.23)$$

Легко видеть, что эти условия могут быть переписаны и в виде

$$r \gg \lambda. \quad (8.22')$$

В случае вырожденных полупроводников в (8.22') λ следует заменить длиной волны для электронов на поверхности Ферми $\lambda_F \approx \hbar / mv_F$.

Последнее неравенство есть не что иное, как условие квазиклассичности: кинетическое уравнение применимо в магнитных полях, при которых длина волны λ намного меньше радиуса циклотронной орбиты электрона r .

Квантовомеханическое рассмотрение движения носителей тока в магнитном поле показывает, что их движение в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, квантуется, причем энергетическое расстояние между соседними дискретными уровнями (уровнями Ландау) равно $\hbar \Omega$ (см. гл. 6). В магнитных полях, удовлетворяющих (8.22) или (8.23), квантование спектра становится несущественным. Такие магнитные поля на-

зываются *классическими* или *неквантуемыми* магнитными полями. В этой области магнитных полей при расчете кинетических эффектов можно применять кинетическое уравнение.

При достаточно сильных магнитных полях и низких температурах условия (8.22) и (8.23) могут не выполняться, а иметь место $\hbar\Omega \gg k_0T$ или $\hbar\Omega \gg \zeta_F$ (то же самое, при $\lambda \gg r$), и дискретность спектра становится важной. Такие магнитные поля называются *квантуемыми*. В квантуемых магнитных полях кинетическое уравнение неприменимо, и задачу следует решать методами квантовой теории явлений переноса (см. гл. 6).

Имеется еще одно условие, ограничивающее область применимости кинетического уравнения (8.11), связанное с процессом рассеяния носителей тока на различных дефектах решетки. Если через Δt обозначим продолжительность рассеяния (время столкновения с дефектами), то, согласно принципу неопределенности ($\Delta\varepsilon \Delta t \geq \hbar$), в энергии появляется неопределенность $\Delta\varepsilon \geq \hbar/\Delta t$. Пользоваться функцией распределения, которая должна сильно меняться в интервале энергий порядка k_0T , можно только в том случае, если $\Delta\varepsilon < k_0T$. Это означает, что длительность столкновения должна быть относительно большой: $\Delta t \gg \hbar/k_0T$. С другой стороны, время столкновения Δt не может быть слишком большим, так как при написании правой части кинетического уравнения (8.11) предполагается, что взаимодействие носителей тока с кристаллической решеткой происходит в виде отдельных актов рассеяния с вероятностью $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ и это взаимодействие не изменяет энергию электрона (носители тока в основном в кристалле свободно движутся, изредка рассеиваясь на его дефектах). Поэтому Δt должно быть меньше, чем время свободного пробега τ (время релаксации; см. § 9). В результате мы приходим к неравенству

$$\tau \gg \hbar/k_0T, \quad (8.24)$$

которое есть условие малости продолжительности столкновения по сравнению со временем между двумя последовательными столкновениями.

Поскольку подвижность носителей тока $u = e\bar{v}\tau/m$, то критерий (8.24) можно представить в следующем виде:

$$u \gg e\hbar/mk_0T. \quad (8.25)$$

Указанное условие хорошо выполняется для широкого класса полупроводников, за исключением веществ с аномально малой подвижностью носителей тока.

Критерий (8.24) можно записать и в другом виде. Если умножить обе его части на среднюю скорость носителей тока \bar{v} и учесть, что $k_0T/\bar{v} = \bar{p}$, а $\hbar/\bar{p} \approx \lambda$, то получим

$$\bar{l} \gg \lambda, \quad (8.26)$$

где $\bar{l} = \bar{v}\tau$ — средняя длина свободного пробега. Тогда можно

утверждать, что кинетическое уравнение применимо, если средняя длина свободного пробега носителей тока намного больше их длины волны де Бройля.

§ 9. Решение кинетического уравнения для произвольной сферически-симметричной зоны в приближении времени релаксации

Рассмотрим полупроводник с произвольной сферически-симметричной зоной, т. е. предположим, что энергия носителей тока ε является произвольной функцией модуля волнового вектора \mathbf{k} , т. е.

$$\varepsilon(k_x, k_y, k_z) = \varepsilon(k). \quad (9.1)$$

Этим свойством обладает закон дисперсии электронов проводимости во многих полупроводниковых соединениях, таких как $A^{III}B^V$ и $A^{IV}B^{VI}$ (см. § 3).

1. Время релаксации. Сначала преобразуем столкновительный член кинетического уравнения (8.11). Используем для этого принцип детального равновесия, согласно которому в состоянии равновесия, когда $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = f_0(\mathbf{k})$, число приходящих электронов в \mathbf{k} -состояние из \mathbf{k}' -состояния равно числу уходящих из \mathbf{k} - в \mathbf{k}' -состояние за единицу времени, т. е.

$$W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_0(\mathbf{k}') [1 - f_0(\mathbf{k})] = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_0(\mathbf{k}) [1 - f_0(\mathbf{k}')]. \quad (9.2)$$

Используя явный вид для функции распределения Ферми — Дирака (4.1), из (9.2) получим

$$\frac{W(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} = \exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k})}{k_0 T}\right). \quad (9.3)$$

При $\varepsilon(\mathbf{k}) < \varepsilon(\mathbf{k}')$, как видно из (9.3), $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') < W(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, т. е. рассеяние $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ с увеличением энергии менее вероятно, чем с уменьшением ее. Меньшую вероятность перехода из состояний с малой энергией компенсирует большая их заселенность $f_0(\mathbf{k})$, что обеспечивает детальное равновесие.

Решение кинетического уравнения (8.11) представим в виде

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + f_1(\mathbf{k}), \quad (9.4)$$

где $f_0(\mathbf{k}) \equiv f_0(\varepsilon(\mathbf{k}))$ — равновесная функция (4.1), а $f_1(\mathbf{k})$ — неравновесная добавка, подлежащая определению. Очевидно, $f_1(\mathbf{k})$ является нечетной функцией \mathbf{k} , тогда как $f_0(\mathbf{k})$ есть четная функция \mathbf{k} . Кроме того, $f_1(\mathbf{k})$ должна быть пропорциональна электрическому полю и градиенту температуры, так как эти силы приводят к отклонению от равновесного распределения электронов проводимости в \mathbf{k} -пространстве.

Почти во всех реальных случаях отклонение от равновесия мало, т. е.

$$|f_1| = |f - f_0| \ll f_0. \quad (9.5)$$

При отсутствии квантования, когда имеет место неравенство (8.22), вероятность перехода $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ от магнитного поля не зависит. Разумно предположить, что эта функция не зависит также от электрического поля и градиента температуры, т. е. $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — одна и та же величина как в равновесном, так и в неравновесном состоянии. Тогда можно воспользоваться соотношением детального равновесия (9.2) при преобразовании члена рассеяния (8.10) в кинетическом уравнении.

Подставим (9.4) в (8.10) и используем (9.2). Учитывая (9.5), ограничимся линейными по $f_1(\mathbf{k})$ членами. В результате получим

$$(\partial f / \partial t)_{\text{расс}} = -f_1(\mathbf{k}) / \tau(\mathbf{k}), \quad (9.6)$$

где введено обозначение

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left\{ \frac{1 - f_0(\varepsilon')}{1 - f_0(\varepsilon)} - \frac{f_0(\varepsilon)}{f_0(\varepsilon')} \frac{f_1(\mathbf{k}')}{f_1(\mathbf{k})} \right\}. \quad (9.7)$$

Величина $\tau(\mathbf{k})$ носит название *времени релаксации*, смысл которого можно выяснить следующим образом. Допустим, что система электронов проводимости выведена из равновесия внешними силами. Если в момент времени $t=0$ выключить внешнее поле $\mathbf{F}=0$ и аннулировать градиент температуры $\nabla_r f=0$, то неравновесная функция $f(\mathbf{k}, t)$ будет стремиться к равновесной $f_0(\mathbf{k})$. При этом $f(\mathbf{k}, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial f(\mathbf{k}, t)}{\partial t} + \frac{f(\mathbf{k}, t) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} = 0, \quad (9.8)$$

которое получается из (8.9) с учетом (9.6).

Из (9.8) имеем следующий закон изменения неравновесной функции:

$$(f - f_0)_t = (f - f_0)_{t=0} \exp(-t/\tau). \quad (9.9)$$

Отсюда видно, что время релаксации τ характеризует скорость восстановления равновесного состояния.

Подставляя (9.6) в правую часть (8.11), получим следующий простой вид кинетического уравнения:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) \nabla_r f - \frac{e}{\hbar} \left(\mathbf{E}_0 + \frac{1}{c} [\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{H}] \right) \nabla_{\mathbf{k}} f = - \frac{f - f_0}{\tau(\mathbf{k})}. \quad (9.10)$$

Таким образом, введением понятия времени релаксации интегро-дифференциальное уравнение (8.11) мы формально свели к дифференциальному уравнению (9.10) для неравновесной функции распределения f . Однако в общем случае это видимое упрощение кинетического уравнения (8.11). Действительно, в правую часть (9.10) через $\tau(\mathbf{k})$ (9.7) под знаком суммы (интеграла) входит отношение двух значений неизвестной функции f_1 . В том случае, когда отношение $f_1(\mathbf{k}')/f_1(\mathbf{k})$ не зависит ни от типа, ни от величины возмущения (электрического поля или градиента температуры), вызывающего отклонение функции распределения

от равновесной, величина $\tau(\mathbf{k})$ является характеристикой проводника и имеет разумный физический смысл.

2. Решение кинетического уравнения в отсутствие магнитного поля. В этом случае (9.10) имеет вид

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{r}} f - e \mathbf{E}_0 / \hbar \nabla_{\mathbf{k}} f = -(f - f_0) / \tau(\mathbf{k}), \quad (9.11)$$

из которого легко можно найти неравновесную функцию, если считать, что $\tau(\mathbf{k})$ не зависит от электрического поля и градиента температуры. Для этого подставим (9.4) в (9.11) и в левой части ограничимся функцией $f_0(\mathbf{k})$, предполагая, что при наличии градиента температуры равновесная функция $f_0(\mathbf{k})$ определяется локальной температурой $T(\mathbf{r})$ и химическим потенциалом $\zeta(\mathbf{r})$, т. е.

$$f_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \left[1 + \exp \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \zeta(\mathbf{r})}{k_0 T(\mathbf{r})} \right) \right]^{-1}. \quad (9.12)$$

Учитывая, что

$$\nabla_{\mathbf{k}} f_0(\mathbf{k}) = (\partial f_0 / \partial \varepsilon) \partial \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial \mathbf{k} = (\partial f_0 / \partial \varepsilon) \hbar \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (9.13)$$

и

$$\nabla_{\mathbf{r}} f_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = k_0 T (\partial f_0 / \partial \varepsilon) \nabla_{\mathbf{r}} ((\varepsilon - \zeta(\mathbf{r})) / k_0 T(\mathbf{r})), \quad (9.14)$$

в результате для неравновесной, но стационарной функции распределения $f(\mathbf{k})$ в линейном приближении по электрическому полю и градиенту температуры получим следующее выражение:

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - \tau(\mathbf{k}) (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \Phi_0(\varepsilon)) (\partial f_0 / \partial \varepsilon), \quad (9.15)$$

где

$$\Phi_0(\varepsilon) = -e \mathbf{E}_0 + k_0 T \nabla_{\mathbf{r}} \left(\frac{\varepsilon - \zeta}{k_0 T} \right) = -e \mathbf{E} - \frac{\varepsilon - \zeta}{k_0 T} k_0 \nabla T \quad (9.16)$$

— обобщенная возмущающая сила (динамическая и статистическая), вызывающая отклонение от равновесного распределения, в которой $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + (1/e) \nabla \zeta = -\nabla (\Phi_0 - (\zeta/e))$ — градиент электрохимического потенциала, Φ_0 — электростатический потенциал.

Теперь вернемся к выражению для времени релаксации. Подстановка (9.15) в (9.7) с учетом

$$f_0(\varepsilon) (1 - f_0(\varepsilon)) = -(1/k_0 T) (\partial f_0 / \partial \varepsilon) \quad (9.17)$$

дает следующее интегральное уравнение для определения величины $\tau(\mathbf{k})$:

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{1 - f_0(\varepsilon')}{1 - f_0(\varepsilon)} \left\{ 1 - \frac{\tau(\mathbf{k}')}{\tau(\mathbf{k})} \frac{(\mathbf{v}(\mathbf{k}') \cdot \Phi_0(\varepsilon'))}{(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \Phi_0(\varepsilon))} \right\}. \quad (9.18)$$

Поскольку мы рассматриваем сферически-симметричные зоны, то рассеяние должно быть изотропным, т. е. вероятность перехода $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ не зависит от \mathbf{k} и \mathbf{k}' в отдельности, а зависит только от величины \mathbf{k} и \mathbf{k}' и угла между ними, т. е.

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}', (\mathbf{k}\mathbf{k}')). \quad (9.19)$$

При изотропном рассеянии, очевидно, время релаксации τ будет зависеть только от величины $k = |\mathbf{k}|$. Кроме того, для изотропного закона дисперсии (9.1) направления скорости электрона \mathbf{v} и волнового вектора \mathbf{k} совпадают и, согласно (1.8),

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m(k)}, \quad (9.20)$$

где $m(k)$ — эффективная масса электрона (1.12).

Учтем эти следствия изотропности зоны и в (9.18) перейдем к сферическим координатам. Если полярную ось направим вдоль \mathbf{k} и полярные углы векторов \mathbf{k}' и $\Phi_0(\epsilon')$ обозначим соответственно через (θ, φ) и (α, β) , то, как известно,

$$\cos(\mathbf{k}', \Phi_0(\epsilon')) = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta). \quad (9.21)$$

Тогда из (9.18) легко получим

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{1 - f_0(\epsilon')}{1 - f_0(\epsilon)} \left\{ 1 - \frac{\tau(k')}{\tau(k)} \frac{(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \Phi_0(\epsilon'))}{(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \Phi_0(\epsilon))} \frac{\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}')}{v^2(\mathbf{k})} \right\}. \quad (9.22)$$

Отметим, что это интегральное соотношение, из которого в принципе можно определить $\tau(k)$, получено в двух предположениях: малость отклонения от равновесного распределения (9.5) и изотропность закона дисперсии (9.1). Однако (9.22) является неудобным соотношением, так как оно содержит возмущающую равновесие силу $\Phi_0(\epsilon)$ (электрическое поле \mathbf{E} и градиент температуры ∇T) (9.16). Следовательно, $\tau(k)$, найденное из (9.21), не будет универсальным, а будет зависеть от типа и величины возмущения (\mathbf{E} и ∇T). Поэтому необходимо сделать еще одно допущение. Это относится к характеру рассеяния. Если предположить, что рассеяние носителей тока на дефектах решетки чисто упругое $\epsilon(\mathbf{k}') = \epsilon(k)$, следовательно, $k = k'$, т. е. носители тока при рассеянии с решеткой обмениваются только импульсами, то (9.22) сильно упрощается и $\tau(k)$ становится универсальной функцией, характеризующей релаксацию системы. В этом случае скорость релаксации, т. е. $\tau^{-1}(k)$, не зависит от того, какая сила (\mathbf{E} или ∇T) отклонила распределение от равновесного, а характеризует сам проводник. Учитывая упругость рассеяния $\epsilon' = \epsilon$, а также (9.21), из (9.22) получим простое выражение для времени релаксации*)

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left(1 - \frac{\mathbf{k} \mathbf{k}'}{k^2} \right). \quad (9.23)$$

*) Отметим, что время релаксации можно ввести и в случае неупругого рассеяния, если вероятность перехода удовлетворяет условию $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$, что имеет место при рассеянии на неполярных оптических фононах без учета дисперсии (см. § 11, п. 3). Этот вывод непосредственно следует из (9.22).

Это простое выражение для времени релаксации справедливо при выполнении трех условий: малости отклонения от равновесия (9.5), изотропности спектра (9.1) и рассеяния (9.19), а также упругости рассеяния $\epsilon' = \epsilon$. В тех случаях, когда одновременно выполняются эти условия, нахождение неравновесной функции распределения сводится к двум самостоятельным задачам: вычислению $\tau(k)$ из (9.23) и решению дифференциального кинетического уравнения (9.10).

Расчету $\tau(k)$ для различных механизмов рассеяния будут посвящены § 10 и 11. Здесь же мы приведем решение кинетического уравнения (9.10) в приближении времени релаксации.

При отсутствии магнитного поля ($H=0$) решение кинетического уравнения (9.10) мы нашли. Оно имеет вид (9.15). Прежде чем перейти к решению (9.10) в магнитном поле, используя (9.15), мы найдем ограничения, налагаемые на электрическое поле и градиент температуры, для выполнения линейного приближения или условия малости отклонения функции распределения $f(k)$ от равновесной $f_0(k)$. Из (9.15) и (9.16) только в электрическом поле имеем

$$f(k) = f_0(k) - e\tau(k)(vE_0)(-\partial f_0/\partial \epsilon). \quad (9.24)$$

Для невырожденных полупроводников $f_0(\epsilon) = \exp((\zeta - \epsilon)/k_0T)$, и из (9.24) получаем явный вид условия малости отклонения (9.5), т. е.

$$\bar{l}eE_0 \ll k_0T, \quad (9.25)$$

где $\bar{l} = \bar{v}\bar{\tau}$ — средняя длина свободного пробега.

Из (9.25) видно, что энергия, получаемая электроном от электрического поля на длине свободного пробега, должна быть намного меньше, чем средняя тепловая энергия k_0T , чтобы выполнялось линейное по E_0 приближение или неравновесная добавка $f_1 \ll f_0$. Сравнение (9.25) с условием применимости кинетического уравнения (8.16) показывает, что поле, при котором справедливо линейное приближение, в λ/\bar{l} раз должно быть слабее. Поскольку в невырожденных полупроводниках $\lambda/\bar{l} \approx 10^{-1}$, то линейное приближение справедливо до довольно больших полей $E_0 \approx 10^4$ В/см.

Учитывая $k_0T \sim m\bar{v}^2$, условие (9.25) можно переписать в виде

$$v_d \ll \bar{v}, \quad (9.26)$$

где $v_d = (e\tau/m)E_0$ — дрейфовая, \bar{v} — средняя тепловая скорости электронов.

В сильно вырожденных полупроводниках вместо (9.25), (9.26) и (9.24) получаем следующие неравенства:

$$l(\zeta)eE_0 \ll \zeta \quad \text{или} \quad v_d \ll v(\zeta), \quad (9.27)$$

где $l(\zeta) = \tau(\zeta)v(\zeta)$ — длина свободного пробега электронов на границе Ферми ζ , $v_d = (e\tau(\zeta)/m(\zeta))E_0$ — дрейфовая скорость, $v(\zeta)$ — скорость электронов на поверхности Ферми.

Теперь рассмотрим условия, налагаемые на градиент температуры. При наличии градиента температуры из (9.15) и (9.16) получим

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - \tau(k) \frac{\varepsilon - \xi}{T} (\mathbf{v} \nabla T) \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right). \quad (9.28)$$

Для невырожденных полупроводников (9.28) и (9.5) дают следующее неравенство, определяющее условие применимости линейного приближения решения по градиенту температуры*):

$$\left| \frac{\xi}{k_0 T} - 1 \right| |\bar{l}| |\nabla T| \ll T. \quad (9.29)$$

Поскольку в невырожденных полупроводниках обычно $|\xi/k_0 T - 1| \sim 10$, то можно сказать, что для выполнения условия малости отклонения от равновесного распределения (9.5) изменение температуры на длине $\sim 10\bar{l}$ должно быть намного меньше, чем сама температура T .

В заключение этого пункта, следуя [9, 10], продемонстрируем отличие стационарного распределения от равновесного распределения в \mathbf{k} -пространстве. Для этого решение (9.15) представим в виде

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - \frac{\tau(k)}{\hbar} \Phi_0(\varepsilon) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} \right). \quad (9.30)$$

Отдельно рассмотрим действие электрического поля и градиента температуры. При наличии электрического поля $\Phi_0 \approx -e\mathbf{E}_0$ и, согласно (9.30), стационарное распределение $f(\mathbf{k})$ связано с равновесным распределением следующим образом:

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + \frac{\tau(k)}{\hbar} e\mathbf{E}_0 \left(\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} \right) \quad (9.31)$$

или же

$$f(\mathbf{k}) \approx f_0 \left(\mathbf{k} + \frac{\tau(k)}{\hbar} e\mathbf{E}_0 \right) = f_0(\mathbf{k} - \Delta\mathbf{k}). \quad (9.32)$$

Видно, что стационарное распределение $f(\mathbf{k})$ тождественно равновесному распределению $f_0(\mathbf{k})$, только начало координат в \mathbf{k} -пространстве сдвинуто из точки $\mathbf{k} = 0$ в точку $\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k} = -\tau e\mathbf{E}_0/\hbar$. Схематически $f(\mathbf{k})$ и $f_0(\mathbf{k})$ показаны на рис. 16 в случае вырожденного электронного газа. Этот результат понятен с точки зрения влияния электрического поля на каждое квантовое состояние. Действительно, из (1.9) следует, что скорость изменения \mathbf{k} под действием силы $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}_0$ одинакова для всех электронов. Поэтому распределение в \mathbf{k} -пространстве, не меняя свою форму, в поле будет перемещаться с постоянной скоростью $d\mathbf{k}/dt = -e\mathbf{E}_0/\hbar$. Однако процессы рассеяния, которые стараются

*). Ср. с условием применимости самого кинетического уравнения (8.18).

вернуть систему в состояние равновесия, ограничивают это перемещение величиной $\Delta k = -eE_0\tau/\hbar$ и устанавливают стационарное — не зависящее от времени — распределение электронов в k -пространстве (штриховая линия на рис. 16; а). Стационарное распределение $f(k)$, как видно из рис. 16, в отличие от равновесного распределения $f_0(k)$, относительно точки $k=0$ несимметрично.

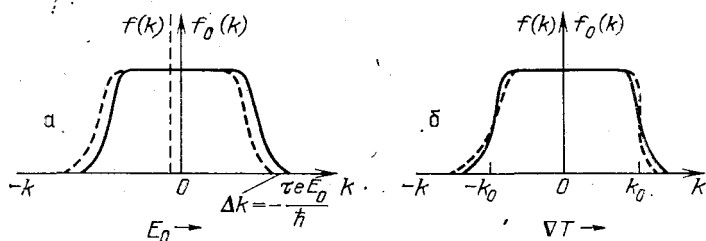


Рис. 16. Равновесная (сплошная линия) и неравновесная, но стационарная (штриховая линия) функции распределения для вырожденного электронного газа в k -пространстве: а) при наличии электрического поля; б) при наличии градиента температуры

Поэтому это состояние соответствует конечному постоянному току в проводнике.

Однако отметим, что средняя энергия системы электронов в стационарном состоянии равна энергии в равновесном состоянии. На самом деле, используя (9.31), имеем

$$\int \varepsilon(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = \int \varepsilon(\mathbf{k}) f_0(\mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (9.33)$$

так как $\varepsilon(\mathbf{k})$ есть четная функция \mathbf{k} , второе слагаемое (9.31) не дает вклада в интеграл (9.33). Физически это связано с тем, что электроны, движущиеся в направлении электрического поля, ускоряясь, уменьшают (из-за отрицательного заряда) свой волновой вектор на величину Δk , на такую же величину увеличивают свой k электроны, движущиеся против поля (см. рис. 16, а). Поскольку $\varepsilon(\mathbf{k})$ является четной функцией \mathbf{k} , то в среднем энергия системы электронов не меняется.

При наличии градиента температуры $\Phi_0(\varepsilon) = -((\varepsilon - \zeta)/T)\nabla T$ и, согласно (9.30), стационарное распределение

$$f(\mathbf{k}) = f_0(k) + \frac{(\varepsilon - \zeta)\tau(k)}{\hbar} \frac{\nabla T}{T} \left(\frac{\partial f_0}{\partial k} \right), \quad (9.34)$$

которое можно представить в виде

$$f(\mathbf{k}) \approx f_0\left(\mathbf{k} + \frac{(\varepsilon - \zeta)\tau(k)}{\hbar} \frac{\nabla T}{T}\right) = f_0(\mathbf{k} - \Delta k), \quad (9.35)$$

где

$$\Delta k = -\frac{(\varepsilon - \zeta)\tau}{T\hbar} \nabla T. \quad (9.36)$$

В случае вырожденного электронного газа с параболическим законом дисперсии $\zeta = \hbar^2 k_0^2 / 2m$ (при учете формулы $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$) из (9.36) имеем

$$\Delta \mathbf{k} = - \frac{\hbar \tau}{2mT} (k^2 - k_0^2) \nabla T; \quad (9.37)$$

здесь m — эффективная масса электрона проводимости, k_0 — волновой вектор электрона на поверхности Ферми.

Функция (9.35) формально похожа на (9.32). Однако, в отличие от электрического поля, при наличии температурного градиента смещение $\Delta \mathbf{k}$ стационарного распределения относительно равновесного распределения $f_0(\mathbf{k})$ зависит от величины \mathbf{k} . В частности, для $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ $\Delta \mathbf{k} = 0$ и $f(\mathbf{k}_0) = f_0(\mathbf{k}_0)$. Для электронов, у которых $k > k_0$, смещение распределения $\Delta \mathbf{k} < 0$, если электрон движется вдоль градиента температуры ∇T , и $\Delta \mathbf{k} > 0$, если электрон движется против ∇T , и, наоборот, для электронов с волновым вектором $k < k_0$ смещение $\Delta \mathbf{k} > 0$ при движении вдоль градиента и $\Delta \mathbf{k} < 0$, если электроны движутся против ∇T . Схематически равновесное $f_0(\mathbf{k})$ и стационарное $f(\mathbf{k})$ распределения вырожденного электронного газа при наличии градиента температуры показаны на рис. 16, б. Как видно из этого рисунка, при наличии градиента температуры ширина размытия границы Ферми в распределении электронов, движущихся против ∇T , становится больше (левая часть рис. 16, б), для электронов, движущихся вдоль ∇T , ширина размытия границы Ферми меньше (правая часть рис. 16, б), чем ширина без градиента температуры, одинаковой для всех электронов.

Этот результат можно понять из следующих наглядных соображений. Электрон в кристалле, находящийся в точке \mathbf{r} и движущийся в направлении увеличения температуры (в направлении ∇T), должен был бы испытать свое последнее столкновение в точке, где температура меньше $T(\mathbf{r})$ на величину $\tau \nabla T$. Отсюда следует, что ширина распределения для указанных электронов будет относительно меньшей. Аналогично, электроны в точке \mathbf{r} , движущиеся против ∇T , должны претерпеть последнее столкновение при более высокой температуре. Поэтому ширина распределения для этих электронов должна быть больше средней ширины.

Таким образом, градиент температуры нарушает симметричное распределение электронов относительно точки $\mathbf{k} = 0$ (см. рис. 16, б) и тем самым вызывает конечный электрический ток, пропорциональный ∇T .

Отметим, что только для вырожденного электронного газа, как видно из рис. 16, характеры отклонения распределения от равновесного различны в зависимости от того, чем эти отклонения вызваны — электрическим полем или градиентом температуры. Когда электронный газ невырожден, $(\epsilon - \zeta) > 0$. Поэтому, как видно из (9.32) и (9.35), в этом случае, в отличие от вырожденного случая, смещение стационарного распределения электро-

нов относительно равновесного носит одинаковый характер при возмущении электрическим полем и температурным градиентом: в обоих случаях смещение происходит в противоположном направлении действия E_0 и ∇T (рис. 17).

3. Решение кинетического уравнения в произвольном неквад- ратном магнитном поле. Мы показали, что в отсутствие магнитного поля в τ -приближении решение кинетического уравнения (9.10) имеет вид (9.15). В этом решении вектор $\Phi_0(\epsilon)$ имеет

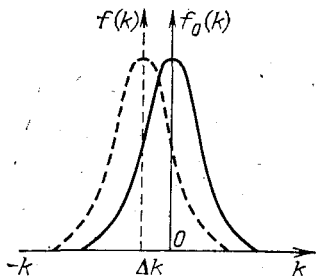


Рис. 17. Равновесная (сплошная линия) и стационарная (штриховая линия) функции распределения для невырожденного электронного газа в k -пространстве

явный физический смысл: обобщенная сила, возмущающая равновесное распределение электронов в k -пространстве. Очевидно, что в магнитном поле H эта сила будет другой*). Измененную магнитным полем силу возмущения обозначим через $\Phi(\epsilon) = \Phi(\epsilon, E_0, \nabla T, H)$. Тогда общее решение уравнения (9.10) будет иметь вид

$$f(k) = f_0(k) - \tau(k) (v(k) \Phi(\epsilon)) (\partial f_0 / \partial \epsilon). \quad (9.38)$$

Таким образом, задача сводится к нахождению возмущающей силы $\Phi(\epsilon)$ в магнитном поле. Для этого (9.38) подставим в уравнение (9.10) и учтем, что в членах $\nabla_r f$ и $E_0 \nabla_k f$ можно ограничиться равновесной функцией, а в члене, содержащем магнитное поле $[vH]$, необходимо оставить неравновесную добавку, так как, согласно (9.13), в нулевом приближении этот член тождествен нулю. В результате в первом неисчезающем приближении для $\Phi(\epsilon)$ получим следующее уравнение:

$$(v\Phi_0) + \frac{e}{\hbar c} [vH] \nabla_k (\tau v \Phi) = (v\Phi), \quad (9.39)$$

где Φ_0 дается (9.16).

Для решения уравнения (9.39) удобно ввести вектор

$$P(\epsilon) = \tau(k) \Phi(\epsilon), \quad (9.40)$$

имеющий смысл импульса возмущающей силы, в магнитном поле.

Тогда $P(\epsilon)$ будет удовлетворять уравнению

$$(v\Phi_0) + \frac{e}{\hbar c} [vH] \nabla_k (vP) = \frac{1}{\tau(k)} (vP). \quad (9.41)$$

Преобразуем выражение $\nabla_k (vP)$, используя известную формулу векторного анализа

$$\nabla_k (vP) = (P \nabla_k) v + (v \nabla_k) P + [v \text{ rot } P] + [P \text{ rot } v]. \quad (9.42)$$

*) В (9.15) ни время релаксации $\tau(\epsilon)$, ни $\epsilon(k)$, следовательно, $v(k)$ от магнитного поля не зависят, так как магнитное поле является неквад- ратным.

Последний член в (9.42) выпадает, так как $\text{rot } \mathbf{v} = (1/\hbar) \text{rot grad } \varepsilon(\mathbf{k}) \equiv 0$. Известно, что в случае сферически-симметричной зоны скорость \mathbf{v} направлена по вектору \mathbf{k} и дается выражением (9.20). Учитывая это, легко показать, что первый член правой части (9.42)

$$(\mathbf{P}\nabla_{\mathbf{k}})\mathbf{v} = \frac{2m(k)}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{1}{m(k)} \right) (\mathbf{k}\mathbf{P})\mathbf{v} + \frac{\hbar}{m(k)} \mathbf{P}. \quad (9.43)$$

Непосредственным вычислением можно показать, что

$$(\mathbf{v}\nabla_{\mathbf{k}})\mathbf{P} + [\mathbf{v} \text{rot } \mathbf{P}] = \left(k_x \frac{\partial P_x}{\partial \varepsilon} + k_y \frac{\partial P_y}{\partial \varepsilon} + k_z \frac{\partial P_z}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\hbar^2}{m(\varepsilon)} \mathbf{v}. \quad (9.44)$$

Подставляя (9.43) и (9.44) в (9.41) и учитывая, что все члены, содержащие скорость \mathbf{v} , при скалярном умножении на $[\mathbf{v}\mathbf{H}]$ дают нуль, получим уравнение

$$(\mathbf{v}\Phi_0) + \frac{e\tau(k)}{cm(k)} ([\mathbf{v}\mathbf{H}]\Phi) = (v\Phi), \quad (9.45)$$

где, согласно (9.40), мы перешли от $\mathbf{P}(\varepsilon)$ к искомому вектору $\Phi(\varepsilon)$.

Величина $m(k)$, входящая в уравнение (9.45), есть эффективная масса носителей тока в случае изотропной зоны:

$$m(k) = \hbar^2 k \frac{\partial k}{\partial \varepsilon(k)}. \quad (9.46)$$

Если предположить, что $\mathbf{v} \neq 0$, то из (9.45) получим обычное векторное уравнение для $\Phi(\varepsilon)$:

$$\Phi_0 + \frac{e}{c} \frac{\tau(k)}{m(k)} [\mathbf{H}\Phi] = \Phi. \quad (9.47)$$

Чтобы определить $\Phi(\varepsilon)$ из этого уравнения, поступим следующим образом. Уравнение (9.47) умножим скалярно на \mathbf{H} ; тогда получим

$$(\mathbf{H}\Phi_0) = (\mathbf{H}\Phi). \quad (9.48)$$

Затем векторно умножим уравнение (9.47) на \mathbf{H} слева:

$$[\mathbf{H}\Phi_0] = \frac{e}{c} \frac{\tau(k)}{m(k)} H^2\Phi - \frac{e}{c} \frac{\tau(k)}{m(k)} (\mathbf{H}\Phi)\mathbf{H} + [\mathbf{H}\Phi]. \quad (9.49)$$

Из последних трех уравнений легко получить окончательное выражение для возмущающей силы в магнитном поле $\Phi(\varepsilon)$:

$$\Phi(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \nu^2} \left\{ \Phi_0 + \frac{e}{c} \frac{\tau}{m} [\mathbf{H}\Phi_0] + \left(\frac{e\tau}{cm} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{H}\Phi_0) \right\}. \quad (9.50)$$

Здесь

$$\nu = \Omega\tau, \quad (9.51)$$

где $\Omega = eH/cm(k)$ — циклотронная частота.

Функция (9.50) совместно с (9.38) представляет собой общее линейное решение кинетического уравнения в произвольном пе-

квантующем магнитном поле для произвольной изотропной зоны в приближении времени релаксации. Это решение в указанных приближениях составляет основу теории электронных явлений переноса в классической области. Пределы применимости этого решения определяются неравенствами (8.22), (8.24), (9.25) и (9.29).

Полученное здесь решение в следующей главе будет использовано для рассмотрения конкретных кинетических эффектов. Пока мы обратим внимание на некоторые общие выводы, следующие из решения (9.50) для изотропной зоны.

Во-первых, когда магнитное поле \mathbf{H} направлено вдоль возмущающей силы Φ_0 , то из (9.50) следует, что

$$\Phi(\varepsilon) = \Phi_0(\varepsilon), \quad (9.52)$$

т. е. в проводниках с изотропным законом дисперсии продольное магнитное поле ($\mathbf{H} \parallel \Phi_0$) не изменяет возмущающую силу, следовательно, в таких проводниках не имеют места продольные эффекты *).

Во-вторых, когда магнитное поле \mathbf{H} перпендикулярно возмущающей силе Φ_0 , то из (9.50) имеем

$$\Phi(\varepsilon) = \frac{1}{1 + v^2} \left\{ \Phi_0 + \frac{e\tau}{cm} [\mathbf{H}\Phi_0] \right\}, \quad (9.53)$$

т. е. возникает компонента возмущающей силы, перпендикулярная \mathbf{H} и Φ_0 , что соответствует появлению тока в этом направлении, следовательно, появлению поперечных эффектов, таких как эффекты Холла, Нернста — Эттингсгаузена и др.

В-третьих, если определим проекцию возмущающей силы в магнитном поле $\Phi(\varepsilon)$ на направление вектора Φ_0 , то из (9.50) получим

$$\Phi_{\Phi_0}(\varepsilon) = \frac{1 + v^2 \cos^2 \alpha}{1 + v^2} \Phi_0(\varepsilon), \quad (9.54)$$

где α — угол между магнитным полем и Φ_0 , т. е. $\alpha = (\mathbf{H}\hat{\Phi}_0)$.

При $\alpha = 0$ из (9.54) следует первый случай (9.52). Когда $\alpha \neq 0$, т. е. когда имеется поперечная компонента магнитного поля относительно направления Φ_0 , то проекция возмущающей силы меньше силы без поля: $\Phi_{\Phi_0}(\varepsilon) < \Phi_0(\varepsilon)$. Это означает, что при наличии поперечного магнитного поля проводимость образца меньше, чем без поля, т. е. в магнитном поле удельное сопротивление должно расти — *магнетосопротивление*.

В заключение этого параграфа отметим следующее обстоятельство. Как видно из (9.50), в решении кинетического уравнения магнитное поле \mathbf{H} входит через безразмерный параметр $v = \Omega\tau = (eH/mc)\tau$. Можно ли применять решение (9.50) при по-

*) Продольные кинетические эффекты имеют место в полупроводниках с анизотропным законом дисперсии и в квантующем магнитном поле, даже если зона изотропна.

лях, когда этот безразмерный параметр намного больше единицы, т. е.

$$\nu = \Omega\tau \ll 1 \text{ или } H \gg \frac{mc}{e\tau} \equiv H_0, \quad (9.55)$$

так как мы знаем, что само кинетическое уравнение применимо при магнитных полях, ограниченных сверху условием (8.22); другими словами, совместимы ли условия (9.55) и (8.22)? Если объединить эти два условия, то получим

$$(\tau k_0 T / \hbar) H_0 \gg H \gg H_0. \quad (9.56)$$

Согласно (8.24) $\tau k_0 T / \hbar \gg 1$, и поэтому двойное неравенство (9.56) может иметь место. Следовательно, условия (9.55) и (8.22) совместимы, и есть довольно обширная область значений магнитных полей, в которой выполняется условие (9.55), но еще не наступило квантование.

§ 10. Рассеяние носителей заряда в полупроводниках с произвольной изотропной зоной. Примесное рассеяние

В этом и в последующем параграфах мы рассмотрим основные механизмы рассеяния носителей заряда в полупроводниках с изотропным законом дисперсии (9.1) и вычислим соответствующие времена релаксации.

В случае, когда можно ввести понятие времени релаксации, задача теории явлений переноса сильно упрощается и распадается на три фактически самостоятельные задачи: 1) решение кинетического уравнения в приближении времени релаксации (9.10); 2) вычисление времени релаксации $\tau(k)$ для разных механизмов релаксации (9.23); 3) вычисление плотностей тока (8.1) и потока энергии (8.2), следовательно, вычисление измеряемых на опыте кинетических коэффициентов. Первую задачу мы решили в предыдущем параграфе для сферически-симметричных энергетических зон. Настоящий параграф посвящен решению второй задачи. Третья задача будет рассмотрена в главе 4.

Вычисление времен релаксации для различных механизмов рассеяния можно найти в монографиях [3, 5, 11, 12] и оригинальных статьях [13—21]. В этих работах в основном рассматривается простая параболическая зона. Мы остановимся на некоторых основных механизмах рассеяния носителей заряда и выведем соответствующие выражения для времен релаксации для любой сферически-симметричной (нестандартной) зоны. Как видно из (9.23), для вычисления времени релаксации $\tau(\mathbf{k})$ нужно знать вероятность перехода носителей заряда $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ из одного состояния с волновым вектором \mathbf{k} в другое с \mathbf{k}' вследствие рассеяния на дефектах решетки.

1. Вероятность перехода. Нахождение вероятности перехода является задачей квантовой теории рассеяния. Она решается на основе метода нестационарной теории возмущения [8]. Общий

гамильтониан электрона в реальной решетке представим в виде

$$\widehat{H}_T = \widehat{H} + \widehat{H}', \quad (10.1)$$

где \widehat{H}' описывает взаимодействие электрона с примесями (дефектами) или с фононами, которое считается малым возмущением; невозмущенный гамильтониан \widehat{H} в случае рассеяния на примесях представляет собой гамильтониан электрона в идеальной решетке (1.4), а в случае рассеяния на фононах \widehat{H} включает в себя также и гамильтониан идеального фононного газа, не взаимодействующего с электроном.

Предположим, что стационарное решение невозмущенной задачи с гамильтонианом \widehat{H} есть

$$\Psi_n(t) = \psi_n \exp(-i\varepsilon_n t/\hbar), \quad (10.2)$$

причем ψ_n и ε_n — собственные функции и собственные значения уравнения

$$\widehat{H}\psi_n = \varepsilon_n \psi_n, \quad (10.3)$$

где n обозначает совокупность дискретных и квазидискретных квантовых чисел, определяющих состояния электрона в идеальной решетке (рассеяние на примесях) или электрона и фононного газа (рассеяние на фононах)*).

Для того чтобы найти решение возмущенной задачи с гамильтонианом (10.1), следует исходить из общего уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_T}{\partial t} = (\widehat{H} + \widehat{H}') \Psi_T. \quad (10.4)$$

Разложим $\Psi_T(t)$ по собственным функциям (10.2) невозмущенной задачи с гамильтонианом \widehat{H} :

$$\Psi_T(t) = \sum_n a_n(t) \psi_n \exp(-i\varepsilon_n t/\hbar). \quad (10.5)$$

Подставим (10.5) в (10.4) и учтем (10.3). Полученное уравнение слева умножим на $\psi_{n'}^*$ и проинтегрируем по всему объему кристалла**). Если воспользоваться ортонормированностью ψ_n , то получим следующую систему уравнений для коэффициентов разложения:

$$\frac{da_{n'}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n (n' | \widehat{H}' | n) a_n(t) \exp(i\omega_{n'n}t), \quad (10.6)$$

где $\omega_{n'n} = (\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)/\hbar$, а

$$(n' | \widehat{H}' | n) = \int \psi_{n'}^* \widehat{H}' \psi_n dr \quad (10.7)$$

*) Содержание n , следовательно, ψ_n и ε_n будем конкретизировать в каждом отдельном случае.

**) В случае рассеяния на фононах интеграл берется как по координатам носителей заряда, так и по всем нормальным координатам колебаний решетки (см. § 11).

— матричный элемент возмущения, вычисленный на известных невозмущенных волновых функциях уравнения (10.3).

Система уравнений (10.6), которая эквивалентна исходному уравнению Шредингера (10.4), в принципе дает возможность определить $a_{n'}(t)$, если известны решения невозмущенной задачи (10.3) и величина возмущения $\widehat{\mathcal{H}}'$. Согласно квантовой механике $|a_{n'}(t)|^2$ представляет собой вероятность обнаружить систему в момент времени t в состоянии n' . Поэтому в любой момент времени $\sum_{n'} |a_{n'}(t)|^2 = 1$.

Для произвольного возмущения получить точное решение системы (10.6) трудно. Можно ее решить приближенно, считая возмущение малым: $\widehat{\mathcal{H}}' \ll \widehat{\mathcal{H}}$. Для этого коэффициент $a_n(t)$ представим в виде степенного ряда по степеням $\widehat{\mathcal{H}}'$:

$$a_n = a_n^{(0)} + a_n^{(1)} + a_n^{(2)} + \dots \quad (10.8)$$

Подставляя (10.8) в (10.6), систему можно решать итерацией. Допустим, что до момента включения возмущения система находилась в определенном квантовом состоянии n . Тогда, если возмущение начинает действовать при $t \geq 0$, то $\Psi_T(t \leq 0) = \psi_n$. Это означает, что коэффициент в нулевом приближении $a_n^{(0)} = 1$ только для данного n , а для всех других значений индекса равен нулю. Подстановка $a_n^{(0)} = 1$ в правую часть (10.6) дает простое уравнение для $a_{n'}^{(1)}$. Интегрируя это уравнение, получим

$$a_{n'}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t (n' | \widehat{\mathcal{H}}' | n) \exp(i\omega_{n'n}t') dt'. \quad (10.9)$$

Используя это выражение в правой части (10.6), можно определить коэффициенты второго порядка $a_{n'}^{(2)}(t)$ и т. д. Однако мы ограничимся первым приближением (10.9).

Если за время действия возмущение $\widehat{\mathcal{H}}'$ остается постоянным, то матричный элемент в (10.9) можно вынести за знак интеграла. Тогда из (10.9) легко получаем

$$a_{n'}^{(1)}(t) = (n' | \widehat{\mathcal{H}}' | n) \frac{1 - \exp(i\omega_{n'n}t)}{\hbar\omega_{n'n}}. \quad (10.10)$$

Таким образом, в первом приближении теории возмущения вероятность того, что в момент времени t система будет находиться в состоянии n' , равна

$$|a_{n'}^{(1)}(t)|^2 = |(n' | \widehat{\mathcal{H}}' | n)|^2 \frac{2(1 - \cos \omega_{n'n}t)}{\hbar^2 \omega_{n'n}^2}. \quad (10.11)$$

В начальный момент $t = 0$ система находилась в состоянии n , затем благодаря действию возмущения $\widehat{\mathcal{H}}'$ в момент времени t она оказалась в состоянии n' с вероятностью (10.11). Тогда,

дифференцируя (10.11), для вероятности перехода $n \rightarrow n'$ за единицу времени получим

$$W(n, n') = |(n' | \widehat{\mathcal{H}}' | n)|^2 \frac{2 \sin \omega_{n'n} t}{\hbar^2 \omega_{n'n}}, \quad (10.12)$$

В последнем выражении t есть время, прошедшее после начала действия возмущения $\widehat{\mathcal{H}}'$. Это время надо взять достаточно большим, чтобы процесс рассеяния полностью завершился. Тогда, учитывая известную асимптотику для δ -функции

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin \omega_{n'n} t}{\omega_{n'n}} = \pi \delta(\omega_{n'n}) = \pi \hbar \delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n), \quad (10.13)$$

из (10.12) для вероятности перехода за единицу времени окончательно получим *)

$$W(n, n') = \frac{2\pi}{\hbar} |(n' | \widehat{\mathcal{H}}' | n)|^2 \delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n). \quad (10.14)$$

Эта формула лежит в основе теории рассеяния носителей тока и тем самым теории явлений переноса в полупроводниках. Поэтому еще раз отметим условия, при которых получена (10.14).

Во-первых, формула (10.14) получена в первом порядке теории возмущения, что налагает на величину возмущения условие $\widehat{\mathcal{H}}' \ll \widehat{\mathcal{H}}$. Это соответствует борновскому приближению в теории рассеяния.

Во-вторых, время действия возмущения должно быть намного меньше, чем время между двумя последовательными включениями возмущения, т. е. время рассеяния $\Delta t \ll \tau$, где τ — время свободного пробега (или время релаксации). Только при выполнении этого условия в (10.12) t можно стремиться к бесконечности и воспользоваться асимптотикой (10.13). Это обстоятельство мы уже использовали для определения условия применимости кинетического уравнения (8.24).

Теперь перейдем к рассмотрению конкретных механизмов рассеяния на основе формул (9.23) и (10.14).

2. Рассеяние носителей заряда примесными атомами. При низких температурах, когда колебания решетки неинтенсивны и фононный газ разрежен, основным механизмом рассеяния в полупроводниках является рассеяние носителей заряда на атомах примеси. Допустим, что в кристалле с объемом V атомы примеси с общим числом N хаотически распределены, так чтобы их концентрация $N_i = N/V$ была везде одинакова. Атомы примеси могут быть как нейтральными, так и ионизованными. Координаты точек, где расположены атомы примеси, обозначим через \mathbf{R} . Поскольку масса атомов примеси $M_i \gg m_0$ — массы электрона, то можно считать, что примеси неподвижны и их положения в решетке фиксированы.

*) В (10.13) мы учли, что $\delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x)$.

В данной задаче возмущением является потенциал, создаваемый всеми атомами примеси в произвольной точке \mathbf{r} , т. е. в (10.1)

$$\widehat{\mathcal{H}}' = \sum_{j=1}^N U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (10.15)$$

Пока не будем конкретизировать вид этого потенциала.

Невозмущенным состоянием в данном случае является состояние электрона (дырки) в идеальной, неколеблущейся решетке. Тогда в (10.3) l обозначает совокупность таких квантовых чисел, как номер зоны l , спиновое квантовое число s и компоненты волнового вектора \mathbf{k} . Мы не будем учитывать межзонные переходы, что неважно для стационарных явлений переноса, и, кроме того, будем считать, что при рассеянии сины носителей заряда не переворачиваются. Поэтому достаточно характеризовать состояние носителей заряда квантовым числом \mathbf{k} , энергией $\varepsilon(\mathbf{k})$ и волновой функцией Блоха (1.15), определяемыми из уравнения (1.11).

Тогда вероятность перехода $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ благодаря рассеянию на примесном потенциале (10.15), согласно (10.14), имеет вид

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 2\pi\hbar^{-1} |(\mathbf{k}' | \widehat{\mathcal{H}}' | \mathbf{k})|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (10.16)$$

где

$$(\mathbf{k}' | \widehat{\mathcal{H}}' | \mathbf{k}) = \int \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \left(\sum_{j=1}^N U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (10.17)$$

Отметим, что примесный атом и рассеянный электрон обмениваются импульсом. При этом изменение энергии примеси $\hbar^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2/2M \ll \hbar^2k^2/m_0$ — энергии электрона, так как $M \gg m_0$. Поэтому рассеяние носителей тока на атомах примеси носит упругий характер $\varepsilon(\mathbf{k}') = \varepsilon(\mathbf{k})$, что видно из (10.16).

Для вычисления матричного элемента (10.17), вообще говоря, надо использовать блоховскую волновую функцию электрона в идеальной решетке (1.6). Для простоты ограничимся приближением эффективной массы и при вычислении матричного элемента (10.17) вместо функции Блоха используем волновую функцию свободного электрона с эффективной массой $*$), нормированной на объем кристалла V :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (10.18)$$

Подставляя (10.18) в (10.17), для квадрата модуля матричного элемента получим выражение

$$|(\mathbf{k}' | \widehat{\mathcal{H}}' | \mathbf{k})|^2 = V^{-2} (A_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + A_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')), \quad (10.19)$$

где

$$A_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{j=1}^N \left| \int U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{r})] d\mathbf{r} \right|^2, \quad (10.20)$$

*) Учет блоховских множителей при вычислении матричного элемента и соответственно времени релаксации будем обсуждать отдельно (см. § 12).

а

$$A_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{j \neq j'=1}^N \left\{ \int U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j) \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{r}_1)] d\mathbf{r}_1 \times \right. \\ \left. \times \int U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{j'}) \exp[-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{r}_2)] d\mathbf{r}_2 \right\}. \quad (10.21)$$

В (10.19) произведем замену переменных, полагая $\mathbf{r} - \mathbf{R}_j = \mathbf{r}'$. Тогда легко получим

$$A_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = N \left| \int U(\mathbf{r}') \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{r}')] d\mathbf{r}' \right|^2. \quad (10.22)$$

Если в (10.21) введем новые переменные интегрирования $\mathbf{r}'_1 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j$ и $\mathbf{r}'_2 = \mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{j'}$, то A_2 можно представить в виде

$$A_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{A_1}{N} \sum_{j \neq j'} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})]. \quad (10.23)$$

Вещественная часть этого выражения есть

$$A_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{A_1}{N} \sum_{j \neq j'} \cos(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}). \quad (10.24)$$

Следуя [5], отметим, что слагаемое A_1 (10.22) описывает рассеяние электрона всеми N примесными атомами при условии, что рассеяние на каждом из них происходит независимо от всех остальных. Иначе говоря, величина A_1 характеризует рассеяние, которое имело бы место в отсутствие интерференции электронных волн, рассеянных разными атомами примеси. Такое рассеяние называется *некогерентным*. В этом случае, как видно из (10.22), результат рассеяния на одном атоме умножается на полное число рассеивающих атомов примеси.

В отличие от A_1 , величина A_2 зависит от расположения примесных атомов в решетке и описывает эффект интерференции электронных волн, рассеянных различными атомами примеси. Если предположить, что атомы примеси в решетке расположены хаотически, то можно пренебречь интерференционным членом A_2 в (10.19). Этот результат, в частности, следует из (10.24). Действительно, если примеси расположены хаотически, то в (10.24) положительных и отрицательных членов будет равное количество и слагаемое A_2 обращается в нуль.

Таким образом, в условиях некогерентного рассеяния ($A_2 = 0$) из (10.16), (10.19) и (10.22) для вероятности перехода получим выражение

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_i}{V} \left| \int U(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{r})] d\mathbf{r} \right|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}), \quad (10.25)$$

где $N_i = N/V$ — концентрация атомов примеси, причем переменная интегрирования \mathbf{r}' заменена на \mathbf{r} .

Общую формулу (10.25) можно использовать для вычисления вероятности перехода при рассеянии на различных потенциалах, создаваемых атомами примесей или дефектами решетки.

3. Рассеяние на ионизованных атомах примеси. Примесные атомы обычно создают дискретные энергетические уровни, расположенные в запрещенной зоне вблизи краев разрешенных зон. Поэтому они легко ионизируются и при низких температурах основным механизмом является рассеяние на ионах примеси. Положительно (донорный) или отрицательно (акцепторный) заряженный ион примеси в решетке полупроводника в точке \mathbf{r} создает действующее кулоновское поле с потенциалом $\varphi = \pm e/\kappa r$, где κ — диэлектрическая проницаемость кристалла, $\pm e$ — заряд иона. Если в (10.25) использовать в качестве потенциала, возмущения $U(r) = e\varphi = \pm e^2/\kappa r$ и, согласно (9.23), вычислить время релаксации, то легко видеть, что τ^{-1} логарифмически расходится и, следовательно, понятие подвижности теряет смысл. Чтобы получить конечное время релаксации (и подвижности), нужно попытаться каким-то образом ограничить сферу действия кулоновского потенциала иона примеси. Первая попытка в решении этого вопроса принадлежит Конуэллу и Вайскопфу [19]. Они ограничивали сферу действия иона величиной, равной половине среднего расстояния между соседними ионами примеси. Этот, казалось бы, искусственный прием давал качественно правильный результат для температурной зависимости подвижности при низких температурах.

Более строгое рассмотрение вопроса о рассеянии носителей заряда на ионах примеси состоит в учете [20] экранировки кулоновского потенциала носителями тока. При этом потенциал однократно ионизованного примесного атома в точке, отстоящей от места нахождения иона на расстояние r , можно представить в виде

$$\varphi(r) = \pm (e/\kappa r) \exp(-r/r_0), \quad (10.26)$$

где r_0 носит название радиуса экранировки поля иона и в общем виде определяется формулой [22]

$$r_0^{-2} = (4\pi e^2/\kappa) \int (-\partial f_0/\partial \varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon; \quad (10.27)$$

здесь $f_0(\varepsilon)$ — равновесная функция распределения электронов (4.1), $g(\varepsilon)$ — плотность состояний, которая для произвольной изотропной зоны дается выражением (4.9).

Используя потенциал рассеяния $U(r) = e\varphi(r) = \pm (e^2/\kappa r) \times \exp(-r/r_0)$ в (10.25) и учитывая сферическую симметричность этого потенциала, для вероятности перехода получим

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_i}{V} \left(\frac{4\pi e^2}{\kappa} \right)^2 \frac{\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})}{[(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 + r_0^{-2}]^2}. \quad (10.28)$$

Как было отмечено выше и видно из (10.28), рассеяние на ионах примеси является упругим. Поэтому этот процесс может характеризоваться временем релаксации, и можно использовать формулу (9.23). Подставляя (10.28) в (9.23), учитывая (2.15) и переходя к сферической системе координат с полярной осью

по k ; интегрируя по величине k' с помощью δ -функции и учитывая при этом, что корнем уравнения $\varepsilon(k') = \varepsilon(k)$ является $k' = k$, для времени релаксации окончательно получим

$$\tau(k) = \frac{\hbar \kappa^2}{2\pi e^4 N_i F_{\text{пр}}(k)} k^2 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right); \quad (10.29)$$

здесь

$$F_{\text{пр}}(k) = \ln(1 + \xi) - \xi / (1 + \xi), \quad \xi = (2kr_0)^2. \quad (10.30)$$

В случае простой параболической зоны (3.1) с точностью до медленно меняющегося множителя $F_{\text{пр}}(\varepsilon)$ из (10.29) получим $\tau \sim \varepsilon^{3/2}$, т. е.

$$\tau(\varepsilon) = \frac{\kappa^2 (2m_n)^{1/2} (k_0 T)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F_{\text{пр}}(\varepsilon)} \left(\frac{\varepsilon}{k_0 T} \right)^{3/2}, \quad (10.31)$$

где $F_{\text{пр}}(\varepsilon)$ дается (10.30) с $\xi = 8m_n \varepsilon r_0^2 / \hbar^2$. Радиус экранировки в этом случае в силу (10.27), (4.12) и (4.44) имеет вид

$$r_0^2 = \frac{\kappa k_0 T}{6\pi e^2 n} \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}}. \quad (10.32)$$

Отсюда в силу (4.37) и (4.38) легко получить для невырожденных полупроводников

$$r_0 = \left(\frac{\kappa k_0 T}{4\pi e^2 n} \right)^{1/2}, \quad (10.33)$$

для сильно вырожденных полупроводников

$$r_0 = [(\kappa \hbar^2 / 4m_n e^2) (\pi / 3n)^{1/3}]^{1/2}. \quad (10.34)$$

Остановимся теперь на условиях применимости формулы (10.29) для времени релаксации в случае рассеяния на ионах примеси. Она получена на основе (10.25), которая справедлива в первом приближении теории возмущений, т. е. в борновском приближении. Поэтому условие применимости (10.29) следует из условий применимости борновского приближения, налагаемых на величину и радиус действия рассеивающего потенциала $U(r)$. Известно (см. § 45 и 125 в [7]), что приближение Борна [в нашем случае выражение (10.25)] применимо, когда имеет место неравенство

$$|U| \ll \hbar^2 / md^2, \quad (10.35)$$

где $|U|$ — величина рассеивающего потенциала, d — радиус действия этого потенциала, m — масса падающей частицы. Отметим, что правая часть (10.35) имеет простой физический смысл: это есть величина порядка кинетической энергии частицы, заключенной в объеме с линейными размерами d , так как, согласно соотношению неопределенности, ее импульс имел бы порядок \hbar/d .

Следует подчеркнуть, что если $|U|$ и d удовлетворяют условию (10.35), то борновское приближение справедливо для всех электронов независимо от величины их импульса, т. е. если имеет место (10.35), то приближение Борна можно применять при любом значении kd , где k — волновое число электрона, падающего на потенциал $U(r)$. Однако для быстрых электронов, у которых $kd \gg 1$, применение борновского приближения требует удовлетворения менее жесткого условия, чем (10.35), а именно

$$|U| \ll (\hbar^2/md^2)kd \quad \text{при} \quad kd \gg 1. \quad (10.36)$$

В случае рассеяния на экранированных ионах примеси $|U| = e^2/\kappa r_0$, а $d = r_0$ и условия применимости борновского приближения (10.35) и (10.36) соответственно приобретают следующий вид:

$$r_0 \ll r_B \quad \text{при} \quad \text{любом} \quad \kappa r_0 \quad (10.37)$$

и

$$\epsilon \gg \epsilon_B \quad \text{при} \quad \kappa r_0 \gg 1, \quad (10.38)$$

где $r_B = \kappa \hbar^2/m_n e^2$ — эффективный боровский радиус, $\epsilon_B = \hbar^2/2m_n r_B^2$ — боровская энергия и $\epsilon = \hbar^2 k^2/2m_n$ — энергия электрона проводимости.

Из явных выражений для r_0 видно, что (10.37) налагает ограничение снизу на концентрацию экранирующих свободных носителей заряда n для невырожденного электронного газа:

$$n \gg \kappa k_0 T / 4\pi e^2 r_B^2, \quad (10.39)$$

а для вырожденного электронного газа:

$$n \gg \frac{\pi}{3} (\kappa \hbar^2 / 4m_n e^2 r_B^2)^3. \quad (10.40)$$

Последние два неравенства можно объединить:

$$\frac{d_0}{r_B} \ll ((e^2/\kappa d_0)/\epsilon)^{1/2}, \quad (10.41)$$

где $d_0 = n^{-1/3}$ — расстояние между электронами проводимости.

Таким образом, для применения борновского приближения требуется, чтобы отношение среднего расстояния между свободными носителями d_0 и эффективного боровского радиуса r_B было намного меньше, чем отношение энергии взаимодействия электронов проводимости $e^2/\kappa d_0$ к ее средней энергии ϵ .

Следует отметить, что при высоких температурах, когда имеет место (10.38), т. е. $k_0 T \gg \epsilon_B$, для применения борновского приближения не требуется удовлетворения условий (10.37) или (10.41), т. е. в этом случае борновское приближение применимо даже тогда, когда $r_0 \approx r_B$.

Допустим, что имеет место условие (10.37). Тогда в зависимости от величины произведения κr_0 можно рассмотреть два

предельных случая. При $kr_0 \gg 1$ из (10.29) и (10.30) имеем

$$\tau(k) = \frac{\hbar \kappa^2}{2\pi e^4 N_i} k^2 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right) \frac{1}{\ln(4k^2 r_0^2)}. \quad (10.42)$$

Видно, что при $r_0 \rightarrow \infty$ $\tau(k) \rightarrow 0$. Таким образом, для получения конечной подвижности необходим учет экранирования кулоновского потенциала иона примеси.

При $kr_0 \ll 1$ из (10.29) и (10.30) для $\tau(k)$ получим выражение*)

$$\tau(k) = \frac{\hbar \kappa^2}{16\pi e^4 N_i r_0^4} k^{-2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right). \quad (10.43)$$

В этом предельном случае сильного экранирования заряженный атом примеси ведет себя как точечный дефект с короткодействующим потенциалом [см. (10.48)]. Этот случай рассеяния носителей заряда рассмотрен в работе [23].

Для невырожденного полупроводника с параболическим законом дисперсии, согласно (10.31), выпишем явный вид условия применимости кинетического уравнения (8.24) в случае рассеяния на слабо экранированном заряженном атоме примеси (10.42). Условие $\tau(k_0 T) \gg \hbar/k_0 T$ налагает следующее ограничение на концентрацию ионов примеси N_i :

$$N_i \ll \frac{\kappa^2 (2m_n)^{1/2} (k_0 T)^{5/2}}{\pi \hbar e^4 \ln((8m_n k_0 T/\hbar^2) r_0^2)}. \quad (10.44)$$

При таких концентрациях ионов примеси рассеяние носителей заряда происходит как отдельный акт на различных центрах и время свободного пробега между двумя последовательными столкновениями становится намного больше, чем время нахождения носителей в поле рассеивающего иона.

4. Рассеяние на точечных дефектах — короткодействующий потенциал. В области низких температур в рассеянии носителей заряда могут играть роль также точечные дефекты решетки, имеющие различную природу. Эти точечные дефекты можно рассматривать как короткодействующий δ -образный потенциал

$$U(\mathbf{r}) = U_0 \delta(\mathbf{r}), \quad (10.45)$$

где начало координат выбрано в силовом центре. Постоянная U_0 представляет собой объемный интеграл потенциала

$$U_0 = \int U(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \approx |U| d^3 = \text{const}. \quad (10.46)$$

Видно, что в этом случае конечной величиной является $|U|d^3$, где d — размеры области, в которой $U(\mathbf{r})$ заметно отличается от

*) Явный вид неравенства $kr_0 \ll 1$ и соответствующее обсуждение сильного экранирования приводятся в п. 6 § 11.

нуля. Отметим, что для выполнения условия приближения Борна $|U|d^3 \ll (\hbar^2/m)d$ необходимо, чтобы d были конечными.

Из (10.25) и (10.45) для вероятности перехода $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ при рассеянии на короткодействующем потенциале получим

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_g}{V} U_0^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (10.47)$$

где N_g — концентрация точечных дефектов.

Подставляя (10.47) в (9.23) и производя интегрирование по \mathbf{k}' , для произвольной сферической зоны получим

$$\tau(k) = (\pi\hbar/U_0^2 N_g) k^{-2} (\partial\varepsilon/\partial k). \quad (10.48)$$

Видно, что зависимость τ от k в этом случае такая же, как и в случае рассеяния на сильно экранированном кулоновском потенциале (10.43).

В случае параболической зоны (10.48) дает известный результат [24]

$$\tau(\varepsilon) = \frac{\pi\hbar^4}{m_n (2m_n k_0 T)^{1/2} U_0^2 N_g} \left(\frac{\varepsilon}{k_0 T}\right)^{-1/2}. \quad (10.49)$$

То, что (10.48) совпадает с выражением (10.43), полученным в предположении $kd \ll 1$, т. е. $d \ll \lambda$, показывает, что δ -образный потенциал является предельным случаем потенциала сил взаимодействия с очень малым радиусом d , точнее, с радиусом, много меньшим дебройлевской длины волны носителей заряда λ .

5. Рассеяние на нейтральных атомах примеси. При понижении температуры носители заряда вымораживаются и при достаточно низких температурах в полупроводнике с одним типом примесей число нейтральных атомов примеси становится больше числа ионизированных примесей. В этих условиях основную роль может играть рассеяние на нейтральных атомах примеси. Рассеяние на нейтральных атомах примеси можно приблизительно рассматривать как рассеяние медленных электронов с массой m_n на атоме водорода, погруженном в среду с диэлектрической постоянной κ . Согласно формуле Эрджинся [21] время релаксации для этого механизма не зависит от энергии носителей тока и имеет вид

$$\tau = \left(\frac{m_n^2 e^2}{20\hbar^3 \kappa N_0} \right), \quad (10.50)$$

где N_0 — концентрация нейтральных атомов примеси.

Отметим, что хотя τ при рассеянии на нейтральных атомах от энергии не зависит, тем не менее τ и соответственно подвижность могут зависеть от температуры благодаря изменению числа нейтральных рассеивающих центров $N_0 = N_0(T)$, резко возрастающих с понижением температуры.

§ 11. Рассеяние носителей заряда на фононах в полупроводниках с произвольной изотропной зоной

При относительно высоких температурах доминирующим механизмом релаксации становится рассеяние носителей заряда на фононах. Это происходит по двум причинам: во-первых, согласно (10.31) время релаксации, определяемое рассеянием на ионах примеси, $\tau_i \sim \varepsilon^{3/2}$, поэтому с ростом температуры (энергии) τ_i растет и этот механизм становится малоэффективным — энергичные носители заряда легко проходят мимо ионов примеси, не меняя своего направления движения, т. е. не рассеиваясь; во-вторых, с ростом температуры число фононов увеличивается, следовательно, растет вероятность «столкновения» носителей заряда с фононами.

Здесь вычислим время релаксации для рассеяния носителей заряда на фононах различных типов: акустических, пьезоакустических, полярных и неполярных оптических фононах. Для этого следует определить явный вид гамильтониана невозмущенной задачи $\widehat{\mathcal{H}}$, входящего в (10.1), и возмущения $\widehat{\mathcal{H}}'$, описывающего взаимодействие электрона проводимости *) с различными типами фононов.

1. Электроны проводимости и фононный газ. В случае рассеяния носителей заряда на фононах рассматривается один электрон проводимости (или одна дырка в валентной зоне) в колеблющейся решетке. Если не учесть взаимодействие электрона проводимости с решеткой, то невозмущенный гамильтониан $\widehat{\mathcal{H}}$ в (10.1) состоит из гамильтониана электрона проводимости $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{эл}}$ и гамильтониана решетки $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{реш}}$:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_{\text{эл}} + \widehat{\mathcal{H}}_{\text{реш}}. \quad (11.1)$$

Приведем явный вид каждого из этих гамильтонианов. В одноэлектронном приближении, согласно (1.4),

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{эл}} = -(\hbar^2/2m_0)\nabla^2 + V(\mathbf{r}), \quad (11.2)$$

где m_0 — масса свободного электрона, $V(\mathbf{r})$ — периодический потенциал решетки (1.5). Состояния электрона проводимости определяются волновым вектором \mathbf{k} и волновой функцией Блоха $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (1.6), являющейся решением уравнения

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{эл}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (11.3)$$

В приближении эффективной массы $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{эл}} = -(\hbar^2/2m_n)\nabla^2$ электрон проводимости описывается плоской волной (10.18), а его энергия $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m_n$. В рамках модели Кейна энергия электрона проводимости $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ определяется из уравнения (3.10), которое в двухзонном приближении дает выражение (3.19).

*) Все, что сказано для электронов проводимости, будет справедливо и для дырок, если заменить соответствующие параметры.

Теперь рассмотрим колебания решетки, состоящей из N элементарных ячеек, каждая из которых содержит s атомов или ионов. Вектор смещения k -го атома в n -й ячейке можно представить в виде [3]

$$u_{nk} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}j} \{ e_{kj}(\mathbf{q}) b_j(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{a}_n) + e_{kj}^* b_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{a}_n) \}, \quad (11.4)$$

где $b_j(\mathbf{q}) \sim \exp[-i\omega_j(\mathbf{q})t]$ — комплексные нормальные координаты, которые гармонически зависят от времени, \mathbf{a}_n — вектор решетки, соответствующий положению n -й ячейки, $e_{kj}(\mathbf{q})$ — некоторый вектор, определяющий направление колебания k -го атома, когда он участвует в образовании монохроматической волны с волновым вектором \mathbf{q} , соответствующей j -й ветви, т. е. с частотой $\omega_j(\mathbf{q})$. Этот вектор обладает свойством [5]

$$e_{kj}(\mathbf{q}) = e_{kj}^*(-\mathbf{q}) \quad (11.4a)$$

и удовлетворяет условию ортонормированности

$$\sum_{k=1}^s M_k e_{kj}^*(\mathbf{q}) e_{kj'}(\mathbf{q}) = M \delta_{jj'}, \quad (11.4b)$$

где $M = \sum_{k=1}^s M_k$ — масса элементарной ячейки.

Волновой вектор \mathbf{q} меняется в пределах первой зоны Бриллюэна и принимает N значений. Спектр частоты состоит из $3s$ ветвей ($j = 1, 2, 3, \dots, 3s$), т. е. число возможных частот равно $3sN$ — числу степеней свободы кристалла. Отметим, что некоторые из этих частот могут совпадать. Для различных кристаллов функции $\omega_j(\mathbf{q})$ различны, и в общем случае они являются очень сложными. Схематическая зависимость $\omega_j(q)$ показана на рис. 18. Зависимость ω от q можно аналитически записать для длинных волн, когда $aq \ll 1$, где a — постоянная решетки.

Из $3s$ ветвей 3 являются акустическими и при малых q , т. е. при $aq \ll 1$

$$\omega_j(q) = v_{0j}q, \quad j = 1, 2, 3, \quad (11.5)$$

а остальные $(3s - 3)$ носят оптический характер: $\omega_j(q \rightarrow 0) = \omega_{0j}$ и при $aq \ll 1$ обладают слабой дисперсией

$$\omega_j(q) = \omega_{0j} - \alpha_j q^2, \quad j = 4, 5, \dots, 3s, \quad (11.6)$$

где α_j — постоянная величина, v_{0j} — скорость продольных и поперечных звуковых волн в кристалле.

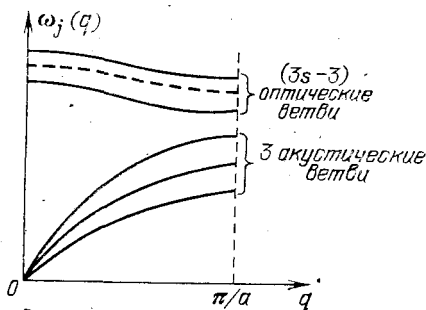


Рис. 18. Схематическая зависимость $\omega_j(q)$ для акустических и оптических ветвей

Полную энергию колеблющегося кристалла E в квадратичном по смещениям атомов $\mathbf{u}_{\mathbf{q}j}$ -приближении — квазиупругом приближении можно выразить через комплексные нормальные координаты следующим образом [3, 5]:

$$E = \frac{M}{2} \sum_{\mathbf{q}j} \left\{ |\dot{b}_j(\mathbf{q}, t)|^2 + \omega_j^2(\mathbf{q}) |b_j(\mathbf{q}, t)|^2 \right\}. \quad (11.7)$$

Если учесть, что $\dot{b}_j(\mathbf{q}, t) = -i\omega_j(\mathbf{q}) b_j(\mathbf{q}, t)$, то (11.7) примет вид

$$E = M \sum_{\mathbf{q}j} \omega_j^2(\mathbf{q}) |b_j(\mathbf{q})|^2. \quad (11.8)$$

Удобнее всего энергию выразить через вещественные нормальные координаты

$$X_{\mathbf{q}j} = b_j(\mathbf{q}) + b_j^*(\mathbf{q}) \quad (11.9)$$

и сопряженные им импульсы

$$P_{\mathbf{q}j} = M\dot{X}_{\mathbf{q}j} = -iM\omega_j(\mathbf{q}) \{b_j(\mathbf{q}) - b_j^*(\mathbf{q})\}. \quad (11.10)$$

Из последних двух равенств можно определить $b_j(\mathbf{q})$, выразив его через $X_{\mathbf{q}j}$ и $P_{\mathbf{q}j}$:

$$b_j(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \left(X_{\mathbf{q}j} + \frac{i}{M\omega_j(\mathbf{q})} P_{\mathbf{q}j} \right). \quad (11.11)$$

Тогда (11.8) примет вид

$$E = \sum_{\mathbf{q}j} \left\{ \frac{P_{\mathbf{q}j}^2}{2M} + \frac{M\omega_j^2(\mathbf{q})}{2} X_{\mathbf{q}j}^2 \right\}. \quad (11.12)$$

Видно, что в квазиупругом приближении полную энергию колебаний решетки можно представить как сумму энергий $3sN$ невзаимодействующих гармонических осцилляторов с частотами $\omega_j(\mathbf{q})$ и массой M . Для того чтобы перейти к квантовомеханическому рассмотрению колебаний решетки, следует считать величины $X_{\mathbf{q}j}$ и $P_{\mathbf{q}j}$ операторами: $X_{\mathbf{q}j} \rightarrow \hat{X}_{\mathbf{q}j}$ и $P_{\mathbf{q}j} \rightarrow -i\hbar(\partial/\partial X_{\mathbf{q}j})$. Тогда $E \Rightarrow \hat{\mathcal{H}}_{\text{реш}}$ и имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{реш}} = \sum_{\mathbf{q}j} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}j}, \quad (11.13)$$

где

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}j} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X_{\mathbf{q}j}^2} + \frac{M\omega_j^2(\mathbf{q})}{2} X_{\mathbf{q}j}^2, \quad (11.14)$$

— гамильтониан осциллятора типа (\mathbf{q}, j) , т. е. с частотой $\omega_j(\mathbf{q})$.

Решение уравнения Шредингера для колеблющейся решетки

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{реш}} \Phi = E\Phi, \quad (11.15)$$

очевидно, будет иметь известный вид

$$E = \sum_{\mathbf{q}j} \varepsilon_{\mathbf{q}j} \text{ и } \Phi = \prod_{\mathbf{q}j} \varphi_{N_{\mathbf{q}j}}(X_{\mathbf{q}j}), \quad (11.16)$$

где

$$\varepsilon_{\mathbf{q}j} = (N_{\mathbf{q}j} + 1/2) \hbar \omega_j(\mathbf{q}) \quad (11.17)$$

— энергия гармонического осциллятора с частотой $\omega_j(\mathbf{q})$, $N_{\mathbf{q}j} = 0, 1, 2, \dots$ — осцилляторные квантовые числа, $\varphi_{N_{\mathbf{q}j}}(X_{\mathbf{q}j})$ — ортонормированные осцилляторные волновые функции, явный вид которых здесь не будем приводить.

Из (11.16) и (11.17) видно, что с точки зрения квантовой механики полная энергия колебаний решетки

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{q}j} N_{\mathbf{q}j} \hbar \omega_j(\mathbf{q}), \quad (11.18)$$

где $E_0 = \sum_{\mathbf{q}j} (\hbar \omega_j(\mathbf{q})/2)$ — энергия нулевых колебаний. Второй член в (11.18) представляет собой энергию возбуждения гармонических осцилляторов. Поскольку $N_{\mathbf{q}j}$ принимает только целые значения, то энергия кристалла может меняться дискретно — кратно $\hbar \omega_j(\mathbf{q})$. Изменение энергии на величину $\hbar \omega_j(\mathbf{q})$ можно рассматривать как появление частицы с энергией $\hbar \omega_j(\mathbf{q})$ и импульсом $\hbar \mathbf{q}$. Эту частицу, вернее квазичастицу, называют фононом.

Таким образом, энергию возбужденного состояния кристалла, т. е. колеблющегося кристалла, можно представить как энергию идеального фононного газа. В общем случае в этом газе $3sN$ — число сортов фонона*), причем количество фононов данного сорта (\mathbf{q}, j) определяется значением $N_{\mathbf{q}j}$. Согласно квантовой теории основному состоянию кристалла с энергией E_0 , что соответствует $T=0$, можно сопоставить пустой ящик с объемом, равным объему кристалла, а возбужденному состоянию (колеблющийся кристалл при $T \neq 0$) — такой же ящик, заполненный идеальным (невзаимодействующим) фононным газом. С ростом температуры в кристалле возбуждаются все новые частоты $\omega_j(\mathbf{q})$ и растет амплитуда — интенсивность колебания решетки, т. е. в гипотетическом ящике появляются новые сорта фононов и растет число уже имеющихся фононов, что соответствует увеличению амплитуды возбужденных колебаний.

Фононный газ — бозе-газ с химическим потенциалом, равным нулю, поэтому среднее число фононов типа $\omega_j(\mathbf{q})$ с энергией $\hbar \omega_j(\mathbf{q})$ при температуре T определяется функцией Планка

$$N_{\mathbf{q}j} = [\exp(\hbar \omega_j(\mathbf{q})/k_0 T) - 1]^{-1}. \quad (11.19)$$

Гамильтониан невозмущенной задачи (10.3) в случае рассеяния электрона на колебаниях решетки, согласно (11.1), дается

*) Сорт фонона определяется набором (\mathbf{q}, j) , т. е. $\omega_j(\mathbf{q})$.

суммой гамильтонианов (11.2) и (11.13). Совокупность квантовых чисел в (10.3), определяющая одно состояние системы электрон проводимости — колеблющаяся решетка, $n \Rightarrow (\mathbf{k}, \tilde{N}_{qj})$, где \mathbf{k} — волновой вектор электрона проводимости, а \tilde{N}_{qj} обозначает множество $3sN$ чисел осцилляторных квантовых чисел: $\tilde{N}_{qj} \Rightarrow (N_{q_1 1} \dots N_{q_N 1}; N_{q_1 2} \dots N_{q_N 2}; \dots N_{q_1 3s} \dots N_{q_N 3s})$.

Соответствующие (10.3) волновые функции невозмущенной системы $\psi_n \rightarrow \psi_{\mathbf{k}\tilde{N}_{qj}}$ и энергии $E_n \rightarrow E_{\mathbf{k}\tilde{N}_{qj}}$ в данном случае имеют вид

$$\psi_{\mathbf{k}\tilde{N}_{qj}} = \psi_{\mathbf{k}}(r) \prod_{qj} \varphi_{N_{qj}}(X_{qj}), \quad (11.20)$$

$$E_{\mathbf{k}\tilde{N}_{qj}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \sum_{qj} (N_{qj} + 1/2) \hbar \omega_j(q). \quad (11.21)$$

Вероятность перехода (10.14) в данном случае ($\mathbf{k}\tilde{N}_{qj} \rightarrow \mathbf{k}'\tilde{N}'_{qj}$) нужно переписать:

$$W(\mathbf{k}\tilde{N}_{qj}, \mathbf{k}'\tilde{N}'_{qj}) = 2\pi \hbar^{-1} |\langle \mathbf{k}'\tilde{N}'_{qj} | \hat{\mathcal{H}}' | \mathbf{k}\tilde{N}_{qj} \rangle|^2 \delta \times \\ \times \left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \sum_{qj} (N'_{qj} - N_{qj}) \hbar \omega_j(q) \right). \quad (11.22)$$

Поскольку нас интересует только вероятность перехода носителей заряда из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' , то (11.22) необходимо суммировать по конечным состояниям фононной системы, т. е.

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\tilde{N}'_{qj}} W(\mathbf{k}\tilde{N}_{qj}, \mathbf{k}'\tilde{N}'_{qj}). \quad (11.23)$$

Из (11.22) видно, что для нахождения $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ необходимо знать явный вид гамильтониана взаимодействия электрона проводимости с решеткой и вычислить матричный элемент на волновых функциях (11.20). Поскольку электрон с неколеблущейся идеальной решеткой не взаимодействует, то $\hat{\mathcal{H}}'$ должен быть связанным с вектором смещения (11.4). С другой стороны, электроны проводимости в полупроводниках занимают только дно зоны проводимости с волновым числом $k \ll 1/a$. Так как электроны взаимодействуют с фононами, волновое число которых $q \sim k$, то нас должны интересовать смещения, соответствующие $qa \ll 1$ (длинные волны). Поэтому, где возможно, мы можем $q \rightarrow 0$. В этом предельном случае длинных волн дискретность кристаллической решетки несущественна, и в (11.4) вектор \mathbf{a}_n можем заменить непрерывным радиусом-вектором \mathbf{r} (приближение континуума). Кроме того, как следует из (11.4а), при $q \rightarrow 0$ вектор $\mathbf{e}_{hj}(q)$ веществен.

Тогда смещение точки \mathbf{r} в кристалле, соответствующее длинным волнам ($aq \ll 1$), будет иметь вид

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{qj} \mathbf{e}_{hj}(q) \{ b_j(q) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + b_j^*(q) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \}. \quad (11.24)$$

Конкретный вид связи $\widehat{\mathcal{H}}'$ с вектором смещения $\mathbf{u}_k(\mathbf{r})$ зависит от сложности элементарной ячейки и природы химической связи в кристалле, т. е. зависит от типа фононов. Этот вопрос подробно анализирован в книге Бонч-Бруевича и Калашникова [5]. Теперь перейдем к рассмотрению взаимодействия электронов проводимости с фононами различных типов.

2. Рассеяние на акустических фононах; метод потенциала деформации. Энергия взаимодействия электрона проводимости с решеткой $\widehat{\mathcal{H}}'$ по сути есть изменение энергии электрона благодаря колебаниям решетки. Это изменение, которое является возмущением движения электрона, можно определить на основе различных методов. Первый метод определения $\widehat{\mathcal{H}}'$ был основан на предположении о *деформируемых ионах* Блоха [25]. Рассеяние носителей заряда на акустических фононах, исходя из этого метода, подробно рассмотрено в книге Ансельма [3].

Мы здесь будем использовать *метод потенциала деформации*, предложенный Бардином и Шокли [26]. Идея этого метода заключается в следующем: когда в кристалле распространяется упругая волна, элементарная ячейка, деформируясь, меняет свой объем (меняется постоянная решетки), что приводит к изменению положения дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, так как ширина зоны чувствительна к величине постоянной решетки. Изменение дна зоны проводимости и есть энергия взаимодействия электронов проводимости с колебаниями решетки. Очевидно, она должна быть связана с величиной смещения (11.24). Известно, что для акустических колебаний при $\mathbf{q} \rightarrow 0$ все атомы в элементарной ячейке колеблются синфазно, т. е. вектор $\mathbf{e}_{kj}(\mathbf{q})$ от номера атома в элементарной ячейке k не зависит. Поэтому вектор $\mathbf{e}_j(\mathbf{q})$ для длинноволновых акустических волн, согласно (11.46), единичен. Тогда в этом случае для смещения из (11.24) можем написать

$$\mathbf{u}_{\text{ак}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1}^3 \mathbf{e}_j(\mathbf{q}) [b_j(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + b_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})], \quad (11.25)$$

где $\mathbf{e}_j(\mathbf{q})$ — единичный вектор поляризации.

Поскольку при длинноволновых акустических колебаниях элементарная ячейка почти не деформируется*) (колеблется только центр масс), то энергия взаимодействия не может быть пропорциональна самому смещению, а должна быть линейной функцией от первых производных смещения $\mathbf{u}_{\text{ак}}(\mathbf{r})$ по координатам:

$$\widehat{\mathcal{H}}'_{\text{ак}} = E_1 \operatorname{div} \mathbf{u}_{\text{ак}}(\mathbf{r}), \quad (11.26)$$

что называется *потенциалом деформации*, а коэффициент пропорциональности E_1 — *константой потенциала деформации*, под-

*) При $\mathbf{q} = 0$ деформация полностью отсутствует.

лежащей определению из эксперимента (~ 10 эВ). Значения E_c для электронов проводимости E_{1c} и для дырок E_{1v} , вообще говоря, различны, так как края зоны при деформации сдвигаются по-разному.

Следует отметить, что (11.26) справедливо только для полупроводников типа $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ с изотропным законом дисперсии, в которых экстремум зоны находится в центре зоны Бриллюэна. В общем случае константа потенциала деформации является тензором $E_{1\alpha\beta}$ и $\widehat{\mathcal{H}}'_{ak} = \sum_{j=1}^3 E_{1\alpha\beta}^{(j)} \tilde{u}_{\alpha\beta}^{(j)}$, где $\tilde{u}_{\alpha\beta}$ — тензор деформации. Даже в кубическом кристалле типа n -Ge $E_{1\alpha\beta}$ не скаляр, а имеет две компоненты, что обуславливает анизотропию рассеяния электронов проводимости в таких полупроводниках.

Подставляя (11.25) в (11.26), получим

$$\widehat{\mathcal{H}}'_{ak} = \frac{iE_1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1}^3 (\mathbf{q}e_j) [b_j(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) - b_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})]. \quad (11.27)$$

Отсюда видно, что в изотропном случае электрон проводимости взаимодействует только с продольными длинноволновыми акустическими фононами ($\mathbf{q} \parallel e_j$). Конечно, в случае анизотропного рассеяния ($E_{1\alpha\beta}$ — тензор) и в случае, когда невозможно разделить колебания на продольные и поперечные, в процессе взаимодействия играют роль и поперечные фононы.

Матричный элемент возмущения $\widehat{\mathcal{H}}'_{ak}$ входящий в (11.22), в силу (11.20), можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' \tilde{N}_{qj} | \widehat{\mathcal{H}}'_{ak} | \mathbf{k} \tilde{N}_{qj} \rangle = \\ = \frac{iE_1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}, j=1,2,3} (\mathbf{q}e_j) \{ \langle \mathbf{k}' | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle \langle \tilde{N}_{qj} | b_j(\mathbf{q}) | \tilde{N}_{qj} \rangle - \\ - \langle \mathbf{k}' | \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle \langle \tilde{N}_{qj} | b_j^*(\mathbf{q}) | \tilde{N}_{qj} \rangle \}. \quad (11.28) \end{aligned}$$

Матричный элемент относительно квантовых состояний электрона, вообще говоря, надо вычислить на основе волновых функций Блоха (1.15). Однако пока мы здесь будем использовать для электрона проводимости плоскую волну*) (10.18). Тогда получим

$$\langle \mathbf{k}' | \exp(\pm i\mathbf{q}\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \pm \mathbf{q}}. \quad (11.29)$$

Для вычисления интегралов по нормальным координатам решетки в (11.28) можно использовать известные рекуррентные соотношения для осцилляторных функций

$$\left(X_{qj} + \frac{\hbar}{M\omega_j(q)} \frac{\partial}{\partial X_{qj}} \right) \Phi_{N_{qj}}(X_{qj}) = \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega_j(q)}} N_{qj} \Phi_{N_{qj}-1}, \quad (11.30)$$

*) Учет блоховских функций обсуждается в § 12.

$$\left(X_{qj} - \frac{\hbar}{M\omega_j(q)} \frac{\partial}{\partial X_{qj}} \right) \varphi_{N_{qj}}(X_{qj}) = \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega_j(q)}} (N_{qj} + 1) \varphi_{N_{qj}+1}. \quad (11.31)$$

Используя эти соотношения с учетом (11.11), а также условия ортонормированности осцилляторных функций, для нужных матричных элементов получим

$$\langle \tilde{N}'_{qj} | b_j(\mathbf{q}) | \tilde{N}_{qj} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar N_{qj}}{2M\omega_j(q)}} \delta_{N'_{qj}, N_{qj}-1} \prod_{\substack{q' \neq q \\ j' \neq j}} \delta_{N'_{q'j'}, N_{q'j'}}, \quad (11.32)$$

$$\langle \tilde{N}'_{qj} | b_j^*(\mathbf{q}) | \tilde{N}_{qj} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar (N_{qj} + 1)}{2M\omega_j(q)}} \delta_{N'_{qj}, N_{qj}+1} \prod_{\substack{q' \neq q \\ j' \neq j}} \delta_{N'_{q'j'}, N_{q'j'}}. \quad (11.33)$$

Подставляя (11.28) в (11.22) с учетом последних двух формул и суммируя по \tilde{N}'_{qj} , согласно (11.23), получим для вероятности перехода электрона из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' благодаря взаимодействию с акустическими фононами следующее окончательное выражение:

$$W_{\text{ак}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{q}} w_1(q) (A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^+(\mathbf{q}) + A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^-(\mathbf{q})), \quad (11.34)$$

где

$$A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\pm}(\mathbf{q}) = \left(N_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \mp \hbar\omega(\mathbf{q})) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \pm \mathbf{q}}, \quad (11.35)$$

а

$$w_1(q) = \frac{\pi E_1^2 q^2}{NM\omega(q)}, \quad (11.36)$$

$\omega(q)$ — частота продольных акустических фононов; при этом мы учли, что \mathbf{e}_j — единичный вектор и $(\mathbf{q}\mathbf{e}_j) = q$.

Первое слагаемое в правой части выражения (11.34) есть вероятность перехода $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ из-за поглощения фононов, а второе — из-за испускания фононов; δ -функции и δ -символы, входящие в (11.34), выражают законы сохранения энергии и импульса, соответственно,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}'} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega(q), \quad \mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}. \quad (11.37)$$

Видно, что рассеяние на акустических фононах, вообще говоря, неупруго. Однако покажем, что при не очень низких температурах этот процесс носит упругий характер. Для этого, используя (11.5) и закон сохранения импульса $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$, оценим отношение

$$\frac{\hbar\omega(q)}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{\hbar v_0 |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{v_0 \sqrt{mk_0 T}}{k_0 T} = \sqrt{\frac{T_0}{T}} \ll 1, \quad (11.38)$$

где мы предположили, что $\hbar|\mathbf{k}' - \mathbf{k}| \approx \sqrt{mk_0 T}$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx k_0 T$; в (11.38)

$T_0 = mv_0^2/k_0$, v_0 — скорость звука в кристалле, m — эффективная масса носителей заряда.

Полагая $m \approx 10^{-28}$ г, $v_0 = 3 \cdot 10^5$ см/с, получим $T_0 \approx 1$ К. Таким образом, при $T \gg T_0 \approx 1$ К энергия поглощаемого и испускаемого фонона пренебрежимо мала по сравнению с энергией носителей заряда и рассеяние почти упруго. Поэтому при вычислениях, где возможно, мы можем считать $\hbar\omega(q) \ll \varepsilon_k$ и пренебречь энергией фонона.

В случае вырожденного электронного газа $\bar{\varepsilon}_k \approx \zeta_F$ и отношение

$$\hbar\omega(q)/\bar{\varepsilon}_k \approx (T_0/T_{\text{выр}})^{1/2} \ll 1, \quad (11.39)$$

где $T_{\text{выр}} = \zeta_F/k_0$ — температура вырождения электронов проводимости. Таким образом, как для невырожденных, так и для вырожденных полупроводников неупругостью рассеяния можно пренебречь. Кроме того, как видно из (11.38), $\hbar\omega(q) \ll k_0T$, и поэтому можно разложить функцию Планка. Тогда

$$N_q + 1 \approx N_q \approx k_0T/\hbar\omega(q) = k_0T/\hbar v_0 q. \quad (11.40)$$

Поскольку рассеяние электрона на акустических фононах является упругим, то в аргументах δ -функций в (11.35) можно пренебречь энергией фонона. Тогда с учетом (11.36) и (11.40) из (11.34), после тривиального суммирования по q с помощью законов сохранения импульса, для вероятности перехода $k \rightarrow k'$ при рассеянии на акустических фононах получим простое выражение

$$W_{\text{ак}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{MN} \frac{E_1^2}{\hbar v_0^2} k_0 T \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k). \quad (11.41)$$

Теперь можно подставить (11.41) в (9.23) и вычислить время релаксации

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{2\pi}{MN} \frac{E_1^2}{\hbar v_0^2} k_0 T \sum_{k'} \left(1 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{kk'}\right) \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k). \quad (11.42)$$

Отсюда видно, что при суммировании по k' второй член дает нуль. Следовательно, в упругом приближении и при выполнении (11.40) приход в k -состояние из всевозможных k' -состояний в процессе релаксации не играет роли.

В дальнейшем рассмотрим, так же как и в [27], произвольную изотропную, т. е. сферически-симметричную зону (9.1) и в (11.42) от суммы по k' , согласно (2.15), перейдем к интегралу. Если в полученном интеграле элементы объема в k' -пространстве записать в сферической системе координат, то интеграл по углам дает 4π , а интеграл по величине k' можно взять с по-

мощью δ -функций. В результате для времени релаксации получим выражение *)

$$\tau(k) = \frac{\pi \hbar \rho v_0^2}{E_1^2 k_0 T} \frac{1}{k^2} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial k} \right), \quad (11.43)$$

где $\rho = MN/V$ — плотность кристалла.

В случае стандартной зоны $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m_n$ и из (11.43) следует известная формула

$$\tau(\epsilon) = \frac{2\pi \hbar^4 \rho v_0^2}{E_1^2 (2m_n k_0 T)^{3/2}} \left(\frac{\epsilon}{k_0 T} \right)^{-1/2}, \quad (11.44)$$

из которой видно, что время релаксации носителей заряда на акустических фононах $\tau \sim T^{-1} \epsilon^{-1/2}$.

Используя определение эффективной массы (1.12) и скорости $v = (1/\hbar)(\partial \epsilon / \partial k)$, из (11.43) получим длину свободного пробега электронов проводимости в полупроводниках с произвольной изотропной зоной, определяемую рассеянием на акустических фононах:

$$l_{\text{ак}} = \frac{\pi \hbar^4 \rho v_0^2}{E_1^2 k_0 T} \frac{1}{m^2(\epsilon)}. \quad (11.45)$$

Отсюда видно, что в общем случае нестандартной зоны $l_{\text{ак}}$ от энергии зависит через $m(\epsilon)$, т. е. в вырожденных полупроводниках с непараболическим законом в случае рассеяния на акустических фононах $l_{\text{ак}}$ должна уменьшаться с ростом концентрации свободных носителей. Длина свободного пробега от энергии не зависит только для параболической зоны, когда $m(\epsilon) \rightarrow m_n$. В этом случае можно оценить l и сравнить ее с постоянной решетки a . Действительно, если в (11.45) заменить $m(\epsilon)$ на m_n , учесть, что $\rho = M/\Omega_0 = M/a^3$, то для стандартной зоны $l_{\text{ак}}$ можно представить в виде

$$l_{\text{ак}} = \pi \left(\frac{\hbar^2 / m_n a^2}{E_1} \right)^2 \frac{M v_0^2}{k_0 T} a \gg a. \quad (11.46)$$

Непосредственная оценка (11.46) показывает, что $l_{\text{ак}} \gg a$. То, что длина свободного пробега намного превышает постоянную решетки, связано с квантовой природой движения носителей заряда.

- Рассеяние на акустических колебаниях решетки имеет место во всех кристаллах независимо от сложности элементарной ячейки. Однако, если кристалл имеет простую решетку (один атом

*) Отметим, что примененный здесь порядок суммирования, т. е. сначала по q в (11.34) с использованием законов сохранения импульса, а затем по k в (11.42) с помощью закона сохранения энергии, значительно упрощает расчет $\tau(k)$, и не нужно заботиться о пределах интегрирования по волновому вектору фотона dq .

в элементарной ячейке), то рассеяние на акустических колебаниях является единственным механизмом взаимодействия носителей заряда с решеткой. В тех кристаллах, у которых решетка сложна — на элементарную ячейку приходится два или больше атомов или ионов, помимо рассеяния на акустических колебаниях существуют и другие, иногда более важные, чем акустическое рассеяние, механизмы взаимодействия носителей заряда с решеткой. К ним относится рассеяние на оптических и пьезоэлектрических колебаниях решетки. На этих механизмах рассеяния останемся отдельно.

3. Рассеяние на неполярных оптических фононах; метод потенциала деформации. Известно, что при длинноволновых оптических колебаниях ($q \rightarrow 0$) атомы в элементарной ячейке колеблются почти противуположно, так что центр тяжести остается неподвижным. Поэтому деформация кристалла и соответственно изменение краев зоны, т. е. энергия взаимодействия, в этом случае будет пропорциональна смещению любого из атомов в элементарной ячейке (11.24). Следовательно, оператор взаимодействия носителей заряда с оптическими колебаниями решетки можно представить в виде [5]

$$\widehat{\mathcal{H}}'_{\text{опт}} = \sum_{j=4}^{3s} A_j u_j, \quad (11.47)$$

где u_j — смещение, соответствующее j -й ветви, A_j — некоторый постоянный вектор, который определяется симметрией расположения минимумов энергетической зоны носителей заряда.

Например, было показано [28], что для n -Si вектор $A_j = 0$, а для n -Ge он отличен от нуля. При $A_j = 0$ в (11.47) надо включить слагаемые с производными типа (11.26).

Для простоты рассмотрим рассеяние носителей заряда, находящихся на данном минимуме, на одной оптической ветви*) и вектор A представим в виде

$$A = E_0 b_g, \quad (11.48)$$

где $b_g = \frac{\pi}{a} g$ — вектор обратной решетки, a — постоянная решетки, g — единичный вектор, направленный из центра зоны Бриллюэна в рассматриваемый минимум, E_0 — константа оптического потенциала деформации с размерностью энергии.

Учитывая последние два соотношения, а также (11.24), для гамильтониана деформационного взаимодействия электронов с длинноволновыми оптическими колебаниями решетки находим**)

$$\widehat{\mathcal{H}}'_{\text{опт}} = \frac{\pi}{a} \frac{E_0}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} (g_{\mathbf{e}}) \{ b(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + b^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \}. \quad (11.49)$$

*) Полученные при этом результаты следует суммировать по ветвям оптических колебаний.

**) Множитель π/a в этом выражении появился из-за того, чтобы константа E_0 имела размерность энергии.

Дальнейшие вычисления полностью аналогичны тем, которые сделаны в случае рассеяния на акустических фононах в предыдущем пункте.

В результате для вероятности перехода $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$, обусловленного рассеянием на неполярных оптических фононах, аналогично (11.34), получим выражение

$$W_{\text{опт}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{q}} w_0(q) (A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^+(q) + A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^-(q)), \quad (11.50)$$

где $A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\pm}(q)$ дается формулой (11.35), а

$$w_0(q) = (\pi E_0^2 / NM \omega(q)) (\pi/a)^2 (ge)^2. \quad (11.51)$$

Если не учесть дисперсии оптических фононов, т. е., согласно (11.6), при $q \rightarrow 0$ считать, что

$$\omega(q) = \omega_0, \quad (11.52)$$

то выражение под знаком суммы в (11.50) не будет зависеть от волнового вектора фононов \mathbf{q} и суммирование по \mathbf{q} становится тривиальным. Тогда имеем

$$W_{\text{опт}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = w_0 [N_0 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_0) + (N_0 + 1) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_0)] \quad (11.53)$$

здесь

$$w_0 = (\pi E_0^2 / NM \omega_0) (\pi/a)^2, \quad (11.54)$$

а

$$N_0 = [\exp(\hbar\omega_0/k_0T) - 1]^{-1} \quad (11.55)$$

— число оптических фононов с предельной частотой ω_0 при температуре T ; при переходе от (11.51) к (11.54) положен $(ge) = 1$.

Энергия оптических фононов $\hbar\omega_0$ немала, и рассеяние в этом случае существенно неупруго. Поэтому рассеяние на оптических фононах, вообще говоря, нельзя описать временем релаксации. Однако, если вероятность перехода $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ является четной функцией \mathbf{k}' , т. е. $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$, то можно ввести время релаксации даже при неупругом рассеянии. Действительно, если в (9.7) учтем, что $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$, а неравновесная добавка к функции распределения $f_1 \sim \mathbf{k}'$, то при суммировании по \mathbf{k}' второе слагаемое в (9.7) исчезает и время релаксации имеет вид *)

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left(\frac{1 - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}'})}{1 - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})} \right). \quad (11.56)$$

Видно, что в этом случае релаксация определяется процессом

*) Этот результат следует также из (9.22). Действительно, при $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$ интегрирование по углу θ аннулирует второй член, содержащий $\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}') = vv' \cos \theta$.

ухода электронов из k -состояний, а процесс прихода в это состояние не играет роли.

Указанному выше условию $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$ удовлетворяет вероятность рассеяния носителей заряда с изотропным законом дисперсии (11.53) на неполярных оптических фононах с предельной частотой ω_0 . Подставляя (11.57) в (11.60) и переходя, согласно (2.15), к интегралу по \mathbf{k}' , для времени релаксации получим *)

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{Vw_0}{6\pi^2} \frac{N_0}{f_0(\varepsilon)} \left[f_0(\varepsilon + \hbar\omega_0) \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0T}\right) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} k^3(\varepsilon + \hbar\omega_0) + \Theta(\varepsilon - \hbar\omega_0) f_0(\varepsilon - \hbar\omega_0) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} k^3(\varepsilon - \hbar\omega_0) \right], \quad (11.57)$$

где $\Theta(x)$ — ступенчатая функция: $\Theta(x) = 0$ при $x < 0$, $\Theta(x) = 1$ при $x > 0$; $k(\varepsilon)$ — произвольная функция от энергии, определяющая закон дисперсии носителей заряда, явный вид которой для модели Кейна дается (3.25) и (3.26).

Отметим, что (11.57) является общим выражением времени релаксации при рассеянии на неполярных фононах, из которого следуют все частные случаи. При высоких температурах, когда $k_0T \gg \hbar\omega_0$, и можно пренебречь неупругостью, τ не зависит от степени вырождения носителей, и из (11.57) с учетом (11.55) следует простое выражение времени релаксации для произвольной изотропной зоны

$$\tau(k) = \frac{1}{\pi\hbar} \left(\frac{\hbar\omega_0}{E_0}\right)^3 \frac{\rho a^3}{k_0T} \frac{1}{k^2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}\right). \quad (11.58)$$

Из сравнения этой формулы с (11.43) видно, что зависимость $\tau(\varepsilon, T)$ при высоких температурах в случае рассеяния на акустических фононах и неполярных оптических фононах одинакова: $\tau \sim T^{-1}k^{-2}(\varepsilon) (\partial \varepsilon / \partial k)$.

Интересно сравнить длины свободного пробега для этих двух механизмов рассеяния. Из (11.43) и (11.58) следует, что

$$\frac{l_{\text{опт}}}{l_{\text{ак}}} = \left(\frac{E_1}{E_0}\right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega_{\text{акmax}}}\right)^2, \quad (11.59)$$

где $\omega_{\text{акmax}} = v_0 q_{\text{max}} = v_0 \pi / a$ — максимальная частота акустических фононов. Видно, что если предположить $E_1 \approx E_0$, то $l_{\text{опт}} \approx l_{\text{ак}}$, так как $\omega_{\text{акmax}} \approx \omega_0$. Если $E_0 > E_1$, то рассеяние на неполярных фононах может играть более важную роль: $l_{\text{опт}} < l_{\text{ак}}$.

Для параболической зоны $k(\varepsilon) = (1/\hbar)(2m_n \varepsilon)^{1/2}$, и из (11.58) имеем

$$\tau(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar\omega_0}{E_0}\right)^2 \frac{\hbar^2 a^3 \rho}{(2m_n k_0 T)^{3/2}} \left(\frac{\varepsilon}{k_0 T}\right)^{-1/2}. \quad (11.60)$$

*) При этом интегрирование по углам дает 4π , а интеграл по $d\mathbf{k}' = (\partial \mathbf{k}' / \partial \varepsilon') d\varepsilon'$ берется с помощью δ -функций по энергиям.

В случае невырожденных полупроводников (11.57) принимает вид

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{V\omega_0}{6\pi^2} N_0 \left[\frac{\partial}{\partial \varepsilon} k^3 (\varepsilon + \hbar\omega_0) + \Theta(\varepsilon - \hbar\omega_0) \exp(\hbar\omega_0/k_0T) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} k^3 (\varepsilon - \hbar\omega_0) \right]. \quad (11.61)$$

Если учесть, что для простой параболической зоны $k(\varepsilon) = (1/\hbar)(2m_n\varepsilon)^{1/2}$, то из (11.61) имеем

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{E_0^2 m_n^{3/2}}{\rho a^2 \omega_0 \hbar^3} N_0 \left(\sqrt{\varepsilon + \hbar\omega_0} + \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0T}\right) \Theta(\varepsilon - \hbar\omega_0) \sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_0} \right). \quad (11.62)$$

При высоких температурах ($k_0T \gg \hbar\omega_0$, $\varepsilon > \hbar\omega_0$) из (11.62) следует (11.60), а при низких температурах ($k_0T \ll \hbar\omega_0$, $\varepsilon < \hbar\omega_0$) процесс испускания фонона невозможен и

$$\tau = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{\rho a^2 \hbar^2 (\hbar\omega_0)^{1/2}}{E_0^2 m_n^{3/2}} \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0T}\right), \quad (11.63)$$

которое определяется только поглощением фонона с энергией $\varepsilon < \hbar\omega_0$.

Видно, что при низких температурах время релаксации на неполярных оптических фононах от энергии не зависит, а от температуры зависит экспоненциально. Взяв отношение (11.63) к (11.44), легко можно оценить, что при низких температурах $l_{\text{опт}} > l_{\text{ак}}$, т. е. при $k_0T \ll \hbar\omega_0$ доминирующим является механизм рассеяния на акустических фононах.

4. Рассеяние на полярных оптических фононах. Рассмотренный в предыдущем пункте механизм рассеяния на неполярных оптических фононах является единственным механизмом взаимодействия носителей заряда с оптическими колебаниями в кристаллах с ковалентной связью — в *гомополярных кристаллах*. К таким относятся полупроводники типа *n-Ge*. Элементарная ячейка этих кристаллов состоит из нейтральных атомов, и поэтому при оптических колебаниях возникает только потенциал деформации. Однако в *гетерополярных* — ионных (NaCl, KCl и др.) или с ионной долей химической связи (соединения типа $A^{III}B^V$ — InSb, GaAs и др.) кристаллах при оптических колебаниях решетки, помимо деформационного потенциала, возникает электрическая поляризация, которая вызывает дополнительное взаимодействие этих колебаний с носителями заряда. Этот механизм, носящий название *рассеяние на полярных оптических фононах*, во многих кристаллах существеннее, чем рассеяние на акустическом и оптическом деформационном потенциале. Настоящий пункт посвящен этому механизму рассеяния.

Рассмотрим кубический кристалл с ионной долей химической связи с двумя ионами в элементарной ячейке (полупроводники типа $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$). нас будут интересовать длинноволновые

оптические колебания, при которых разноименные ионы, смещаясь в противоположную сторону, вызывают поляризацию решетки. Эта поляризация распространяется по кристаллу и образует поляризационную волну. Вектор поляризации, возникающий при этом в точке \mathbf{r} , согласно [3], имеет вид

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = (NM_0\omega^2(q)/V4\pi\kappa^*)^{1/2}(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2), \quad (11.64)$$

где $M_0 = M_1 \cdot M_2 / (M_1 + M_2)$ — приведенная масса элементарной ячейки, M_1, M_2 — массы ионов, $\omega(q)$ — частота продольных оптических фононов,

$$1/\kappa^* = 1/\kappa_\infty - 1/\kappa_0, \quad (11.65)$$

κ_∞ и κ_0 — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости кристалла, N — число элементарных ячеек в кристалле с объемом V .

В случае длинных волн ($q \rightarrow 0$) смещение ионов дается (11.24). Учитывая это, (11.64) можно переписать в следующем виде:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \left(\frac{M_0}{V} \frac{\omega_0^2}{4\pi\kappa^*} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=4,5,6} (\mathbf{e}_{1j}(\mathbf{q}) - \mathbf{e}_{2j}(\mathbf{q})) \times \\ \times (b_j(\mathbf{q})\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + b_j^*(\mathbf{q})\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})). \quad (11.66)$$

В длинноволновом приближении ($q \rightarrow 0$), согласно (11.4а), вектор $\mathbf{e}_j(\mathbf{q})$ веществен. Тогда (11.4б) в нашем случае ($s = 2$) имеет вид

$$M_1 e_{1j}^2 + M_2 e_{2j}^2 = M_1 + M_2. \quad (11.67)$$

Для нахождения $(\mathbf{e}_{1j} - \mathbf{e}_{2j})$ к уравнению (11.67) добавим условие неподвижности центра масс элементарной ячейки при длинноволновых оптических колебаниях:

$$M_1 \mathbf{e}_{1j} + M_2 \mathbf{e}_{2j} = 0. \quad (11.68)$$

Из последних двух уравнений легко найти

$$\mathbf{e}_{1j} = (M_2/M_1)^{1/2} \mathbf{e}_j, \quad \mathbf{e}_{2j} = -(M_1/M_2)^{1/2} \mathbf{e}_j, \quad (11.69)$$

где \mathbf{e}_j — единичный вектор, определяющий направление смещения при колебаниях данной ветви. Видно, что ионы в элементарной ячейке действительно смещаются в противоположных направлениях.

С учетом (11.69) выражение (11.66) принимает вид

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \left(\frac{M}{V} \frac{\omega_0^2}{4\pi\kappa^*} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=4,5,6} \mathbf{e}_j (b_j(\mathbf{q})\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + b_j^*(\mathbf{q})\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})), \quad (11.70)$$

где $M = M_1 + M_2$ — масса элементарной ячейки.

Вектор поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ эквивалентен наличию связанного заряда с плотностью $\rho_g(\mathbf{r}) = -\text{div } \mathbf{P}(\mathbf{r})$, что соответствует скаляр-

ному потенциалу φ , удовлетворяющему уравнению Пуассона *)

$$\nabla\varphi = -4\pi\rho_g = 4\pi \operatorname{div} \mathbf{P}(\mathbf{r}). \quad (11.71)$$

Подставляя (11.70) в это уравнение, легко можно найти φ и тем самым определить энергию возмущения $\widehat{\mathcal{H}}'_{\text{пол}} = \pm e\varphi$, связанную с поляризационными оптическими колебаниями решетки. В результате имеем

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}'_{\text{пол}} = \mp ie \left(\frac{M}{V} \frac{4\pi\omega^2(q)}{\kappa^*} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=4,5,6} \frac{1}{q^2} (\mathbf{e}_j \mathbf{q}) \times \\ \times (b_j(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + b_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})). \end{aligned} \quad (11.72)$$

Из этого выражения видно, что носители заряда взаимодействуют только с продольными поляризационными оптическими колебаниями, для которых $\mathbf{e}_j \parallel \mathbf{q}$ и $(\mathbf{e}_j \mathbf{q}) = q$. Поэтому в сумме по j остается всего один член, и в дальнейшем индекс, показывающий номер ветви, мы опустим.

Поступая точно так же, как и в случае рассеяния на акустических фононах [переход от (11.27) к (11.34)], из (11.72) легко получим вероятность перехода $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ благодаря взаимодействию носителей заряда с полярными оптическими фононами:

$$W_{\text{пол}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{q}} w(q) (A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^+(q) + A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^-(q)), \quad (11.73)$$

где $A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\pm}(q)$ дается формулой (11.35), а

$$w(q) = (4\pi^2 e^2 / V\kappa^*) (\omega(q) / q^2), \quad (11.74)$$

$\omega(q)$ — частота продольного оптического колебания.

Если не учесть дисперсии оптических фононов $\omega(q) = \omega_0$, то суммирование по \mathbf{q} в (11.73) с помощью законов сохранения импульса дает замкнутое выражение для вероятности перехода при рассеянии на полярных оптических фононах:

$$\begin{aligned} W_{\text{пол}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{4\pi^2 e^2}{V\kappa^*} \frac{\omega_0}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} [N_0 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_0) + \\ + (N_0 + 1) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_0)], \end{aligned} \quad (11.75)$$

где N_0 — число оптических фононов с предельной частотой ω_0 (11.55).

Из (11.75) видно, что, в отличие от неполярных фононов, в случае рассеяния на полярных оптических фононах вероятность перехода существенно зависит от направления \mathbf{k} и \mathbf{k}' . Поэтому формула (11.56) для полярных оптических фононов несправедлива, и в общем случае нельзя ввести время релаксации при рассеянии на полярных оптических колебаниях.

*) Наличие свободных зарядов в кристалле не учитываем, т. е. пренебрегаем экранировкой поляризованного поля. Учет экранировки обсуждается в п. 6 настоящего параграфа.

Процесс рассеяния на полярных оптических фононах можно описать временем релаксации только в двух предельных случаях: в случае высоких температур ($k_0T \gg \hbar\omega_0$) и низких температур ($k_0T \ll \hbar\omega_0$). Отдельно рассмотрим эти случаи.

В области высоких температур ($k_0T \gg \hbar\omega_0$) неупругостью можно пренебречь, $\epsilon_{k'} \approx \epsilon_k$ и $N_0 + 1 \approx N_0 \approx k_0T/\hbar\omega_0$. Тогда (11.75) примет вид

$$W_{\text{пол}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{8\pi^2 e^2}{V\kappa^*} \frac{k_0T}{\hbar} \frac{1}{(k' - k)^2} \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k). \quad (11.76)$$

Подставляя (11.76) в (9.23), переходя, согласно (2.15), к интегралу по dk' в сферической системе координат с полярной осью вдоль \mathbf{k} и используя δ -функцию при интегрировании по величине k' , легко получим выражение $\tau(k)$, справедливое для произвольной изотропной зоны*):

$$\tau(k) = (\kappa^* \hbar / 2e^2 k_0 T) (\partial \epsilon / \partial k). \quad (11.77)$$

Заметим, что, в отличие от неполярной оптики, $\tau(k)$ в случае рассеяния на полярных оптических фононах при высоких температурах от частоты фононов не зависит [ср. формулы (11.77) с (11.58)]. Для стандартной зоны $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m_n$ (11.77) принимает известный вид

$$\tau(\epsilon) = (1/2\alpha) (\hbar/\omega_0 k_0 T)^{1/2} (\epsilon/k_0 T)^{1/2}, \quad (11.78)$$

где

$$\alpha = (e^2 / \kappa^* \hbar) (m_n / 2\hbar\omega_0)^{1/2} \quad (11.79)$$

— безразмерный параметр, введенный Фрелихом, который характеризует взаимодействие электрона проводимости с длинноволновыми продольными оптическими фононами в ионных кристаллах.

Приведенный здесь расчет времени релаксации основан на теории возмущения и справедлив в том случае, когда $\alpha < 1$. Для многих полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ это условие хорошо выполняется. Например, для InSb $\alpha = 0,015$, для GaAs $\alpha = 0,054$, для InP $\alpha = 0,031$, для GaP $\alpha = 0,092$, для CdTe $\alpha = 0,39$ и для CdS $\alpha = 0,65$ [6, 59].

Длина свободного пробега носителей заряда, обусловленная рассеянием на полярных фононах, согласно (11.78), при $\epsilon \approx k_0T$ равна

$$l_{\text{пол}} = \frac{\hbar k}{m_n} \tau = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\hbar}{2m_n \omega_0} \right)^{1/2}. \quad (11.80)$$

Если оценить $l_{\text{пол}}$, то для всех соединений $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ получим, что $l_{\text{пол}} > a$.

*) Как видно из вывода (11.77), в отличие от неполярных оптических и акустических фононов, в случае рассеяния на полярных оптических фононах в процессе релаксации процессы ухода и прихода играют одинаково важную роль.

Отметим, что $\tau_{\text{пол}} \sim T^{-1}\epsilon^{1/2}$, тогда как $\tau_{\text{опт}} \sim T^{-1}\epsilon^{-1/2}$ (11.60). Следовательно, с ростом энергии ϵ рассеяние на неполярных фононах может стать доминирующим ($\tau_{\text{опт}} < \tau_{\text{пол}}$), что, по-видимому, имеет место в сильных электрических полях для горячих электронов.

В области низких температур ($k_0 T \ll \hbar\omega_0$) процесс рассеяния на оптических фононах существенно неупругий, и нельзя ввести время релаксации, как мы ввели, основываясь на факте упругости взаимодействия [см. формулу (9.23)]. Однако здесь другое обстоятельство позволяет процесс релаксации описать временем релаксации [21]. Знаем, что в этом случае механизм взаимодействия состоит из перехода $\epsilon(\mathbf{k}) \rightarrow \epsilon(\mathbf{k}') = \epsilon(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega_0$ (уход из состояния \mathbf{k}) и $\epsilon(\mathbf{k}') \pm \hbar\omega_0 \rightarrow \epsilon(\mathbf{k})$ (приход в \mathbf{k} -состояние) благодаря поглощению и испусканию фонона. При низких температурах ($k_0 T \ll \hbar\omega_0$) из этих четырех процессов, очевидно, может иметь место только один: $\epsilon(\mathbf{k}) \rightarrow \epsilon(\mathbf{k}') = \epsilon(\mathbf{k}) + \hbar\omega_0$, т. е. возможен только уход из \mathbf{k} - в другие \mathbf{k}' -состояния с поглощением фонона. Поглотив фонон, эти же электроны мгновенно (спонтанно) испускают фонон с такой же энергией $\hbar\omega_0$, так как отношение вероятности испускания к вероятности поглощения равно $(N_0 + 1)/N_0 \approx \exp(\hbar\omega_0/k_0 T) \gg 1$. Благодаря такому процессу происходит релаксация по импульсу, а энергия электрона не меняется. Поскольку эти процессы поглощения и испускания фононов происходят мгновенно, то функция распределения $f(\mathbf{k}')$ не успевает измениться. Поэтому в (9.7) можно пренебречь членом, пропорциональным $f_1(\mathbf{k}')$. Тогда время релаксации будет иметь вид (11.56), только с той разницей, что теперь в (11.56) будет входить та часть вероятности (11.75), которая связана с поглощением фононов, т. е. в этом случае

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{4\pi^2 e^2}{V \kappa^*} \omega_0 N_0 \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1 - f_0(\epsilon_{\mathbf{k}'})}{1 - f_0(\epsilon_{\mathbf{k}})} \frac{1}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_0). \quad (11.81)$$

Согласно (2.15) перейдем к интегрированию по $d\mathbf{k}'$ и полярную ось сферической системы координат направим вдоль \mathbf{k} . При этом интегралы по углам легко вычисляются. Затем от интегрирования по $d\mathbf{k}'$ перейдем к интегрированию по $d\epsilon'$ и используем закон сохранения энергии. В результате для произвольной изотропной зоны при произвольной степени вырождения носителей тока получим выражение

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{e^2 \omega_0}{\kappa^*} \frac{f_0(\epsilon + \hbar\omega_0)}{f_0(\epsilon)} \frac{k(\epsilon' + \hbar\omega_0)}{k(\epsilon)} \frac{\partial k(\epsilon + \hbar\omega_0)}{\partial \epsilon} \ln \left[\frac{k(\epsilon + \hbar\omega_0) + k(\epsilon)}{k(\epsilon + \hbar\omega_0) - k(\epsilon)} \right]. \quad (11.82)$$

В этой формуле предполагается, что $\epsilon \ll \hbar\omega_0$, и поэтому $N_0 \approx \exp(-\hbar\omega_0/k_0 T)$.

Для параболической зоны $k(\epsilon) = (1/\hbar)(2m_n \epsilon)^{1/2}$. Если разложить логарифм по малой величине $\epsilon/\hbar\omega_0$, из (11.82) следует

простое выражение

$$1/\tau(\varepsilon) = 2\alpha\omega_0 f_0(\varepsilon + \hbar\omega_0)/f_0(\varepsilon), \quad (11.83)$$

где α дается формулой (11.79).

При отсутствии вырождения $f_0(\varepsilon) = \exp((\xi - \varepsilon)/k_0T)$, и из (11.83) получаем известный результат [13]

$$\tau = (2a\omega_0)^{-1} \exp(\hbar\omega_0/k_0T). \quad (11.84)$$

Видно, что при рассеянии на полярных оптических фононах τ от энергии ε не зависит только в случае невырожденных полупроводников с простой параболической зоной. В общем случае, как следует из (11.82) и (11.83), τ зависит от энергии, причем не как степенная функция. Но τ от температуры зависит экспоненциально.

5. Рассеяние на пьезоакустических фононах. Если в кристаллах с ионной долей связи отсутствует центр симметрии, то в них при распространении акустической волны, помимо деформационного потенциала (11.26), может возникать потенциал электрической природы — *пьезоэлектрический потенциал*. К пьезоэлектрическим кристаллам относятся цинковая обманка ZnS, некоторые соединения $A^{III}B^V$ (например, InSb, GaAs), $A^{IV}B^{VI}$ (CdS, CdSe) и многие другие [28]. Этот механизм рассеяния впервые был рассмотрен Мейиром и Полдером [29].

Определим явный вид, рассеивающего пьезоакустического потенциала. Известно, что вектор индукции

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}, \quad (11.85)$$

где \mathbf{E} — электрическое поле, а \mathbf{P} — вектор поляризации среды. При наличии пьезоэлектрического эффекта в кристалле имеется дополнительная поляризация, пропорциональная деформации. Тогда компоненты вектора поляризации можно представить в виде

$$P_\alpha = \kappa_{\alpha\sigma} E_\sigma + \beta_{\alpha, \mu\nu} \tilde{u}_{\mu\nu}, \quad (11.86)$$

где $\kappa_{\alpha\sigma}$ — тензор поляризуемости, $\beta_{\alpha, \mu\nu}$ — пьезоэлектрический тензор третьего порядка,

$$\tilde{u}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial u_\nu}{\partial x_\mu} \right) \quad (11.87)$$

— тензор деформации; компоненты вектора смещения u_μ или u_ν в случае акустических колебаний определяются (11.25).

Подставляя (11.86) в (11.85), для компоненты вектора индукции получим

$$D_\alpha = \kappa_{\alpha\sigma} E_\sigma + 4\pi\beta_{\alpha, \mu\nu} \tilde{u}_{\mu\nu}, \quad (11.88)$$

где $\kappa_{\alpha\sigma} = 1 + 4\pi\kappa_{\alpha\sigma}$ — тензор диэлектрической проницаемости.

С другой стороны, известно, что $\mathbf{E} = -\nabla\phi$, а \mathbf{D} удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\rho, \quad (11.89)$$

где ϕ — скалярный потенциал, ρ — плотность свободных зарядов.

Из последних уравнений в общем случае произвольной деформации в кристалле произвольной симметрии следует уравнение

$$\kappa_{\alpha\sigma} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\alpha \partial x_\sigma} - 4\pi \beta_{\alpha,\mu\nu} \frac{\partial \tilde{u}_{\mu\nu}}{\partial x_\alpha} = -4\pi\rho, \quad (11.90)$$

из которого в принципе можно определить φ и, следовательно, энергию взаимодействия носителей заряда с пьезоакустическими колебаниями решетки:

$$\mathcal{H}'_{pz} = -e\varphi. \quad (11.91)$$

Согласно (11.25) тензор деформации (11.87) имеет вид

$$\tilde{u}_{\mu\nu} = \frac{i}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1,2,3} (e_{j\mu} e_{j\nu} + e_{j\nu} e_{j\mu}) \{b_j(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) - b_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})\}. \quad (11.92)$$

Здесь мы не будем учитывать экранировку пьезоэлектрического поля носителями заряда, полагая $\rho=0$. Учет экранировки обсуждается в следующем пункте. Подставляя (11.92) в уравнение (11.90) при $\rho=0$, легко получить его решение φ и, следовательно,

$$\mathcal{H}'_{pz} = -\frac{2\pi e}{\sqrt{N}} \frac{\beta_{\alpha,\mu\nu}}{\kappa_{\alpha\sigma}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1,2,3} \frac{(e_{j\mu} q_\nu + e_{j\nu} q_\mu)}{q_\sigma} \{b_j(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) - b_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})\}. \quad (11.93)$$

Явный вид тензоров $\kappa_{\alpha\sigma}$ и $\beta_{\alpha,\mu\nu}$ определяется симметрией кристалла. Для кубических кристаллов типа цинковой обманки (соединения типа $A^{II}B^V$) диэлектрическая проницаемость является скаляром $\kappa_{\alpha\sigma} = \kappa \delta_{\alpha\sigma}$, а пьезоэлектрический тензор имеет лишь одну независимую компоненту [5]

$$\beta_{x,yz} = \beta_{x,zy} = \beta_{y,xz} = \beta_{y,zx} = \beta_{z,xy} = \beta_{z,yx} = \beta; \quad (11.94)$$

$\beta_{\alpha,\mu\nu} = 0$, если совпадают хотя бы два индекса.

Если даже учесть эти свойства тензоров, потенциал взаимодействия (11.93) остается сильно анизотропным. В общем случае такое рассеяние не описывается скалярным временем релаксации. Поэтому введем некоторую константу E_{pz} , усредненную по углам:

$$2\pi \left[\beta_{\alpha,\mu\nu} \left(e_{\nu\mu} \frac{q_\nu}{q_\alpha} + e_{j\nu} \frac{q_\mu}{q_\alpha} \right) \right]_{\text{ср}} = \frac{1}{3} E_{pz}, \quad (11.95)$$

предполагая, что она одинакова для всех трех акустических ветвей. Кроме того, предположим, что скорости продольных и поперечных акустических волн почти не отличаются*): $v_{\parallel} \approx v_{\perp} = v_0$. Тогда (11.93) имеет простой вид

$$\mathcal{H}'_{pz} = -\frac{eE_{pz}}{\kappa} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} (b(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) - b^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})). \quad (11.96)$$

*) Для InSb $(v_{\parallel}/v_{\perp})^2 = 2,2$.

Коэффициент E_{pz} называется пьезоэлектрической константой и по порядку величины равен $E_{pz} \approx 10^{-5}$ Кл/см².

Используя матричные элементы (11.32) и (11.33), легко получим выражение для вероятности перехода, обусловленной рассеянием на пьезоакустических фононах, аналогичное (11.34):

$$W_{pz}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_q w_{pz}(q) (A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^+(q) + A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^-(q)), \quad (11.97)$$

где $A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\pm(q)$ дается формулой (11.35), а

$$w_{pz}(q) = (\pi e^2 E_{pz}^2 / \kappa^2 N M \omega(q)). \quad (11.98)$$

Дальнейшие вычисления аналогичны вычислениям при рассеянии на деформационном акустическом потенциале. В этом случае также можно пренебречь неупругостью и $N_q + 1 \approx N_q \approx k_0 T / \hbar \omega(q)$, где $\omega(q) = v_0 q$. После суммирования по q , согласно закону сохранения импульса, из (11.97) имеем

$$W_{pz}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi e^2 E_{pz}^2 k_0 T}{\kappa^2 N M v_0^2 \hbar} \frac{1}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (11.99)$$

Подставим (11.99) в (9.23) и перейдем к интегралу по $d\mathbf{k}'$. В сферической системе координат полярную ось направим вдоль \mathbf{k} . После интегрирования получим выражение $\tau_{pz}(k)$, справедливое для произвольной изотропной зоны:

$$\frac{1}{\tau_{pz}(k)} = \frac{e^2 k_0 T E_{pz}^2}{2\pi \hbar \kappa^2 \rho v_0^2} \left(\frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right). \quad (11.100)$$

Если ввести безразмерный коэффициент электромеханической связи [11]

$$\Pi_0^2 = E_{pz}^2 / \kappa \rho v_0^2,$$

то τ_{pz}^{-1} будет иметь вид

$$\frac{1}{\tau_{pz}(k)} = \frac{e^2 k_0 T \Pi_0^2}{2\pi \hbar \kappa} \left(\frac{\partial k}{\partial \varepsilon} \right). \quad (11.101)$$

Во многих полярных полупроводниках безразмерный коэффициент Π_0^2 по порядку величины равен 10^{-3} [11]. Для стандартной зоны $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m_n$ время релаксации (11.101) принимает вид

$$\tau_{pz}(\varepsilon) = \frac{2\pi \hbar^2 \kappa}{e^2 \Pi_0^2} \left(\frac{2}{m_n k_0 T} \right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon}{k_0 T} \right)^{1/2}. \quad (11.102)$$

При сравнении последних двух формул с (11.77) и (11.78) видно, что зависимость времени релаксации τ_{pz} от температуры и энергии такая же, как и в случае рассеяния на полярных оптических фононах при высоких температурах. Однако заметим, что (11.101) и (11.102) справедливы вплоть до очень низких температур — почти во всей области температур. Сравним

длины свободного пробега, определяемые рассеянием на пьезоакустических l_{pz} и полярных оптических фононах $l_{пол}$.

При высоких температурах ($k_0 T \gg \hbar \omega_0$) из (11.77) и (11.101) следует, что

$$l_{pz}/l_{пол} = 4\pi/\Pi_0^2. \quad (11.103)$$

Так как $\Pi_0^2 \approx 10^{-3}$ [11], то видно, что $l_{pz} \gg l_{пол}$. Таким образом, в пьезополупроводниках при высоких температурах рассеяние на полярных оптических фононах играет доминирующую роль.

При низких температурах ($k_0 T \ll \hbar \omega_0$) из (11.102) и (11.84) легко получить, что

$$\frac{l_{pz}}{l_{пол}} = \frac{4\pi}{\Pi_0^2} \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_0 T} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{\hbar \omega_0}{k_0 T} \right). \quad (11.104)$$

Отсюда следует, что при $\hbar \omega_0/k_0 T > 3$ величина $l_{pz} < l_{пол}$, т. е. в полярных полупроводниках без центра симметрии при низких температурах рассеяние на пьезоакустических фононах преобладает по сравнению с рассеянием на полярных оптических фононах.

6. Учет экранировки в случае рассеяния на фононах. При получении гамильтониана взаимодействия носителей заряда с полярными оптическими (11.72) и пьезоакустическими фононами (11.93) мы не учли экранировку электрических потенциалов самими носителями заряда. Здесь коротко обсудим вопрос о том, к чему приводит учет экранировки.

Роль экранировки в полярных полупроводниках рассмотрена Эренрайхом [30], который показал, что учет экранировки приводит к перенормировке частоты продольных оптических колебаний

$$\omega^{экр}(q) = \omega(q) \left(1 + \frac{\kappa_\infty}{\kappa_0} (qr_0)^{-2} \right)^{1/2} (1 + (qr_0)^{-2})^{-1/2}, \quad (11.105)$$

а также к изменению энергии взаимодействия с полярными оптическими фононами

$$\mathcal{H}'_{пол,экр} = (1 + 1/q^2 r_0^2)^{-1} \mathcal{H}'_{пол}, \quad (11.106)$$

где r_0 — радиус экранировки (10.27), κ_∞ и κ_0 — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости кристалла, $\mathcal{H}'_{пол}$ — гамильтониан взаимодействия без учета экранировки (11.72). Для предельной частоты оптических фононов при $q \rightarrow 0$ из (11.105) следует

$$\omega_0^{экр} = (\kappa_\infty/\kappa_0)^{1/2} \omega_0. \quad (11.107)$$

Для соединений $A^{III}B^V$ величины κ_∞ и κ_0 мало отличаются друг от друга: $0,8 < \kappa_\infty/\kappa_0 < 1$, поэтому перенормировка частоты не очень важна. Интересно отметить, что при высоких температурах частота фононов в выражение для τ вообще не входит [см. (11.77)], поэтому ее дисперсия и перенормировка роли не играют.

Если исходить из (11.106), то для вероятности перехода с учетом экранировки получим выражение вида (11.73), только

в нем надо заменить $w(q)$ (11.74) на

$$w^{\text{экр}}(q) = \frac{4\pi^2 e^2 \omega_0^{\text{экр}}}{V\kappa^*} \frac{1}{q^2 (1 + 1/q^2 r_0^2)^2}. \quad (11.108)$$

Подставляя это выражение в (11.73) вместо $w(q)$ и поступая так же, как и при выводе формулы (11.77), получим время релаксации для рассеяния на полярных оптических фононах с учетом экранировки при высоких температурах:

$$\tau(k) = \frac{\kappa^* \hbar}{2e^2 k_0 T} \frac{1}{F_{\text{пол}}(k)} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial k} \right), \quad (11.109)$$

где

$$F_{\text{пол}}(k) = 1 - \frac{2}{\xi} \ln(\xi + 1) + 1/(\xi + 1), \quad \xi = (2kr_0)^2. \quad (11.110)$$

Аналогично можно получить время релаксации на полярных оптических фононах при низких температурах с учетом экранировки. Из-за громоздкости, его здесь приводить не будем.

Перейдем к учету экранировки пьезоакустического потенциала. Пьезоакустический потенциал взаимодействия носителей заряда с решеткой с учетом экранировки изменяется так же, как и (11.106):

$$\widehat{\mathcal{H}}'_{pz\text{экр}} = (1 + 1/q^2 r_0^2)^{-1} \widehat{\mathcal{H}}'_{pz}, \quad (11.111)$$

где $\widehat{\mathcal{H}}'_{pz}$ — гамильтониан взаимодействия без учета экранировки (11.96).

Тогда вероятность перехода в случае рассеяния на пьезоакустических фононах с учетом экранировки имеет вид (11.97), где $w_{pz}(q)$ следует заменить выражением

$$w_{pz}^{\text{экр}}(q) = \frac{\pi e^2 E_{pz}^2}{\kappa N M \omega(q)} \frac{1}{(1 + 1/q^2 r_0^2)^2}. \quad (11.112)$$

Используя (11.112) и (11.97) вместо (11.98), для времени релаксации на экранированном пьезоакустическом потенциале получим [ср. с (11.101)]

$$\tau_{pz}(k) = \frac{2\pi \hbar \kappa}{e^2 k_0 T \Pi_0^2} \frac{1}{F_{pz}(k)} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial k} \right), \quad (11.113)$$

где множитель $F_{pz}(k) = F_{\text{пол}}(k)$ дается формулой (11.110).

Таким образом, одна и та же формула (11.110) определяет роль экранировки в рассеянии на полярных оптических фононах и на пьезоакустических фононах, причем аргументом этой функции является параметр (kr_0) . Проанализируем ее асимптотику в зависимости от этого параметра.

Из (11.110) следует, что при $kr_0 \gg 1$ $F_{\text{пол}} = F_{pz} = 1$, а при $kr_0 \ll 1$

$$F_{\text{пол}} = F_{pz} \approx (1/3) \xi^2 = (16/3) (kr_0)^4. \quad (11.114)$$

Видно, что в последнем случае экранировка очень важна — она сильно меняет даже зависимость τ от k , а именно $\tau^{\text{экр}} \sim k^{-4} (\partial \epsilon / \partial k)$.

Следовательно, когда

$$kr_0 \gg 1 \text{ или } 2\pi r_0 \gg \lambda, \quad (11.115)$$

экранировка не играет роли, а когда

$$kr_0 \ll 1 \text{ или } 2\pi r_0 \ll \lambda, \quad (11.116)$$

экранировка существенна (λ — длина дебройлевской волны носителей заряда).

Для невырожденных полупроводников, если учесть (10.33) и то, что $\lambda = h/p \sim 2\pi (\hbar / (3m_n k_0 T))^{1/2}$, неравенство (11.116) имеет явный вид

$$n \gg (3m_n \chi / 4\pi e^2) (k_0 T / \hbar)^2, \quad (11.117)$$

причем верхняя граница концентрации определяется условием отсутствия вырождения носителей заряда $\exp(\eta) \ll 1$, явный вид которого, согласно (4.46), есть

$$n \ll (2m_n k_0 T)^{3/2} / 4\pi^{3/2} \hbar^3. \quad (11.118)$$

В случае сильно вырожденных полупроводников, согласно (4.11) и (10.33), условие (11.116) принимает вид

$$n \ll (1/3\pi^5) (4m_n e^2 / \chi \hbar^2)^3. \quad (11.119)$$

Знак неравенства в (11.119) объясняется тем, что в сильно вырожденных полупроводниках от концентрации зависит не только длина экранировки, от n зависит также дебройлевская длина волны, причем последняя зависимость более сильная. Нижняя граница n в этом случае определяется условием сильного вырождения (4.14), т. е.

$$n \gg (2m_n k_0 T)^{3/2} / 3\pi^2 \hbar^3. \quad (11.120)$$

Таким образом, в вырожденных полупроводниках экранировка важна до некоторого значения концентрации, определяемого условием (11.119). При больших концентрациях длина дебройлевской волны носителей заряда становится меньше, чем радиус экранировки, и нарушается условие (11.116), следовательно, экранировка не играет роли.

§ 12. Теория рассеяния носителей заряда в полупроводниках с учетом блоховских волновых функций

1. **Обобщенная формула для времени релаксации.** Прежде чем перейти к вопросу о роли блоховских волновых функций в теории рассеяния носителей заряда в полупроводниках, подытожим результаты, полученные в двух предыдущих параграфах.

В простейшем случае, когда зона имеет параболическую форму (3.1) и движение носителей заряда описывается плоской

волной (10.18), время релаксации для всех упругих механизмов рассеяния можно свести к следующей формуле:

$$\tau(\varepsilon) = \tau_{0r}(T) (\varepsilon/k_0T)^{r-1/2}. \quad (12.1)$$

Значения параметра рассеяния r и среднего времени релаксации $\tau_{0r}(T)$, полученные из сравнения (12.1) с формулами

Таблица 5

Значения параметров, входящих в формулы (12.2) и (12.4), для времени релаксации при различных механизмах упругого рассеяния

Механизмы рассеяния	Параметр рассеяния r	$\tau_{0r}(T)$	A_{0r}
Точечные дефекты (короткодействующий потенциал)	0	$\frac{\pi \hbar^4}{m_n (2m_n \hbar_0 T)^{1/2} U_0^2 N_g}$	$\frac{\pi}{\hbar} U_0^2 N_g$
Акустические фононы (потенциал деформации)	0	$\frac{2\pi \hbar^4 \rho v_0^2}{E_1^2 (2m_n \hbar_0 T)^{3/2}}$	$\frac{\pi E_1^2 \hbar_0 T}{\hbar \rho v_0^2}$
Неполярные оптические фононы. Высокие температуры ($k_0 T \gg \hbar \omega_0$ *)	0	$\frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar \omega_0}{E_0} \right)^2 \frac{\hbar^2 a^2 \rho}{(2m_n \hbar_0 T)^{3/2}}$	$\pi^3 \hbar \left(\frac{E_0}{\hbar \omega_0} \right)^2 \frac{\hbar_0 T}{\rho a^2}$
Полярные оптические фононы. Высокие температуры ($k_0 T \gg \hbar \omega_0$)	1	$\frac{1}{2\alpha} \left(\frac{\hbar}{\omega_0 \hbar_0 T} \right)^{1/2}$	$\frac{2\pi^2 \varepsilon^2 \hbar_0 T}{\kappa \hbar}$
Пьезоакустические фононы	1	$\frac{2\pi \hbar^2 \kappa}{e^2 \Pi_0^2} \left(\frac{2}{m_n \hbar_0 T} \right)^{1/2}$	$\frac{\pi e^2 \hbar_0 T \Pi_0^2}{2\hbar \kappa}$
Ионы примеси	2	$\frac{\kappa^2 (2m_n)^{1/2} (\hbar_0 T)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F_{\text{пр}}(e)}$	$\frac{2\pi^3 N_i F_{\text{пр}}(\hbar)}{\hbar \kappa^2}$

*) При низких температурах ($k_0 T \ll \hbar \omega_0$) в случае рассеяния на полярных и неполярных оптических фононах τ от энергии не зависит ($r=1/2$) и для параболической зоны дается формулами (11.63) и (11.84) соответственно.

(10.49), (11.44), (11.60), (11.78), (11.102) и (10.31), для различных упругих механизмов рассеяния приведены в табл. 5.

Видно, что $\tau_{0r}(T)$ почти для всех механизмов рассеяния от энергии не зависит, а $\tau(\varepsilon)$ является степенной функцией энергии. Исключение составляет рассеяние на ионах примеси. В этом случае за счет экранировки в $\tau_{0r}(T)$ появляется функция $F_{\text{пр}}(e)$,

явный вид которой дается (10.30). Однако эта функция довольно слабо зависит от энергии, поэтому при интегрировании обычно ее считают постоянной и выносят за знак интеграла, положив $\epsilon = \bar{\epsilon}$, где $\bar{\epsilon}$ — средняя энергия носителей заряда.

Теперь напомним, как изменяется время релаксации (12.1) при учете других факторов: экранировки при рассеянии на полярных оптических и пьезоакустических фононах и отклонения зоны от параболичности. Согласно (11.109) и (11.113) учет экранировки приводит к появлению функции $F_{\text{пол}}(\epsilon)$, приведенной в (11.110). Таким образом, при учете экранировки $\tau_{01}(T)$ для рассеяния на полярных оптических и пьезоакустических фононах следует заменить на $\tau_{01}^{\text{экр}} = \tau_{01}/F_{\text{пол}}(\epsilon)$.

Для выяснения вопроса о том, как изменится $\tau(\epsilon)$, если зона непараболична, формулу (12.1) удобно представить в виде

$$\tau^{-1} = a_{0r}(T) \epsilon^r g(\epsilon), \quad (12.2)$$

где $g(\epsilon)$ — плотность состояний для параболической зоны (4.12), а

$$a_{0r}(T) = \frac{(k_0 T)^{r-1/2}}{\tau_{0r}(T)} \frac{2\pi^2 \hbar^3}{(2m_n)^{3/2}}. \quad (12.3)$$

Предположим, что зона непараболична, но сферически-симметрична, т. е. энергия есть произвольная функция волнового числа $\epsilon = \epsilon(k)$ или, что то же самое, k есть произвольная функция энергии $k = k(\epsilon)$. Однако будем считать, что носители заряда описываются плоской волной (10.18). В этом случае, согласно формулам (10.48), (11.43), (11.58), (11.77), (11.101) и (10.29), $\tau^{-1}(\epsilon)$ для всех механизмов имеет вид

$$\tau^{-1} = A_{0r} k^{-2r}(\epsilon) g(k(\epsilon)), \quad (12.4)$$

где $g(k(\epsilon))$ — плотность состояний произвольной сферически-симметричной зоны (4.9), а значения A_{0r} приведены в табл. 5*).

Из сравнения (12.4) и (12.2) видно, что τ^{-1} имеет общую структуру:

$$\tau^{-1} \sim W(\epsilon) g(\epsilon), \quad (12.5)$$

где $W(\epsilon)$ — вероятность рассеяния. Видно, что для параболической зоны при разных механизмах рассеяния

$$W(\epsilon) \sim \epsilon^{-r}, \quad (12.6)$$

а для непараболической зоны

$$W(\epsilon) \sim k^{-2r}(\epsilon). \quad (12.7)$$

Однако отметим, что при получении (12.4), следовательно (12.7), в предыдущих параграфах непараболичность зоны учтена непоследовательно. Было предположено, что закон дисперсии

*) При учете экранировки для полярной оптики и пьезоакустики, согласно (11.109) и (11.113), A_{0r} следует умножить на $F_{\text{пол}}(k)$ (11.110).

носителей заряда непараболичен, но когда вычислялся матричный элемент, т. е. вероятность перехода $k \rightarrow k'$, то в качестве волновых функций начального и конечного состояний использовали плоскую волну (10.18). В этом случае, как видно из (12.7), функция вероятности рассеяния $W(\epsilon) \sim k^{-2r}(\epsilon)$. Вопрос ставится так: как изменится эта зависимость, если при вычислении матричных элементов перехода использовать не функцию плоской волны, а настоящие блоховские волновые функции, описывающие движение носителей заряда в кристаллической решетке? Естественно, на этот вопрос нельзя ответить в общем случае, так как неизвестно решение уравнения Шредингера для произвольного периодического потенциала решетки. На поставленный выше вопрос можно ответить только в рамках конкретной модели и определенного приближения.

Здесь мы будем исходить из известной модели Кейна, так как она является наиболее общей моделью, описывающей движение носителей заряда во многих полупроводниковых соединениях типа $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$. Ярким примером соединений первой группы является $InSb$, а второй группы — $HgTe$, в которых непараболичность играет важную роль.

2. Учет блоховских волновых функций в рамках модели Кейна; полупроводники типа $n-InSb$. Теория рассеяния и явления переноса в полупроводниках с узкой запрещенной зоной, у которых зона проводимости существенно непараболична, начала интенсивно развиваться в семидесятые годы, хотя впервые в работе Эренрайха [30] в 1959 г. непараболичность учтена при рассмотрении подвижности и термо-э. д. с. в $InSb$. Вычислению времени релаксации для различных упругих механизмов рассеяния с учетом блоховских волновых функций на основе модели Кейна посвящено довольно много работ [31—36]. Обсуждение некоторых из этих работ можно найти в обстоятельном обзоре Завадского [37], посвященном электронным явлениям переноса в полупроводниках с узкой запрещенной зоной.

В одноэлектронном приближении волновая функция и энергия носителей заряда в полупроводнике определяются из уравнения (1.13), которое символически можно представить в виде

$$\mathcal{H}_0 \Psi_{nkj_z}(\mathbf{r}) = \epsilon_{nj_z}(\mathbf{k}) \Psi_{nkj_z}(\mathbf{r}), \quad (12.8)$$

где \mathcal{H}_0 — невозмущенный гамильтониан, т. е. квадратная скобка в уравнении (1.13), n — номер энергетической зоны; j_z — проекция полного момента электрона. Блоховская волновая функция, нормированная на объем кристалла V ,

$$\Psi_{nkj_z}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} u_{nkj_z}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (12.9)$$

удовлетворяет уравнению (12.8). Явный вид блоховского множителя $u_{nkj_z}(\mathbf{r})$ и энергии $\epsilon_{nj_z}(\mathbf{k})$ можно найти в определенном приближении или для конкретной модели. Здесь мы будем исходить из известной модели Кейна (см. § 3).

Поскольку нас будет интересовать только зона проводимости, то в дальнейшем номер зоны n опустим и положим $f_z = \pm 1/2$, так как в этом случае полный момент совпадает со спиновым моментом. Энергия электрона проводимости от направления спина не зависит и, согласно решению Кейна, определяется из уравнения (3.10), которое в различных приближениях приводит к законам дисперсии (3.19), (3.24) и (3.24а).

Блоховские множители для электрона проводимости в полупроводниках типа n -InSb, согласно модели Кейна, имеют следующий явный вид [32]:

$$u_{k,1/2} = \left(iaS - d^- \frac{k_+}{k} R_- + d^+ \frac{k_-}{k} R_+ + c \frac{k_z}{k} Z \right) \uparrow - b \left(\frac{k_z}{k} R_+ - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k_z}{k} Z \right) \downarrow, \quad (12.10a)$$

$$u_{k,-1/2} = \left(iaS + d^+ \frac{k_+}{k} R_- - d^- \frac{k_-}{k} R_+ + c \frac{k_z}{k} Z \right) \downarrow + b \left(\frac{k_z}{k} R_- - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k_z}{k} Z \right) \uparrow, \quad (12.10b)$$

где $k_{\pm} = k_x \pm k_y$, $R_{\pm} = (X \pm iY) / \sqrt{2}$, стрелки \uparrow и \downarrow показывают направления спина вверх и вниз, S и X, Y, Z есть волновые функции s - и p -симметрии, $d^{\pm} = (1/2)(b \pm c\sqrt{2})$, коэффициенты a, b, c даются выражениями

$$a^2 = 1 - L, \quad b^2 = (1/3)L\beta^2, \quad c^2 = (2/3)L\gamma^2, \quad (12.11)$$

где

$$L = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g + 2\varepsilon}, \quad \beta^2 = \frac{\Delta_0^2}{(\Delta_0 + \varepsilon_g)(\Delta_0 + 3/2\varepsilon_g)}, \quad \gamma^2 = \frac{\Delta_0 + 3/2\varepsilon_g}{\Delta_0 + \varepsilon_g}, \quad (12.12)$$

ε_g — ширина запрещенной зоны, Δ_0 — величина спин-орбитального расщепления валентных зон (3.12).

Условию нормировки блоховских амплитуд (12.10) соответствует равенство $a^2 + b^2 + c^2 = 1$. Как видно из (12.10), если спин-орбитальное расщепление отсутствует ($b = 0$), то блоховские множители чисто спиновые. Отметим, что для полупроводников с широкой запрещенной зоной ($\varepsilon_g \gg \varepsilon$) $L \approx 0$, т. е. $a \approx 1$, $b \approx c \approx 0$. В этом случае зона проводимости параболична, а блоховские множители имеют простой вид $u_{k,1/2} = iS \uparrow$ и $u_{k,-1/2} = iS \downarrow$.

Учет блоховских множителей в теории рассеяния в борновском приближении сводится к тому, что при вычислении матричного элемента потенциала возмущения (10.7) необходимо использовать блоховские функции (12.9) с амплитудой (12.10), а не плоские волны (10.18), как было сделано в предыдущих двух параграфах. Когда вычисляется матричный элемент возмущения в представлении (12.9), встречаются интегралы от произведения некоторой функции $\varphi(\mathbf{r})$ на блоховские амплитуды $u(\mathbf{r})$

по всему объему кристалла V . Согласно общепринятой процедуре эти интегралы можно представить в виде [32]

$$\int_V \varphi(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_V \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \cdot \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u(\mathbf{r}) d\mathbf{r}_0, \quad (12.13)$$

где Ω_0 — объем элементарной ячейки. Тогда на основе (12.13) матричный элемент возмущения $\widehat{\mathcal{H}}'$ есть

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' j'_z | \widehat{\mathcal{H}}' | \mathbf{k} j_z \rangle &= \frac{1}{V} \int_V \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{r}] \widehat{\mathcal{H}}' u_{\mathbf{k}' j'_z}^* u_{\mathbf{k} j_z} d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{V} \int_V \widehat{\mathcal{H}}' \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{r}] d\mathbf{r} \cdot \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{\mathbf{k}' j'_z}^* u_{\mathbf{k} j_z} d\mathbf{r}_0. \end{aligned} \quad (12.14)$$

Интегралы первого типа в (12.14) для различных конкретных возмущений вычислены в предыдущих параграфах. Видно, что для учета блоховских множителей надо определить интегралы по объему элементарной ячейки Ω_0 . Отметим, что разбиение матричного элемента на два интеграла предполагает малое изменение потенциала возмущения в пределах одной элементарной ячейки.

Используя явный вид блоховских множителей (12.10), а также учитывая нормировку для функций S и X, Y, Z :

$$\frac{1}{\Omega_0} \langle S | S \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \langle X | X \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \langle Y | Y \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \langle Z | Z \rangle = 1, \quad (12.15)$$

легко найти интегралы для переходов $(\mathbf{k}, 1/2) \rightarrow (\mathbf{k}', 1/2)$ и $(\mathbf{k}, 1/2) \rightarrow (\mathbf{k}', -1/2)$, соответственно,

$$\frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{\mathbf{k}', 1/2}^* \cdot u_{\mathbf{k}, 1/2} d\mathbf{r}_0 = [a^2 + (b^2 + c^2) \cos \theta], \quad (12.16)$$

$$\frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{\mathbf{k}', -1/2}^* u_{\mathbf{k}, 1/2} d\mathbf{r}_0 = b \left(\frac{1}{2} b - c \sqrt{2} \right) \sin \theta e^{i\varphi}. \quad (12.17)$$

При вычислении этих интегралов для простоты, но не нарушая общности [38], предположили, что ось z направлена по вектору \mathbf{k} , и рассеяние считали упругим, $k = k'$; кроме того, ввели обозначения: φ — полярный угол вектора \mathbf{k}' , θ — угол между векторами \mathbf{k}' и \mathbf{k} , т. е.

$$\cos \theta = (\mathbf{k} \mathbf{k}' / k^2). \quad (12.18)$$

Значения интегралов, соответствующие переходам $(\mathbf{k}, -1/2) \rightarrow (\mathbf{k}', -1/2)$ и $(\mathbf{k}, -1/2) \rightarrow (\mathbf{k}', 1/2)$, равняются комплексному сопряжению выражений, данных в (12.16) и (12.17). Таким образом, вероятность перехода $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ из состояния $j_z = 1/2$ или $j_z = -1/2$ в

борновском приближении с учетом блоховских множителей равна

$$W'(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} (|\langle \mathbf{k}', 1/2 | \widehat{\mathcal{H}}' | \mathbf{k}, 1/2 \rangle|^2 + |\langle \mathbf{k}', -1/2 | \widehat{\mathcal{H}}' | \mathbf{k}, 1/2 \rangle|^2) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}). \quad (12.19)$$

Учитывая (12.16) и (12.17), легко получим

$$W'(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \cdot I(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (12.20)$$

где $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — вероятность перехода без учета блоховских множителей, явный вид которой для различных механизмов дан в формулах (10.28), (10.47), (11.41), (11.53), (11.75) и (11.99); множитель $I(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, появляющийся из-за учета блоховских множителей с использованием (12.18), имеет вид

$$I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left[a^2 + (b^2 + c^2) \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{k^2} \right]^2 + b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 \left(1 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{k^2} \right)^2. \quad (12.21)$$

Второй член в (12.19) и (12.21) соответствует переходу с переворачиванием спина электрона проводимости $(\mathbf{k}, 1/2) \rightarrow (\mathbf{k}', -1/2)$. Видно, что вероятность такого перехода отлична от нуля только при наличии спин-орбитального расщепления. Действительно, когда $\Delta_0 = 0$, то, как видно из (12.12) и (12.11), $\beta = 0$ и $b = 0$, следовательно, второй член в (12.21) исчезает. Если зона параболична ($\epsilon_g \gg \epsilon$), то $I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 1$, так как при этом $L = 0$ и $a = 1$, $b = c = 0$.

Подставляя (12.20) в (9.23) и используя явный вид $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, из предыдущих параграфов и (12.21) можно легко вычислить время релаксации для различных механизмов релаксации $\tau'(k)$ с учетом блоховских множителей. Опуская промежуточные выкладки, здесь приведем окончательные выражения для $\tau'(k)$.

Рассеяние на короткодействующем потенциале. Из (10.47), (12.20), (12.21) и (9.23) получим

$$\tau'(k) = \tau(k) (1/F_g(\epsilon)), \quad (12.22)$$

где $\tau(k)$ — время релаксации без учета блоховских множителей (10.48), а функция $F_g(\epsilon)$ есть

$$F_g(\epsilon) = a^4 - \frac{2}{3} a^2 (b^2 + c^2) + \frac{1}{3} (b^2 + c^2)^2 + \frac{2}{3} b^2 \left(\frac{1}{2} b - c \sqrt{2} \right)^2. \quad (12.23)$$

Учитывая (12.11), $F_g(\epsilon)$ можно переписать в виде

$$F_g(\epsilon) = 1 - (8/3)L + 2L^2 + (1/6)fL^2, \quad (12.24)$$

где

$$f = (4/9)\beta^2(2\gamma - 1/2\beta)^2 \quad (12.25)$$

характеризует переворачивание спина при рассеянии. При $\Delta_0 = 0$ величина $f = 0$, а при $\Delta_0 \rightarrow \infty$ $f = 1$.

Рассеяние на ионизованных атомах примеси. Подставляя (12.20) в (9.23) и учитывая (10.28), для времени релаксации

имеем

$$\tau'(k) = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\pi e^4 N_i F'_{\text{пр}}(k)} k^2 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right). \quad (12.26)$$

Это выражение от (10.29) отличается тем, что здесь вместо (10.30) входит следующая функция [35]:

$$F'_{\text{пр}}(k) = F_{\text{пр}}(k) + 4 \left[b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 - (b^2 + c^2) \right] A - \\ - 2 \left[b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 - (b^2 + c^2)^2 \right] B, \quad (12.27)$$

где $F_{\text{пр}}(k)$ и ξ даются формулой (10.30), а

$$A = 1 + 1/(1 + \xi) - (2/\xi) \ln(1 + \xi), \quad (12.28)$$

$$B = 1 - 4/\xi - 2/\xi(1 + \xi) + (6/\xi^2) \ln(1 + \xi).$$

С учетом (12.11) функция (12.27) принимает вид

$$F'_{\text{пр}}(k) = F_{\text{пр}}(k) - (4L - fL^2) A + 1/2L^2(4 - f) B. \quad (12.29)$$

Поскольку $0 \leq f \leq 1$, $0 \leq L \leq 1/2$ и $B < 1$ (при $\xi \gg 1$), то $F'_{\text{пр}}(k) < F_{\text{пр}}(k)$. Таким образом, учет непараболичности в вероятности рассеяния увеличивает время релаксации, следовательно, и подвижность носителей заряда.

Рассеяние на полярных оптических фононах. Используя (12.20) и (11.50), легко можно вычислить время релаксации на неполярных оптических фононах с учетом блоховских множителей*). Однако мы здесь приведем только результат для рассеяния на полярных оптических фононах, так как этот механизм в InSb является более важным.

Используя (12.20), (11.75) и (11.108) в формуле (9.23), для времени релаксации в случае рассеяния на полярных оптических фононах с учетом экранировки и блоховских множителей получим

$$\tau'_{\text{пол}}(r) = \tau_{\text{пол}}(k) / F'_{\text{пол}}(k), \quad (12.30)$$

где $\tau_{\text{пол}}(k)$ — время релаксации на полярных оптических фононах при высоких температурах и без учета экранировки и блоховских множителей (11.77); функция $F'_{\text{пол}}(k)$ имеет вид

$$F'_{\text{пол}}(k) = F_{\text{пол}}(k) + 2 \left[b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 - (b^2 + c^2)^2 \right] B + \\ + \frac{4}{3} \left[(b^2 + c^2)^2 - b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 \right] C, \quad (12.31)$$

где функция $F_{\text{пол}}(k)$ определяет роль только экранировки потенциала полярных оптических фононов (11.110), A и B даются

*) Рассеяние на неполярных оптических фононах рассмотрено в работе [39], результат которой приведен в [36].

формулой (12.28), а

$$C = 1 - \frac{3}{\xi} + \frac{9}{\xi^2} + \frac{3}{\xi^2(1+\xi)} - \frac{12}{\xi^3} \ln(1+\xi). \quad (12.32)$$

Из (12.11) и (12.31) легко получим

$$F'_{\text{пол}}(k) = F_{\text{пол}}(k) - \frac{1}{2}(4L - fL^2)B + \frac{1}{3}(4-f)L^2C. \quad (12.33)$$

В случае параболической зоны ($\epsilon_g \rightarrow \infty$) $L=0$ и $F'_{\text{пол}}(k) = F_{\text{пол}}(k)$. Если не учитывать экранировку ($\xi \rightarrow \infty$), то $F_{\text{пол}} = 1$, $B=C=1$ и только учет блоховских множителей дает

$$F'_{\text{пол}}(k) = 1 - 1/2(4L - fL^2) + 1/3(4-f)L^2. \quad (12.34)$$

В двухзонном приближении ($\Delta_0 \gg \epsilon_g$) $f=1$ и

$$F'_{\text{пол}}(k) = 1 - 2L + (3/2)L^2. \quad (12.35)$$

Без учета спин-орбитального расщепления ($\Delta_0=0$) $f=0$, т. е. рассеяние с переворачиванием спина не играет роли, а из (12.34) имеем

$$F'_{\text{пол}}(k) = 1 - 2L + (4/3)L^2. \quad (12.36)$$

Поскольку L принимает значения в пределах $0 \leq L \leq 1/2$, что соответствует $\epsilon_g \rightarrow 0$ и $\epsilon_g \rightarrow \infty$, то, как видно из (12.34) и (12.35), $F'_{\text{пол}}(k) < 1$. Например, для InSb с концентрацией $n = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\epsilon_g \approx 0,2$ эВ величина $L \approx 0,4$ и, согласно (3.34) или (12.35), $F'_{\text{пол}} \approx 0,4$. Таким образом, учет блоховских множителей существенно увеличивает время релаксации.

Рассеяние на пьезоакустических фононах. Формулы (12.20), (11.99) и (11.112) совместно с (9.23) дают возможность найти время релаксации, обусловленное рассеянием на пьезоакустических фононах с учетом экранировки и блоховских множителей. В результате имеем

$$\tau'_{pz}(k) = \tau_{pz}(k)/F_{pz}(k), \quad (12.37)$$

где $\tau_{pz}(k)$ — время релаксации без учета экранировки и блоховских множителей (11.101); функция $F'_{pz}(k) = F'_{\text{пол}}(k)$ дается формулой (12.31) или (12.33), т. е. перенормировка времени релаксации в случае рассеяния на пьезоакустических фононах и полярных оптических фононах определяется одной и той же функцией.

Рассеяние на акустических фононах. Как было отмечено в п. 2 предыдущего параграфа, рассеяние на акустических фононах можно рассмотреть двумя методами: методом потенциала деформации и методом деформированных ионов. Однако эти методы эквивалентны, т. е. дают одинаковый результат только для простой параболической зоны и плоской волны.

Согласно теории деформационного потенциала носители заряда взаимодействуют только с продольными акустическими фоно-

нами [см. (11.27)]. С другой стороны, как было показано в [3], в рамках модели деформируемых ионов электроны проводимости с поперечными фононами не взаимодействуют, если амплитуда блоховской волны (1.6) $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ не зависит от волнового вектора \mathbf{k} . Следовательно, в случае непараболической зоны с волновой функцией (12.9), чтобы не терять выклад от рассеяния на поперечных акустических фононах, нужно исходить из метода деформируемых ионов Блоха*). Этот метод основан на том, что при малых смещениях \mathbf{u} периодический потенциал решетки, а следовательно и энергия электрона, изменяется на величину

$$\delta V = -\mathbf{u} \operatorname{grad} V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1}^3 (e_j \nabla V)(b_j \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + b_j^* \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})), \quad (12.38)$$

где мы использовали явный вид смещения (11.25).

Тогда из уравнения (1.13) видно, что энергия возмущения носителей заряда из-за наличия акустических колебаний решетки с учетом спин-орбитального взаимодействия равна

$$\widehat{\mathcal{H}}' = \delta V + (\hbar/4m_0^2c^2)[\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \delta V] \widehat{\rho}. \quad (12.39)$$

Исходя из этого гамильтониана взаимодействия, была построена теория рассеяния на акустических колебаниях решетки с учетом блоховских множителей [31, 32, 35]. Не воспроизводя выкладок, мы здесь приведем только результаты этих работ. В этом случае в теорию входит несколько коэффициентов, которые соответствуют константам потенциала деформации уровней Γ_6 , Γ_8 и Γ_7 (см. рис. 6), а также константа, характеризующая межзонные переходы. Для простоты приведем выражение для времени релаксации, полученное в работе [35], в которой предположено, что межзонные переходы отсутствуют и все константы, относящиеся к уровням Γ_6 , Γ_8 и Γ_7 , одинаковы. Эту константу обозначим через E . При этом предположении время релаксации в случае рассеяния на акустических фононах с учетом блоховских амплитуд (12.10) имеет вид [35]**)

$$\tau'(k) = \frac{\pi \hbar \rho}{E^2 k_0 T} \frac{v_{\parallel}^2}{F_{\text{ак}}(k)} k^{-2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right); \quad (12.40)$$

здесь $\rho = MN/V$ — плотность кристалла, а функция

$$F_{\text{ак}}(k) = F_{\text{ак}}^{\parallel} + (v_{\parallel}/v_{\perp})^2 F_{\text{ак}}^{\perp}, \quad (12.41)$$

где v_{\parallel} и v_{\perp} — скорости распространения продольных и попереч-

*) Отметим, что блоховские множители могут быть учтены и в рамках теории деформационного потенциала, если использовать формулы (12.20), (11.34) и (9.23). Однако при этом теряется роль поперечных акустических фононов в процессе рассеяния носителей заряда.

**) Более общие результаты приведены в работе [36].

ных акустических волн, соответственно,

$$F_{\text{ак}}^{\parallel} = 1 - 2b^2 - 4c^2 + 18c^4 + \frac{16}{3} \left(c^2 - \frac{b^2}{2} \right)^2 - \frac{96}{5} c^2 \left(c^2 - \frac{b^2}{2} \right) + \\ + \left(\frac{bc}{\sqrt{2}} + \frac{b^2}{2} \right)^2 + \frac{8}{5} \left(\frac{bc}{\sqrt{2}} + \frac{b^2}{2} \right) \left(\frac{bc}{\sqrt{2}} - b^2 \right) + \frac{2}{3} \left(\frac{bc}{\sqrt{2}} - b^2 \right)^2 \quad (12.42)$$

относится к продольным, а

$$F_{\text{ак}}^{\perp} = \frac{3}{5} \left(\frac{bc}{\sqrt{2}} + \frac{b^2}{2} \right)^2 + \frac{2}{15} \left(c^2 - \frac{b^2}{2} \right)^2 \quad (12.43)$$

— к поперечным фононам.

Подставляя (12.11) в (12.42) и (12.43), функции $F_{\text{ак}}^{\parallel}$ и $F_{\text{ак}}^{\perp}$ можно выразить через параметры зоны. Однако мы приведем явный вид этих функций только в двухзонном приближении Кейна, когда $\Delta_0 \rightarrow \infty$. Тогда, как видно из (12.12) и (12.11), величины $b^2 = (1/3)L$ и $c^2 = (2/3)L$. Используя их в (12.42) и (12.43), получим

$$F_{\text{ак}}^{\parallel} = 1 - (10/3)L + (191/60)L^2, \quad F_{\text{ак}}^{\perp} = (11/60)L^2. \quad (12.44)$$

Видно, что в случае параболической зоны ($\epsilon_g \rightarrow \infty$) $L = 0$ и $F_{\text{ак}}^{\perp} = 0$, а $F_{\text{ак}}^{\parallel} = 1$, т. е. поперечные фононы в рассеяние вклада не дают. Отметим, что в (12.44) учтены процессы с переворачиванием спина электрона проводимости.

Формулы (12.41) и (12.44) дают возможность оценить влияние учета блоховских множителей в $n\text{-InSb}$, в котором $(v_{\parallel}/v_{\perp})^2 \approx \approx 2,2$. Для этого надо знать концентрации в образце, чтобы определить величину $L = \zeta/(\epsilon_g + 2\zeta)$, где ζ — уровень Ферми.

3. Полупроводники типа HgTe. В этом пункте мы выясним вопрос о том, насколько применимы результаты, полученные выше, к полупроводникам типа HgTe. К таким полупроводникам, кроме HgTe, относятся соединения HgSe и твердые растворы $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ и $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Se}$ в полуметаллической фазе (для первого раствора $x < 0,16$, для второго — $x < 0,06$). Зонная структура этих полупроводников от зонной структуры InSb отличается тем, что она перевернута (см. § 3, п. 4) и отсутствует щель между зоной проводимости и валентной зоной, т. е. зона из состояний Γ_5 находится выше, чем зона Γ_6 , и в центре зоны Бриллюэна соприкасается с зоной тяжелых дырок (см. рис. 6). Зона Γ_5 взаимодействует с зонами Γ_6 и Γ_7 , но не взаимодействует с зоной тяжелых дырок V_1 .

Точный учет взаимодействия этих трех зон $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -методом приводит к следующему кубическому уравнению для энергии, один из корней которого дает закон дисперсии зоны проводимости:

$$\epsilon'(\epsilon' + \epsilon_g)(\epsilon' + \Delta_0) - k^2 P^2(\epsilon' + 2\Delta_0/3) = 0; \quad (12.45)$$

здесь $\epsilon' = \epsilon - (\hbar^2 k^2/2m_0)$, m_0 — масса свободного электрона, энер-

гия отсчитана от дна зоны проводимости Γ_8 (рис. 6), $\varepsilon_g = \varepsilon(\Gamma_8) - \varepsilon(\Gamma_6)$, а $\Delta_0 = \varepsilon(\Gamma_8) - \varepsilon(\Gamma_7)$, константа P дается интегралом (3.11).

Отметим, что (12.45) можно получить из уравнения (3.10), если в последнем совершить следующие замены: $\varepsilon' + \varepsilon_g \rightarrow \varepsilon'$ и $\varepsilon_g \rightarrow -\varepsilon_g$. Первая замена соответствует изменению начала отсчета энергии в HgTe (она отсчитывается от уровня Γ_8 , а не от уровня Γ_6 , как в InSb), а вторая — тому, что здесь ε_g обозначает разность энергий уровней Γ_8 и Γ_6 .

Мы здесь ограничимся двухзонным приближением: $\Delta_0 \gg \varepsilon'$. В этом приближении (12.45) превращается в квадратное уравнение (3.26), где пренебрегается энергией свободного электрона, $\varepsilon_0 \ll \varepsilon$, что соответствует неравенству $m_0 \gg m_n$, где $m_n = 3\hbar^2 \varepsilon_g / 4P^2$ — эффективная масса электрона проводимости на дне зоны.

Из (3.26) для зоны проводимости получим закон дисперсии

$$\varepsilon = -\varepsilon_g/2 + [(\varepsilon_g/2)^2 + \varepsilon_g (\hbar^2 k^2 / 2m_n)]^{1/2}. \quad (12.46)$$

Это выражение совпадает с (3.22), только здесь ε_g не ширина запрещенной зоны, а разность энергий $\varepsilon(\Gamma_8) - \varepsilon(\Gamma_6) = \varepsilon_g$ (рис. 6).

Волновая функция электрона проводимости в полупроводниках типа HgTe имеет такой же вид, как и для InSb, (12.9) с блоховским множителем (12.10), только коэффициенты, входящие в эти функции a, b, c для HgTe в двухзонном приближении имеют вид *)

$$a^2 = L, \quad b^2 = 1/3(1 - L), \quad c^2 = 2/3(1 - L), \quad (12.47)$$

где

$$L = \varepsilon / (\varepsilon_g + 2\varepsilon), \quad \varepsilon_g = \varepsilon(\Gamma_8) - \varepsilon(\Gamma_6).$$

Вычисление времени релаксации с учетом блоховских множителей в полупроводниках типа HgTe можно производить так же, как и для InSb. Если не учесть межзонные переходы, то окончательные выражения для времени релаксации, как следует из сказанного выше о виде блоховских множителей, имеют такой же вид, как и для InSb.

Таким образом, формулы (12.23), (12.27), (12.31) и (12.41) справедливы и для полупроводников типа HgTe, только в них a, b, c нужно заменить их выражениями (12.47). Более того, все функции, которые появляются из-за учета блоховских множителей в формулах времени релаксации и выражены через величину L как для InSb, так и для HgTe, формально имеют одинаковый вид, только для них L различны. В двухзонном приближении ($\Delta_0 \gg \varepsilon_g$, $\beta = \gamma = f = 1$), согласно (12.24), (12.29), (12.33) и (12.41), эти

*) Выражения (12.47) получаются из (12.41) в двухзонном приближении ($\Delta_0 \gg \varepsilon_g$, $\beta = \gamma = 1$), если в них производить соответствующие замены $\varepsilon + \varepsilon_g \rightarrow \varepsilon$ и $\varepsilon_g \rightarrow -\varepsilon_g$, что эквивалентно замене $L \rightarrow 1 - L$.

функции следующие:

$$F_g = 1 - (8/3)L + (13/6)L^2,$$

$$F'_{\text{пр}} = F_{\text{пр}} - 4LA + L^2(A + 3B/2), \quad (12.48)$$

$$F'_{\text{пол}} = F_{\text{пол}} - 2LB + L^2(C + B/2),$$

$$F_{\text{ак}} = \left(1 - \frac{10}{3}L + \frac{191}{60}L^2\right) + \left(\frac{v_{\parallel}}{v_{\perp}}\right)^2 \cdot \frac{11}{60}L^2,$$

где

$$L = (1/2) (1 \mp m_n/m(\epsilon)), \quad (12.49)$$

причем знак минус относится к InSb, а плюс — к полупроводникам типа HgTe, m_n — эффективная масса на дне зоны проводимости, $m(\epsilon)$ — эффективная масса, соответствующая энергии ϵ . В двухзонном приближении, согласно (3.26) и (4.12),

$$m(\epsilon) = m_n(1 + 2\epsilon/\epsilon_g). \quad (12.50)$$

В случае параболической зоны ($\epsilon_g \rightarrow \infty$) $m(\epsilon) = m_n$, поэтому для InSb $L = 0$, а для HgTe $L = 1$, следовательно, согласно (12.48), время релаксации (также и подвижность) в HgTe больше, чем в InSb.

В случае сильной непараболичности ($\epsilon_g \rightarrow 0$, $m_n \rightarrow 0$) $L = 1/2$, что соответствует, например, твердому раствору $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ при $x \approx 0,16$.

В заключение отметим, что в объеме двух параграфов, конечно, все аспекты теории рассеяния мы не могли охватить. Более подробно рассеяние носителей тока в полупроводниках и металлах изложено в монографии [40], посвященной специально этому вопросу.

Глава 4

ЭЛЕКТРОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ИЗОТРОПНОЙ ЗОНОЙ

Результаты, полученные в третьей главе, позволяют построить теорию явлений переноса в полупроводниках со сферически-симметричной зоной. В этой главе мы сначала рассмотрим произвольную изотропную зону и получим общие выражения основных кинетических коэффициентов. Затем эти общие формулы применим к отдельным частным моделям и случаям. Классической теории явлений переноса в полупроводниках посвящено довольно много работ [1—15]. Отметим, что указанный список литературы никак не может претендовать на полноту. Кроме того, мы здесь не будем обсуждать эти работы в отдельности.

В конце данной главы рассмотрены явления переноса в полупроводниках типа p -Ge, а также эффект увлечения в полупроводниках с произвольной изотропной зоной.

§ 13. Общие выражения основных кинетических коэффициентов

1. Плотность тока и общий вид тензоров проводимости. Для получения явного вида компонент тензора проводимости нужно найти связь плотности тока и потока энергии с электрическим полем и градиентом температуры. Указанная связь осуществляется с помощью тензоров проводимости.

Подставляя общее решение кинетического уравнения (9.38) в (8.1) и (8.2), для плотности тока и потока энергии получим

$$\mathbf{j} = \frac{e}{4\pi^3} \int \tau(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \Phi(\epsilon)) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\mathbf{k}, \quad (13.1)$$

$$\mathbf{w} = - \frac{1}{4\pi^3} \int (\epsilon - \zeta) \tau(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \Phi(\epsilon)) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\mathbf{k}. \quad (13.2)$$

Учитывая (1.8), переходя к сферической системе координат в \mathbf{k} -пространстве и интегрируя по углам, получим для компо-

нент тока и потока энергии

$$j_i = \frac{e}{3\pi^2 \hbar^2} \int \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2 \tau(k) \Phi_i(\varepsilon) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) k^2 dk, \quad (13.3)$$

$$w_i = - \frac{1}{3\pi^2 \hbar^2} \int \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2 (\varepsilon - \zeta) \tau(k) \Phi_i(\varepsilon) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) k^2 dk. \quad (13.4)$$

Используем (1.48) и перейдем от интегрирования по модулю волнового вектора к интегрированию по энергиям электрона. Тогда имеем

$$j_i = - \frac{e}{3\pi^2} \int \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \Phi_i(\varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (13.5)$$

$$w_i = \frac{1}{3\pi^2} \int \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \zeta) \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \Phi_i(\varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (13.6)$$

Видно, что компоненты тока и потока энергии определяются соответствующими компонентами силы $\Phi(\varepsilon)$, явный вид которой получен из решения кинетического уравнения и приведен в (9.50). Не нарушая общности, предположим, что магнитное поле направлено по оси z : $H_x = H_y = 0$, $H_z = H$. Тогда, согласно (9.50), компоненты $\Phi(\varepsilon)$ будут иметь вид

$$\Phi_x = \frac{1}{1 + \nu^2} (\Phi_{0x} - \nu \Phi_{0y}), \quad (13.7)$$

$$\Phi_y = \frac{1}{1 + \nu^2} (\Phi_{0y} + \nu \Phi_{0x}), \quad (13.8)$$

$$\Phi_z = \Phi_{0z}, \quad (13.9)$$

где Φ_{0x} , Φ_{0y} и Φ_{0z} даются формулой (9.16).

Из (13.5) и (13.9) следует, что продольная компонента тока j_z от магнитного поля не зависит, т. е. для сферической зоны, как и следовало ожидать, продольное магнетосопротивление отсутствует.

Используя (13.7) и (13.8) в (13.5), для компонент плотности тока в полупроводниках со сферически-симметричной зоной в произвольном неквантующем магнитном поле получим следующие выражения:

$$j_x = \sigma_{11} E_x - \sigma_{12} E_y - \beta_{11} \nabla_x T + \beta_{12} \nabla_y T, \quad (13.10)$$

$$j_y = \sigma_{12} E_x + \sigma_{11} E_y - \beta_{12} \nabla_x T - \beta_{11} \nabla_y T.$$

Из (13.7), (13.8) и (13.6) с учетом теплопроводности решетки κ_ϕ для плотности потока энергии получим

$$w_x = T \beta_{11} E_x - T \beta_{12} E_y - (\kappa_{11} + \kappa_\phi) \nabla_x T + \kappa_{12} \nabla_y T, \quad (13.11)$$

$$w_y = T \beta_{12} E_x + T \beta_{11} E_y - \kappa_{12} \nabla_x T - (\kappa_{11} + \kappa_\phi) \nabla_y T.$$

При записи (13.10) и (13.11) мы учли симметрию компонент тензоров проводимости: $\sigma_{21} = -\sigma_{12}$, $\sigma_{22} = \sigma_{11}$; $\beta_{21} = -\beta_{12}$, $\beta_{22} = \beta_{11}$;

$\kappa_{21} = -\kappa_{12}$, $\kappa_{22} = \kappa_{11}$ и ввели следующие обозначения:

$$\begin{aligned}\sigma_{ik} &= \langle v^{k-i} \rangle, \\ \beta_{ik} &= -(1/eT) \langle (\epsilon - \zeta) v^{k-i} \rangle, \\ \kappa_{ik} &= (1/e^2 T) \langle (\epsilon - \zeta)^2 v^{k-i} \rangle, \quad i \leq k; \quad k = 1, 2,\end{aligned}\tag{13.12}$$

где $v = (\Omega\tau)$, а символ $\langle \dots \rangle$ обозначает интеграл вида

$$\langle A \rangle = \frac{e^2}{3\pi^2} \int \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \frac{\tau(\epsilon)}{m(\epsilon)} \frac{k^3(\epsilon)}{1+v^2} A(\epsilon) d\epsilon.\tag{13.13}$$

2. Общие выражения основных кинетических коэффициентов.

Все интересующие нас кинетические коэффициенты, измеряемые на опыте, можно выразить через σ_{ik} , β_{ik} и κ_{ik} . Непосредственное вычисление этих коэффициентов (особенно при адиабатическом условии) очень громоздко. Однако, зная шесть основных кинетических коэффициентов (сопротивление в магнитном поле $\rho(H)$, коэффициенты Холла R и Нернста — Эттингсгаузена Q , термо-э. д. с. в магнитном поле $\alpha(H)$, теплопроводность в магнитном поле $\kappa(H)$ и коэффициент Риги — Ледюка S), можно найти все остальные изотермические и адиабатические коэффициенты (см. § 7).

Исходя из определения основных кинетических коэффициентов, приведенных в § 7, и соотношений (13.10) и (13.11), легко показать, что шесть коэффициентов определяются через компоненты σ_{ik} , β_{ik} и κ_{ik} следующим образом:

сопротивление в поперечном магнитном поле

$$\rho(H) = \sigma_{11} (\sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2)^{-1},\tag{13.14}$$

коэффициент Холла

$$R = -H^{-1} \sigma_{12} (\sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2)^{-1},\tag{13.15}$$

поперечный эффект Нернста — Эттингсгаузена

$$Q = H^{-1} (\sigma_{12} \beta_{11} - \sigma_{11} \beta_{12}) (\sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2)^{-1},\tag{13.16}$$

термо-э. д. с. в поперечном магнитном поле

$$\alpha(H) = (\sigma_{11} \beta_{11} + \sigma_{12} \beta_{12}) (\sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2)^{-1},\tag{13.17}$$

теплопроводность в поперечном магнитном поле

$$\kappa(H) = \kappa_0 + \kappa_{11} - T \beta_{11} \alpha(H) - T H \beta_{12} Q,\tag{13.18}$$

коэффициент Риги — Ледюка

$$S = \frac{1}{H} \frac{1}{\kappa(H)} [T H \beta_{11} Q - T \beta_{12} \alpha(H) + \kappa_{12}].\tag{13.19}$$

Связь других коэффициентов с этими приведена в § 7. Например, коэффициент Нернста B и коэффициент Эттингсгаузена P , согласно (7.32) и (7.33), определяются через $\alpha(H)$, Q и

$\kappa(H)$ — следующим образом:

$$B = T\alpha(H)/\kappa(H), \quad P = TQ/\kappa(H). \quad (13.20)$$

Обозначение (13.13) мы использовали ради компактной записи (13.12). Однако для дальнейшего удобно ввести другой вид усреднения, а именно

$$\langle A \rangle = \frac{1}{3\pi^2 n} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) k^3(\varepsilon) A(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (13.21)$$

где n — концентрация электронов проводимости. Эта формула усреднения удобна тем, что, согласно (4.10) и (13.21), среднее значение постоянной величины равно самой себе.

Тогда, учитывая, что

$$\langle A \rangle = ne^2 \langle (\tau/m) A / (1 + v^2) \rangle, \quad (13.22)$$

компоненты тензоров из (13.12) можем представить в виде

$$\sigma_{11} = ne^2 \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1 + v^2} \right\rangle, \quad \sigma_{12} = ne^2 \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1 + v^2} \right\rangle, \quad (13.23)$$

$$\beta_{11} = -\frac{ne}{T} \left\langle \frac{\tau(\varepsilon - \zeta)}{m(1 + v^2)} \right\rangle, \quad \beta_{12} = -\frac{ne}{T} \left\langle \frac{\tau(\varepsilon - \zeta)v}{m(1 + v^2)} \right\rangle, \quad (13.24)$$

$$\kappa_{11} = \frac{n}{T} \left\langle \frac{\tau(\varepsilon - \zeta)^2}{m(1 + v^2)} \right\rangle, \quad \kappa_{12} = \frac{n}{T} \left\langle \frac{\tau(\varepsilon - \zeta)^2 v}{m(1 + v^2)} \right\rangle. \quad (13.25)$$

Подставляя эти выражения в (13.14) — (13.17), для первых четырех кинетических коэффициентов получим*)

$$\rho(H) = \frac{1}{ne^2} \frac{1}{D} \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1 + v^2} \right\rangle, \quad (13.26)$$

$$R = -\frac{1}{ne^2 H} \frac{1}{D} \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1 + v^2} \right\rangle, \quad (13.27)$$

$$Q = \frac{k_0}{e} \frac{1}{HD} \left(\left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1 + v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{xv}{1 + v^2} \right\rangle - \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{x}{1 + v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1 + v^2} \right\rangle \right), \quad (13.28)$$

$$\alpha(H) = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{1}{D} \left(\left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1 + v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{x}{1 + v^2} \right\rangle + \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1 + v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{xv}{1 + v^2} \right\rangle \right) - \eta \right], \quad (13.29)$$

где $\eta = \zeta/k_0 T$ — приведенный химический потенциал, $x = \varepsilon/k_0 T$ — приведенная энергия, а

$$D = \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1 + v^2} \right\rangle^2 + \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1 + v^2} \right\rangle^2. \quad (13.30)$$

*) Интересно отметить, что во все кинетические коэффициенты входит только отношение τ/m , так как $v = (eH/c) (\tau/m)$.

Выражения для остальных коэффициентов легко получить из (13.18) — (13.20), если использовать (13.25), (13.28) и (13.29).

Формулы (13.26) — (13.29) являются общими для полупроводников с произвольной изотропной зоной в области примесной проводимости.

3. Полупроводники со смешанной проводимостью. Если в проводимости, кроме электронов проводимости, участвуют и дырки в валентной зоне, то в (13.26) — (13.29) нужно учитывать и вклад дырок. Так как условие равновесия между электронами проводимости и дырками учтено при вычислении химического потенциала системы (см. §§ 5 и 6), то мы можем рассматривать электроны и дырки как две независимые системы и написать для каждой из них выражение для плотности тока и потока энергии. Алгебраическая сумма этих потоков даст полный ток \mathbf{j} и поток энергии \mathbf{w} :

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}^{(n)} + \mathbf{j}^{(p)}, \quad (13.31)$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}^{(n)} + \mathbf{w}^{(p)}.$$

В этом случае компоненты тензоров проводимости в обобщенном законе электро- и теплопроводности (13.10) и (13.11) будут состоять из двух частей — электронной и дырочной, а именно

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ik}^{(n)} + \sigma_{ik}^{(p)}, \quad \beta_{ik} = \beta_{ik}^{(n)} + \beta_{ik}^{(p)}, \quad \kappa_{ik} = \kappa_{ik}^{(n)} + \kappa_{ik}^{(p)}. \quad (13.32)$$

Общие выражения для электронных частей компонент тензоров σ_{ik} , β_{ik} и κ_{ik} приведены в (13.12) или в (13.23) — (13.25)*. Выражения для дырок следуют из (13.12), если в них сделать замену соответствующих электронных величин на дырочные: $(-e) \rightarrow (+e)$, $\xi \rightarrow \xi_p$, $f_0 \rightarrow f_{0p}$ и т. д. В результате для дырочной части компонент тензоров проводимости, аналогично (13.12), можно записать

$$\sigma_{ik}^{(p)} = \langle (-v_p)^{k-i} \rangle, \quad (13.33)$$

$$\beta_{ik}^{(p)} = (1/eT) \langle (\varepsilon - \xi_p) (-v_p)^{k-i} \rangle,$$

$$\kappa_{ik} = \frac{1}{e^2 T} \langle (\varepsilon - \xi_p)^2 (-v_p)^{k-i} \rangle, \quad i \leq k; \quad k = 1, 2,$$

где

$$\langle A_p \rangle = \frac{e^2}{3\pi^2} \int \left(-\frac{\partial f_{0p}}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\tau_p(\varepsilon)}{m_p(\varepsilon)} \frac{k_p^3(\varepsilon)}{1 + v_p^2} A_p(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (13.34)$$

$f_{0p}(\varepsilon) = [1 + \exp(\varepsilon - \xi_p/k_0T)]^{-1}$ — функция распределения для дырок [см. (5.5)], $\xi_p = -\xi - \varepsilon_g$, ε_g — ширина запрещенной зоны, $\tau_p(\varepsilon)$, $m_p(\varepsilon)$ и $k_p(\varepsilon)$ — время релаксации, эффективная масса и величина волнового вектора дырок соответственно, e — величина заряда электрона.

* В формулах (13.12) и (13.23) — (13.25) индекс «n» не указан, но они относятся к электронам проводимости.

Если учесть, что

$$\langle A_p \rangle = pe^2 \langle (\tau_p/m_p) A_p / (1 + v_p^2) \rangle,$$

где

$$\langle A_p \rangle = \frac{1}{3\pi^2 p} \int \left(- \frac{\partial f_{0p}}{\partial \epsilon} \right) k_p^3(\epsilon) A_p(\epsilon) d\epsilon, \quad (13.35)$$

p — концентрация дырок, то (13.33) можно представить, аналогично (13.23) — (13.25), в виде

$$\sigma_{11}^{(p)} = pe^2 \left\langle \frac{\tau_p}{m_p} \frac{1}{1 + v_p^2} \right\rangle, \quad \sigma_{12}^{(p)} = -pe^2 \left\langle \frac{\tau_p}{m_p} \frac{v_p}{1 + v_p^2} \right\rangle, \quad (13.36)$$

$$\beta_{11}^{(p)} = \frac{ep}{T} \left\langle \frac{\tau_p}{m_p} \frac{(\epsilon - \xi_p)}{1 + v_p^2} \right\rangle, \quad \beta_{12}^{(p)} = -\frac{ep}{T} \left\langle \frac{\tau_p}{m_p} \frac{(\epsilon - \xi_p) v_p}{1 + v_p^2} \right\rangle, \quad (13.37)$$

$$\chi_{11}^{(p)} = \frac{p}{T} \left\langle \frac{\tau_p}{m_p} \frac{(\epsilon - \xi_p)^2}{1 + v_p^2} \right\rangle, \quad \chi_{12}^{(p)} = -\frac{p}{T} \left\langle \frac{\tau_p}{m_p} \frac{(\epsilon - \xi_p)^2 v_p}{1 + v_p^2} \right\rangle. \quad (13.38)$$

Таким образом, используя (13.32), (13.23) — (13.25) и (13.36) — (13.38), в формулах (13.14) — (13.20) мы можем в принципе вычислить все основные кинетические коэффициенты в полупроводниках со смешанной проводимостью.

§ 14. Явления переноса в отсутствие магнитного поля

В случае, когда отсутствует внешнее магнитное поле, однородная проводящая среда в основном характеризуется тремя кинетическими коэффициентами: электропроводностью, термо-э. д. с. и электронной теплопроводностью. Рассмотрим каждый из них в отдельности.

1. Электропроводность; дрейфовая подвижность носителей заряда. Если в x -направлении к однородному проводнику приложим внешнее электрическое поле $\mathbf{E}(E, 0, 0)$, то в этом направлении возникнет электрический ток с плотностью $\mathbf{j}(j, 0, 0)$. Тогда из (13.10) и (13.23) имеем

$$\mathbf{j} = \sigma_{11}(0) \mathbf{E} = ne^2 \langle \tau/m \rangle \mathbf{E} = \sigma_0 \mathbf{E}, \quad (14.1)$$

т. е. электропроводность при отсутствии магнитного поля

$$\sigma_0 = en\mu, \quad (14.2)$$

где

$$\mu = e \langle \tau(\epsilon) / m(\epsilon) \rangle \quad (14.3)$$

— дрейфовая подвижность или просто подвижность носителей заряда. Сравнивая определение плотности тока через среднюю дрейфовую скорость $\mathbf{j} = en\mathbf{v}_d$ с (14.1), получим, что $\mu = \mathbf{v}_d/\mathbf{E}$, т. е. подвижность носителей заряда численно равна дрейфовой скорости при единичной напряженности электрического поля, а дрейфовая скорость электрона проводимости есть среднее

значение отношения импульса, приобретенного в электрическом поле, $eE\tau$, к эффективной массе m : $v_d = \langle eE\tau/m \rangle$.

Для нахождения явного вида подвижности (14.3) нужно исходить из определенных предположений. Если электронный газ в полупроводнике сильно вырожден, то, согласно (13.21) и (4.25), при любом изотропном законе дисперсии подвижность можно выразить через $\tau(\xi)$ и $m(\xi)$ на поверхности Ферми, т. е.

$$u = e\tau(\xi)/m(\xi_F), \quad (14.4)$$

где ξ_F — граничная энергия Ферми.

При любой степени вырождения необходимо использовать явный вид закона дисперсии, чтобы знать функции $m(\epsilon)$ и $\tau(\epsilon)$. Будем исходить из общего закона дисперсии Кейна (3.25) в трехзонном приближении. Тогда из (3.25) и (9.46) для эффективной массы получим выражение

$$m(\epsilon) = \frac{1}{3s^2} \frac{(2\epsilon + \epsilon_g)(\epsilon + \epsilon_g + \Delta_0)(\epsilon + \epsilon_g + \frac{2}{3}\Delta_0) - (\Delta_0/3)\epsilon(\epsilon + \epsilon_g)}{(\epsilon + \epsilon_g + \frac{2}{3}\Delta_0)^2}. \quad (14.5)$$

Отсюда легко получить связь эффективной массы на дне зоны проводимости $m_n = m(\epsilon \rightarrow 0)$ с параметром s (3.17) в трехзонном приближении:

$$m_n = \frac{1}{3s^2} \frac{\epsilon_g(\epsilon_g + \Delta_0)}{(\epsilon_g + \frac{2}{3}\Delta_0)}. \quad (14.6)$$

Это выражение также следует из (3.18), если в последнем считать, что $m_0 \gg m_n$. При $\Delta_0 \rightarrow \infty$ (14.6) сводится к (3.21).

Подставляя (3.25) в (4.10), с учетом (14.6) для концентрации электронов проводимости получим формулу

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{1 + \frac{2}{3}\delta}{1 + \delta} \right)^{3/2} \mathcal{J}_{3/2,0}^0(\eta, \beta, \delta); \quad (14.7)$$

здесь

$$\mathcal{J}_{n,h}^m(\eta, \beta, \delta) = \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \frac{x^m [(x + \beta x^2)(1 + \beta x + \delta)]^n (1 + \beta x + \frac{2}{3}\delta)^{2h-n} dx}{[(1 + 2\beta x)(1 + \beta x + \delta)(1 + \beta x + \frac{2}{3}\delta) - \frac{1}{3}\beta\delta(x + \beta x^2)]^h} \quad (14.8)$$

— трехпараметрические интегралы Ферми, где $f_0 = [1 + \exp(x - \eta)]^{-1}$, и введены обозначения

$$x = \epsilon/k_0 T, \quad \eta = \xi_F/k_0 T, \quad \beta = k_0 T/\epsilon_g, \quad \delta = \Delta_0/\epsilon_g. \quad (14.9)$$

Отметим, что все кинетические коэффициенты в трехзонном приближении выражаются через трехпараметрические интегралы вида (14.8) с различными индексами. Эти интегралы при $\delta \rightarrow \infty$ переходят к табулированным двухпараметрическим интегралам (4.29).

Действительно, при $\delta \rightarrow \infty$ (14.8) принимает вид

$$\mathcal{J}_{n,k}^m(\eta, \beta, \infty) = (2/3)^{k-n} I_{n,k}^m(\eta, \beta), \quad (14.10)$$

где $I_{n,k}^m(\eta, \beta)$ — двухпараметрические интегралы Ферми (4.29), асимптотики которых приведены в § 4.

В силу (4.25) при больших значениях параметра $\eta > 10$ можно найти асимптотические выражения трехпараметрических интегралов (14.8), которые приведены в § 24 книги [16].

Для получения окончательного выражения подвижности надо еще найти явный вид $\tau(\varepsilon)$. Здесь мы не учитываем влияние блоховских множителей и исходим из выражения (12.4) для τ . Тогда, если в (12.4) учесть закон дисперсии (14.5), то в трехзонном приближении для $\tau(\varepsilon)$ в обозначениях (14.9) получим следующую формулу:

$$\tau(\varepsilon) = \tau_{0r}(T) \left(\frac{1 + 2/3\delta}{1 + \delta} \right)^{r-3/2} \times \\ \times \frac{[(x + \beta x^2)(1 + \beta x + \delta)]^{r-1/2} (1 + \beta x + 2/3\delta)^{5/2-r}}{\left[(1 + 2\beta x)(1 + \beta x + \delta)(1 + \beta x + 2/3\delta) - \frac{1}{3} \delta \beta (x + \beta x^2) \right]}, \quad (14.11)$$

где параметры $\tau_{0r}(T)$ для разных механизмов рассеяния даны в табл. 5, причем в случае рассеяния на ионах примеси радиус экранирования в трехзонном приближении, согласно (10.27) и (3.25), дается следующим выражением:

$$r_0^2 = \frac{\kappa k_0 T}{6\pi e^2 n} \frac{\mathcal{J}_{3/2,0}^0(\eta, \beta, \delta)}{\mathcal{J}_{1/2,-1}^0(\eta, \beta, \delta)}. \quad (14.12)$$

Используя (14.5) и (14.11) в (14.3), согласно (13.21), в трехзонном приближении для подвижности получим

$$u = \frac{e\tau_{0r}(T)}{m_n} \left(\frac{1 + 2/3\delta}{1 + \delta} \right)^{r-5/2} \frac{\mathcal{J}_{r+1,2}^0(\eta, \beta, \delta)}{\mathcal{J}_{3/2,0}^0(\eta, \beta, \delta)}. \quad (14.13)$$

Это самое общее выражение для подвижности, из которого получаются все частные результаты. Из (14.13) следует, что температурная и концентрационная зависимости подвижности в общем виде носят очень сложный характер. В частности, $u(T)$ для разных механизмов определяется не только $\tau_{0r}(T)$, но также параметрами η и β .

Подвижность необходимо исследовать по формуле (14.13) тогда, когда в полупроводнике величина спин-орбитального расщепления Δ_0 и ширина запрещенной зоны ε_g сравнимы. Примером таких полупроводников может служить InAs (см. табл. 2). Однако во многих полупроводниковых соединениях Δ_0 больше, чем ε_g , и для них (например, для InSb; см. табл. 2) достаточно рассмотреть явления переноса в двухзонном приближении Кейна, т. е. исходить из закона дисперсии, полученного с учетом

взаимодействия только двух зон: зоны проводимости и зоны легких дырок.

В двухзонном приближении Кейна ($\Delta_0 \gg \epsilon_g$) закон дисперсии электрона проводимости имеет простой вид (3.26), а эффективная масса

$$m(\epsilon) = m_n(1 + 2\epsilon/\epsilon_g), \quad (14.14)$$

и время релаксации

$$\tau(\epsilon) = \tau_{0r}(T)(1 + 2\beta x)^{-1}(x + \beta x^2)^{r-1/2}, \quad (14.15)$$

что следует из (14.5) и (14.11) при $\delta \rightarrow \infty$ соответственно. В этом случае радиус экранировки r_0 , согласно (14.12) и (14.10), есть

$$r_0^2 = \frac{\kappa k_0 T}{6\pi e^2 n} \frac{I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)}{I_{1/2,-1}^0(\eta, \beta)}. \quad (14.16)$$

Концентрация электронов проводимости n в двухзонном приближении определяется формулой (4.43), а подвижность

$$u = \frac{e\tau_{0r}(T)}{m_n} \frac{I_{r+1,2}^0(\eta, \beta)}{I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)}, \quad (14.17)$$

которая получается из (14.13) при $\delta \rightarrow \infty$.

В некоторых полупроводниках параметр непараболичности β достаточно мал и зона проводимости почти параболична. Например, для GaAs при комнатной температуре $\beta = k_0 T/\epsilon_g \approx 0,01$. Для полупроводников с параболической зоной ($\beta \ll 1$) концентрация дается (4.44), а подвижность, в силу (4.31) и (14.17), имеет вид

$$u = \frac{e\tau_{0r}(T)}{m_n} \frac{F_{r+1}(\eta)}{F_{3/2}(\eta)}. \quad (14.18)$$

В случае невырожденных полупроводников с параболической зоной из (14.8), в силу (4.38), получим

$$u = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \Gamma(r+2) \frac{e\tau_{0r}(T)}{m_n}. \quad (14.19)$$

Видно, что в этом простейшем случае (параболическая зона, невырожденный электронный газ и действие только одного механизма рассеяния) зависимость подвижности от эффективной массы и температуры определяется величиной $\tau_{0r}(T, m_n)$. Из табл. 5 следует, что $\tau_{0r}(T) \sim m_n^{r-3/2}$, а температурная зависимость $\tau_{0r} \sim T^{r-3/2}$ для рассеяния на фононах ($r=0$ при акустических и неполярных оптических, $r=1$ при полярных оптических и пьезоакустических фононах) и $\tau_{0r} \sim T^{r-1/2}$ для рассеяния на точечных дефектах ($r=0$) и ионах примеси ($r=2$).

Следовательно, в невырожденных полупроводниках при низких температурах, когда рассеяние в основном происходит на

фонах примеси,

$$u \sim m_n^{-1/2} T^{3/2}, \quad (14.20)$$

а при высоких температурах, когда рассеяние происходит на акустических фонах,

$$u \sim m_n^{-5/2} T^{-3/2} \quad (14.21)$$

и оптических фонах

$$u \sim m_n^{-3/2} T^{-1/2}. \quad (14.22)$$

Обычно указанные температурные зависимости подвижности на эксперименте не наблюдаются, так как они получены для идеализированной модели. Причины расхождения могут быть разными: зависимость эффективной массы m_n и деформационного потенциала от температуры, отклонение зоны от параболичности, частичное вырождение электронов проводимости, одновременное действие двух или нескольких механизмов рассеяния и т. д.

Отметим, что учет непараболичности зоны также существенно влияет на температурную зависимость подвижности. Это можно продемонстрировать, если (14.17) применять в предельном случае сильно непараболической зоны. В этом случае, согласно (4.32), из (14.17) следует

$$u = \frac{e\tau_{0r}(T)}{m_n} \left(\frac{\epsilon_g}{k_0 T} \right)^{5/2-r} \frac{F_{2r}(\eta)}{4F_3(\eta)}. \quad (14.23)$$

Поскольку для всех механизмов $\tau_{0r} \sim m_n^{r-3/2}$, то (14.23) зависит от отношения $\epsilon_g/2m_n = s^2$, что считается постоянной величиной. В невырожденном случае $F_{2r}/F_3 = 1/6 \Gamma(2r+1)$, и поэтому при рассеянии на акустических фонах $u_{ак} \sim T^{-1}$, так как $\tau_{00} \sim T^{-3/2}$. Таким образом, учет непараболичности усиливает температурные зависимости подвижности.

Для сильно вырожденных полупроводников с параболической зоной из (14.18), в силу (4.37), получим

$$u = \frac{e\tau_{0r}(T)}{m_n} \left(\frac{\zeta_F}{k_0 T} \right)^{r-1/2}, \quad (14.24)$$

где ζ_F — граничная энергия Ферми (4.13). Из (14.24) следует, что зависимость подвижности от эффективной массы одинакова для всех механизмов рассеяния $u \sim m_n^{-2}$, а температурная зависимость различна для разных механизмов: при рассеянии на примесях u от T не зависит, при рассеянии на акустических фонах $u_{ак} \sim T^{-1}$.

Если в проводимости одновременно участвуют два типа носителей заряда, скажем для определенности, электроны проводимости и дырки, то, согласно (13.32), полная проводимость полупроводника со смешанной проводимостью равна

$$\sigma_0 = \sigma_{11}(0) = \sigma_{11}^{(n)}(0) + \sigma_{11}^{(p)}(0), \quad (14.25)$$

или

$$\sigma_0 = e\mu_n + e\mu_p = \sigma_n + \sigma_p, \quad (14.26)$$

где n , p — концентрации электронов и дырок, u — подвижность электронов проводимости (14.3), а

$$u_p = e \langle \tau_p(\varepsilon) / m_p(\varepsilon) \rangle \quad (14.27)$$

— дрейфовая подвижность дырок, усредненная по (13.35).

2. Термо-э. д. с. Известно, что распределение свободных носителей заряда в проводнике зависит от температуры. Поэтому, если вдоль проводника существует градиент температуры, то распределения носителей тока по скоростям на горячем и холодном концах будут разными. Поскольку система стремится к однородному распределению, то в проводнике возникнет диффузионный ток, пропорциональный градиенту температуры, поддерживаемому постоянно. Когда цепь разомкнута, благодаря диффузии на горячем и холодном концах накапливаются разноименные заряды, что приводит к возникновению электрического поля внутри проводника. Возникающее при этом поле вызывает омический ток, направленный против диффузионного. В стационарном состоянии эти два тока в каждой точке проводника компенсируют друг друга. При заданном градиенте температуры такое стационарное состояние поддерживается определенным внутренним электрическим полем. Это поле называется *термо-э. д. с.*, а возникновение такого поля — *эффектом Зеебека*.

Отметим, что диффузионный процесс имеет место и тогда, когда в проводнике распределение неоднородно, т. е. химический потенциал газа носителей заряда зависит от координат: $\xi = \xi(x)$. Причины такой неоднородности могут быть разными: неоднородное распределение температуры $\xi = \xi(T(x))$, контакт двух неодинаковых проводников. В термо-э. д. с. дают вклад также эти неоднородности.

В общем случае неоднородных проводников непрерывной величиной является электрохимический потенциал $(\varphi_0 - (\xi/e))$. Поэтому при теоретическом расчете мы можем учитывать обе причины возникновения термо-э. д. с. (диффузия в объеме и неоднородности), если определим дифференциальную термо-э. д. с. α как коэффициент пропорциональности между отрицательным градиентом электрохимического потенциала и градиентом температуры при $\mathbf{j} = 0$, т. е.

$$\mathbf{E} = -\nabla(\varphi_0 - \xi/e) = \alpha \nabla T. \quad (14.28)$$

Общее выражение для термо-э. д. с. α в полупроводниках с электронной проводимостью дано в (13.29). При отсутствии магнитного поля ($\mathbf{v} = 0$) оно принимает простой вид

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \left(\frac{\langle x\tau/m \rangle}{\langle \tau/m \rangle} - \eta \right). \quad (14.29)$$

Видно, что при полном вырождении электронного газа термо-э. д. с. равна нулю. Знак $\alpha(0)$ однозначно связан со знаком заряда носителей тока, и поэтому по знаку термо-э. д. с. определяют тип проводимости.

Используя (14.14) и (14.15) в (13.21), в двухзонном приближении из (14.29) для $\alpha(0)$ получим выражение *

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{I_{r+1,2}^1(\eta, \beta)}{I_{r+1,2}^0(\eta, \beta)} - \eta \right], \quad (14.30)$$

где $I_{n,k}^m(\eta, \beta)$ — двухпараметрические интегралы (4.29).

Согласно (4.31) для параболической зоны (14.30) переходит в известную формулу

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{F_{r+2}(\eta)}{F_{r+1}(\eta)} - \eta \right]. \quad (14.31)$$

Используя таблицы интегралов Ферми, можно показать, что при изменении η от -5 до $+10$ $\alpha(0)$ по величине уменьшается; вне указанного интервала зависимость $\alpha(0)$ от η определяется формулами (14.36) и (14.45).

Применяя асимптотику (4.30), из (14.30) для вырожденных полупроводников с непараболической зоной (3.26) имеем

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} (k_0 T) \left[(r+1) \frac{\varepsilon_g + 2\zeta}{\zeta(\varepsilon_g + \zeta)} - \frac{4}{(\varepsilon_g + 2\zeta)} \right], \quad (14.32)$$

где ζ дается (4.16).

Используя выражение ζ из (4.16), перепишем (14.32) в виде

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{2k_0 T m(\zeta)}{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}} \left[r+1 - \frac{2\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3} m_n}{m^2(\zeta) \varepsilon_g} \right]; \quad (14.33)$$

здесь $m(\zeta)$ — эффективная масса на поверхности Ферми (4.64).

Легко показать, что второй член в квадратной скобке (14.33), в силу (4.64), есть $(3n/m)(dm/dn)$. Тогда

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \frac{2}{3} \left(\frac{\pi}{\hbar} \right)^2 \frac{k_0 T m(\zeta)}{(3\pi^2 n)^{2/3}} (r+1 - \gamma(n)), \quad (14.34)$$

где

$$\gamma(n) = 3 \frac{n}{m(n)} \frac{dm(n)}{dn} \quad (14.35)$$

есть параметр, зависящий от концентрации n и характеризующий степень непараболичности зоны, который был введен Колодзайчаком и Сосновским [17]. Для параболической зоны $m(\zeta) = m_n = \text{const}$ и параметр $\gamma(n) = 0$, а для сильно непараболической зоны, согласно (4.65), $\gamma(n) = 1$.

*) Для получения выражения $\alpha(0)$ в трехзонном приближении в (14.30) интегралы $I_{n,k}^m$ следует заменить интегралами $\mathcal{J}_{n,k}^m$ (14.8) с такими же индексами, а η определить из (14.7) при заданной концентрации электронов n .

Для сравнения термо-э. д. с. параболической зоны ($\varepsilon_g \rightarrow \infty$) с эффективной массой m_n и термо-э. д. с. сильно непараболической зоны ($\varepsilon_g \rightarrow 0$) выражение (4.32) перепишем в двух предельных случаях:

$$\alpha|_{\varepsilon_g \rightarrow \infty} = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} (r+1) \frac{k_0 T}{\zeta_F(\infty)} = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} (r+1) \left(\frac{k_0 T}{2m_n s^2} \right) \left(\frac{n_0}{n} \right)^{2/3}, \quad (14.36)$$

$$\alpha|_{\varepsilon_g \rightarrow 0} = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} 2r \frac{k_0 T}{\zeta_F(0)} = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} 2r \left(\frac{k_0 T}{2m_n s^2} \right) \left(\frac{n_0}{n} \right)^{1/3},$$

где мы использовали (4.20).

Из (14.36) видно, что в сильно непараболической зоне ($\varepsilon_g \rightarrow 0$) при $r=0$ (рассеяние на акустических фононах, на точечных дефектах и на неполярных оптических фононах) термо-э. д. с. в первом приближении по вырождению равна нулю. Из (14.36) получим

$$\frac{\alpha|_{\varepsilon_g \rightarrow 0}}{\alpha|_{\varepsilon_g \rightarrow \infty}} = \frac{2r}{r+1} \left(\frac{n_0}{n_d} \right)^{1/3}. \quad (14.36a)$$

Отсюда следует, что при $n < n_0(2r/(r+1))^3$ термо-э. д. с. в сильно непараболической зоне больше, чем в параболической зоне с эффективной массой m_n : $\alpha|_{\varepsilon_g \rightarrow 0} > \alpha|_{\varepsilon_g \rightarrow \infty}$, а при $n > n_0(2r/(r+1))^3$, наоборот, $\alpha|_{\varepsilon_g \rightarrow 0} < \alpha|_{\varepsilon_g \rightarrow \infty}$.

Измеряя термо-э. д. с. вырожденных образцов с различными и известными концентрациями n и зная параметр механизма рассеяния r , эффективную массу на дне зоны m_n и ширину запрещенной зоны ε_g , из (14.33) можно найти эффективную массу на поверхности Ферми $m(\xi)$, следовательно, можно определить зависимость эффективной массы от концентрации, сравнить полученную зависимость с теоретической (4.63) или (4.64) и тем самым выяснить применимость модели Кейна для данного полупроводника.

Интересно отметить, что в случае сильного вырождения термо-э. д. с. можно вычислить для произвольной изотропной зоны и при любой зависимости $\tau(\varepsilon)$, т. е. даже когда действует одновременно несколько механизмов рассеяния. Для этого (14.29) перепишем в виде

$$\alpha(0) = -(1/eT) \langle (\varepsilon - \xi) \tau/m \rangle / \langle \tau/m \rangle. \quad (14.37)$$

Применяя формулу (4.25), в первом исчезающем приближении по вырождению из (14.37) получим

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} k_0 T \left(\frac{1}{k(\xi)} \frac{dk}{d\xi} + \frac{1}{u} \frac{du}{d\xi} \right), \quad (14.38)$$

где $u(\xi) = e\tau(\xi)/m(\xi)$ — подвижность носителей на поверхности

Ферми. Преобразуем производную u по ζ :

$$\frac{du}{d\zeta} = \frac{du}{dn} \frac{dn}{d\zeta} = \frac{du}{dn} \frac{dn}{dk} \frac{dk}{d\zeta} = \frac{du}{dn} \frac{m(\zeta)}{\hbar^2 k} \frac{dn}{dk}, \quad (14.39)$$

где мы учли, что $m(\zeta) = \hbar^2 k (dk/d\zeta)$. Из соотношения $k(\zeta) = (3\pi^2 n)^{1/3}$ имеем

$$\frac{dn}{dk} = \frac{(3\pi^2 n)^{2/3}}{\pi^2}. \quad (14.40)$$

Тогда (14.39) принимает вид

$$\frac{du}{d\zeta} = \frac{3n}{2\zeta^*} \frac{du}{dn}, \quad (14.41)$$

где ζ^* — параметр размерности энергии обозначает *)

$$\zeta^* = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m(\zeta)}. \quad (14.42)$$

В результате из (14.38) для термо-э. д. с. получим выражение

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_0 T}{\zeta^*} \right) (1 + \gamma(n, r)), \quad (14.43)$$

которое справедливо при любой зависимости $\tau(\epsilon)$ и при произвольном изотропном законе дисперсии $k = k(\epsilon)$. Безразмерный параметр

$$\gamma(n, r) = \frac{n}{u(n)} \frac{du(n)}{dn}, \quad (14.44)$$

входящий в (14.43), зависит как от механизма рассеяния, так и от концентрации носителей.

В том случае, когда доминирует только один механизм рассеяния, (14.43) переходит в (14.34). Действительно, в этом случае из (12.4) и (14.4) следует, что $u(n) \sim m^{-2}(\zeta) k^{(2r-1)}(\zeta) \sim m^{-2}(n) n^{(2r-1)/3}$. Поэтому

$$\gamma(n, r) = (2/3) (r - 1/2 - \gamma(n)). \quad (14.44a)$$

В невырожденных полупроводниках непараболичность зоны не играет роли, и можно ограничиться формулами для параболической зоны (14.31). В этом случае, в силу (4.38), из (14.31) имеем

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} (r + 2 - \eta), \quad -\eta \gg 1, \quad (14.45)$$

а с учетом (4.46) получим известную формулу Писаренко [4]

) Следует подчеркнуть, что для произвольной изотропной зоны ζ^ не совпадает с граничной энергией Ферми. ζ^* с границей Ферми ζ_F совпадает только для параболической зоны.

для термо-э. д. с.

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \left[r + 2 - \ln \frac{4\pi^{3/2} \hbar^3 n}{(2m_n k_0 T)^{3/2}} \right]. \quad (14.46)$$

В отличие от вырожденного случая, в невырожденных полупроводниках $\alpha(0)$ логарифмически слабо зависит от концентрации и температуры. Если r и m_n в данной области температур постоянны, то

$$\alpha(0) = -(3k_0/2e) \ln T + \text{const.} \quad (14.47)$$

Однако, как показывает сравнение (14.36) и (14.46), по величине термо-э. д. с. в невырожденных полупроводниках на порядок больше, чем в вырожденных полупроводниках или металлах, так как $k_0 T / \zeta_F \ll 1$.

Все формулы в этом пункте приведены для полупроводников с электронной проводимостью. Если в них заменить $-e \rightarrow +e$, $m_n \rightarrow m_p$ и $\zeta \rightarrow -(\zeta + \varepsilon_g)$, то получим результаты для полупроводников с дырочной проводимостью.

Измерение термо-э. д. с. примесных полупроводников позволяет исследовать температурную и концентрационную зависимость эффективной массы носителей. Зная параметр рассеяния r и измеряя $\alpha(0)$, из (14.30) или (14.31) в зависимости от того, непараболична зона или параболична, можно найти приведенный уровень химического потенциала η . Затем из (4.43) или (4.44) при известной концентрации n можно определить $m_n(T)$. В случае многодолинной модели этот простой и широко используемый метод дает возможность определить только эффективную массу плотности состояний (4.58).

В заключение этого пункта рассмотрим термо-э. д. с. полупроводников, в проводимости которых участвуют два типа носителей заряда. Это могут быть электроны проводимости и дырки или легкие и тяжелые дырки в полупроводниках типа p -Ge.

При $H = 0$ из (13.17) следует, что $\alpha(0) = \beta_{11}(0) / \sigma_{11}(0)$. Если в проводимости участвуют два типа носителей, то $\beta_{11}(0) = \beta_{11}^{(1)}(0) + \beta_{11}^{(2)}(0)$ и $\sigma_{11}(0) = \sigma_{11}^{(1)}(0) + \sigma_{11}^{(2)}(0)$. В результате для термо-э. д. с. в полупроводниках с двумя типами носителей заряда получим выражение

$$\alpha_0 = (\sigma_1 + \sigma_2)^{-1} (\sigma_1 \alpha_1 + \alpha_2 \sigma_2), \quad (14.48)$$

где $\sigma_1 = \sigma_{11}^{(1)}(0)$, $\sigma_2 = \sigma_{11}^{(2)}(0)$ и $\alpha_1 = \beta_{11}^{(1)}(0) / \sigma_{11}^{(1)}(0)$, $\alpha_2 = \beta_{11}^{(2)}(0) / \sigma_{11}^{(2)}(0)$ — парциальные электропроводности и термо-э. д. с., связанные с отдельными типами носителей заряда. Электропроводность и термо-э. д. с. полупроводников с одним типом носителей в общем случае определяются формулами (14.2) и (14.29).

В случае полуметаллов в (14.48) следует заменить

$$\sigma_1 = neu_n, \quad \sigma_2 = pev_p, \quad \alpha_1 = -(k_0/e) (\delta_1 - \eta_1), \\ \alpha_2 = (k_0/e) (\delta_2 - \eta_2);$$

здесь $\delta_1 = F_{r+2}(\eta_1) / F_{r+1}(\eta_1)$, $\delta_2 = F_{r+2}(\eta_2) / F_{r+1}(\eta_2)$, где $\eta_1 =$

$=\xi_F/k_0T$, $\eta_2 = (\varepsilon_n - \xi_F)/k_0T$, ε_n — перекрытие зоны проводимости и валентной зоны (см. рис. 11).

Общую формулу (14.48) распишем для одного частного случая. Рассмотрим полупроводник со смешанной проводимостью. Для простоты предположим, что электроны проводимости и дырки невырождены и имеют параболическую зону. Кроме того, будем считать, что время релаксации дырок имеет такой же вид, как и время релаксации электронов (12.1). При этих предположениях, в силу (14.45), формула (14.48) примет вид

$$\alpha_0 = \frac{k_0}{e} \frac{1}{nu_n + pu_p} [pu_p(r_p + 2 - \eta_p) - nu_n(r_n + 2 - \eta)], \quad (14.49)$$

где $\eta_p = -\eta - \varepsilon_g/k_0T$, n , p , u_n , u_p , r_n и r_p — концентрации, подвижности и параметры рассеяния электрона и дырки соответственно.

Из сравнения (14.49) и (14.45) видно, что термо-э. д. с. полупроводников со смешанной проводимостью меньше, чем термо-э. д. с. полупроводников с примесной проводимостью. В идеальном случае, когда $n = p$, $u_n = u_p$, $r_n = r_p$ и $m_n = m_p$, термо-э. д. с., согласно (14.49), равна нулю, так как $\eta = -\varepsilon_g/2k_0T = \eta_p$.

Этот результат можно объяснить и качественно. Действительно, в полупроводниках со смешанной проводимостью к холодному концу полупроводника диффундируют одновременно и электроны, и дырки и их заряды компенсируют друг друга.

Отметим, что общую формулу (14.48) можно использовать при объяснении особенности концентрационной и температурной зависимостей α в полупроводниках p -типа, в которых обычно играют роль как легкие, так и тяжелые дырки.

В полупроводниках типа p -Ge, в которых вершины зон тяжелых и легких дырок соприкасаются в одной точке $k = 0$, в явлениях переноса в основном играют роль только тяжелые дырки, поэтому в температурной и концентрационной зависимостях термо-э. д. с. не должно наблюдаться никаких особенностей.

Среди полупроводников с дырочной проводимостью особое место занимает p -PbTe. Предполагаемая структура края валентной зоны этого соединения описана в § 3, п. 5, и показана на рис. 9. Как видно из этого рисунка, при низких температурах вершина зоны тяжелых дырок находится ниже, чем вершина зоны легких дырок, на величину $\Delta\varepsilon$. Исходя из такой модели, на основе формулы (14.48) проанализируем концентрационную зависимость термо-э. д. с. в вырожденных p -PbTe. Для этого (14.48) перепишем в виде

$$\alpha_0 = (p_1u_{p_1} + p_2u_{p_2})^{-1} (p_1u_{p_1}\alpha_{p_1} + p_2u_{p_2}\alpha_{p_2}), \quad (14.50)$$

где индекс 1 относится к легким, а 2 — к тяжелым дыркам.

Для концентраций $p < p_0$, где p_0 — концентрация дырок, при которой уровень Ферми совпадает с вершиной зоны тяжелых дырок, т. е. определяется из условия $\xi_p = \Delta\varepsilon$ (см. рис. 9), $p_2 \approx 0$

и $p \approx p_1$, следовательно, $\alpha_0 \approx \alpha_{p_1}$ (рис. 19). Как только уровень Ферми достигает вершины зоны тяжелых дырок, начнет заполняться зона тяжелых дырок. Однако, поскольку плотность состояний в зоне тяжелых дырок намного больше, чем в зоне легких дырок, то с ростом концентраций уровень Ферми почти не будет меняться и термо-э. д. с., как функция уровня Ферми ξ_p , почти не будет зависеть от концентрации дырок (см. рис. 19). Пока заполнение зоны тяжелых дырок такое, что $p_2 \ll (u_{p_1}/u_{p_2}) p_1$, выражение (14.50) можно представить как

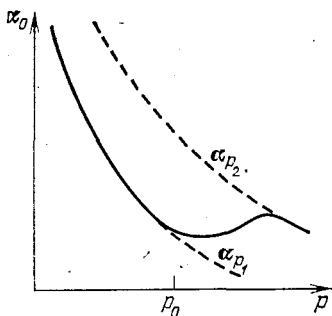


Рис. 19. Зависимость термо-э. д. с. от общей концентрации $p = p_1 + p_2$ в вырожденном p -PbTe (схематически). $p_0 \approx 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. α_{p_1} и α_{p_2} — парциальные термо-э. д. с. легких и тяжелых дырок

$$\alpha_0 \approx \alpha_{p_1} \left(1 + \frac{p_2 u_{p_2} \alpha_{p_2}}{p_1 u_{p_1} \alpha_{p_1}} \right). \quad (14.51)$$

Поскольку парциальная термо-э. д. с. $\alpha_{p_2} \gg \alpha_{p_1}$ из-за большой разности эффективных масс плотности состояний для тяжелых и легких дырок, то может выполняться равенство $p_2 u_{p_2} \alpha_{p_2} \approx p_1 u_{p_1} \alpha_{p_1}$. Тогда $\alpha_0 > \alpha_{p_1}$ и термо-э. д. с. может расти с ростом концентрации p . При очень больших

заполнениях валентной зоны, когда $p_2 \gg p_1$, из (14.48) следует, что $\alpha_0 \approx \alpha_{p_2}$ и падает с концентрацией дырок (см. рис. 19). Указанная особенность концентрационной зависимости термо-э. д. с. в p -PbTe была наблюдаена в работах [18, 19] при 77 и 300 К.

Из модели, приведенной на рис. 9, видно, что с ростом температуры край валентной зоны перестраивается, и при $T > T_0 \approx 400 \div 500 \text{ К}$ вершина тяжелых дырок оказывается выше и все будет определяться тяжелыми дырками. Поэтому при высоких температурах $T > T_0$ в концентрационной зависимости термо-э. д. с. никаких аномалий не должно быть, т. е. $\alpha_0 \approx \alpha_{p_2}$, которая монотонно падает с ростом концентрации (см. рис. 19).

Следует отметить, что поскольку с ростом температуры перестраивается край валентной зоны (рис. 9), то в вырожденных образцах p -PbTe температурная зависимость также будет иметь особенность. В области температур $T < T_0$, где T_0 — температура, при которой вершины зон легких и тяжелых дырок совпадают (рис. 9), $\alpha_0 \approx \alpha_{p_1}$, а при $T > T_0$ $\alpha_0 \approx \alpha_{p_2}$, и поэтому в области $T \approx T_0$ должна наблюдаться более сильная температурная зависимость, чем линейная (рис. 20). Однако с ростом температуры α_0 может не достигать α_{p_2} из-за начала смешанной проводимости.

3. Электронная теплопроводность; число Лоренца. Рассмотрим теплопроводность, обусловленную движением носителей заряда.

Когда в проводнике электрический ток отсутствует ($j = 0$), поток тепла пропорционален только градиенту температуры:

$$w = -\kappa \nabla T; \quad (14.52)$$

здесь κ есть теплопроводность. При $H = 0$, согласно (13.18), $\kappa = \kappa_\phi + \kappa_0$, где

$$\kappa_0 = \kappa_{11}(0) - T\beta_{11}(0)\alpha(0) \quad (14.53)$$

— электронная теплопроводность. Если учесть, что $\alpha(0) = \beta_{11}(0)/\sigma_{11}(0)$, то

$$\kappa_0 = \kappa_{11}(0) - T\beta_{11}^2(0)/\sigma_{11}(0). \quad (14.54)$$

Используя (13.23) — (13.25), можно получить закон Видемана — Франца, т. е.

$$\kappa_0 = L_0 \sigma_0 T, \quad (14.55)$$

где σ_0 — электрическая проводимость (14.2), а

$$L_0 = \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 \left(\frac{\langle x^2 \tau / m \rangle}{\langle \tau / m \rangle} - \frac{\langle x \tau / m \rangle^2}{\langle \tau / m \rangle^2} \right) \quad (14.56)$$

— число Лоренца; $x = \varepsilon / k_0 T$.

Согласно (13.21) и (4.25) при полном вырождении число Лоренца равно нулю, а в первом исчезающем приближении по вырождению электронного газа для любой зависимости $m(\varepsilon)$ и $\tau(\varepsilon)$ число Лоренца $L_0 = (\pi^2/3)(k_0/e)^2$, т. е. L_0 не зависит ни от механизма рассеяния, ни от конкретного вида закона дисперсии и равняется своему зоммерфельдовскому значению.

Для модели Кейна в двухзонном приближении, когда $m(\varepsilon)$ и $\tau(\varepsilon)$ даются (14.14) и (14.15), число Лоренца выражается через двухпараметрические интегралы Ферми (4.29) следующим образом*):

$$L_0(\eta, \beta) = \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 \left[\frac{I_{r+1,2}^2(\eta, \beta)}{I_{r+1,2}^0(\eta, \beta)} - \left(\frac{I_{r+1,2}^1(\eta, \beta)}{I_{r+1,2}^0(\eta, \beta)} \right)^2 \right], \quad (14.57)$$

которое для параболической зоны ($\beta \rightarrow \infty$), согласно (4.31), имеет вид

$$L_0(\eta, \infty) = \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 \left[\frac{F_{r+3}(\eta)}{F_{r+1}(\eta)} - \left(\frac{F_{r+2}(\eta)}{F_{r+1}(\eta)} \right)^2 \right], \quad (14.58)$$

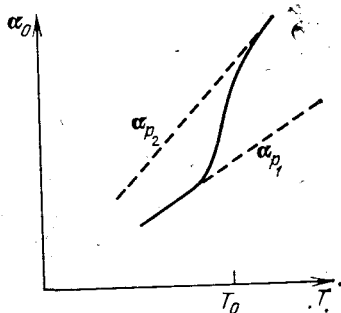


Рис. 20. Зависимость термо-э. д. с. от температуры в вырожденном p -PbTe (схематически). $T_0 \approx 400 \div 500$ К. α_{p_1} и α_{p_2} — парциальные термо-э. д. с. легких и тяжелых дырок

* В случае модели Кейна в трехзонном приближении в (14.57) двухпараметрические интегралы следует заменить трехпараметрическими интегралами Ферми (14.7) с такими же индексами: $\mathcal{I}_{n,k}^m(\eta, \beta, \delta)$.

где $F_r(\eta)$ — однопараметрические интегралы Ферми (4.33). В случае сильно непараболической зоны ($\beta \rightarrow 0$), в силу (4.32), из (14.57) получим

$$L_0(\eta, 0) = \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 \left[\frac{F_{2r+2}(\eta)}{F_{2r}(\eta)} - \left(\frac{F_{2r+1}(\eta)}{F_{2r}(\eta)}\right)^2 \right]. \quad (14.59)$$

В случае сильного вырождения ($\eta \gg 1$) последние две формулы в соответствии с общим результатом дают одно и то же значение: $L_0 = (\pi^2/3)(k_0/e)^2$, а для невырожденного электронного газа ($-\eta \gg 1$), согласно (4.38), в параболической зоне ($\epsilon_g \rightarrow \infty$)

$$L_0(-\infty, \infty) = (r+2)(k_0/e)^2, \quad (14.60)$$

в сильно непараболической зоне ($\epsilon_g \rightarrow 0$)

$$L_0(-\infty, 0) = (2r+1)(k_0/e)^2. \quad (14.61)$$

Для наглядности на рис. 21 приведены схематические зависимости $L_0/(k_0/e)^2$ от η для разных механизмов рассеяния на основе асимптотики (14.60) и (14.61). Как видно из этого рисунка, учет непараболичности зоны для механизмов с $r=0$ (акустические фононы) уменьшает число Лоренца, а с $r=2$ (рассеяние на ионах примеси), наоборот, учет непараболичности увеличивает значение L_0 . При механизме рассеяния с $r=1$ (полярные оптические фононы) L_0 от степени непараболичности вообще не зависит и очень слабо зависит от степени вырождения.

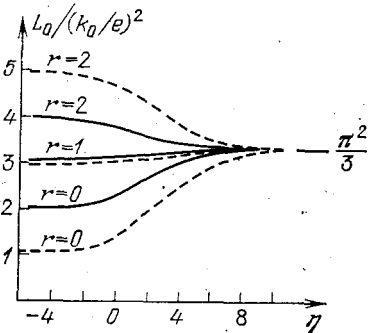


Рис. 21. Зависимость $L_0/(k_0/e)^2$ от степени вырождения η для различных механизмов рассеяния носителей заряда в параболической (сплошная линия) и сильно непараболической (штриховая линия) зонах

упруго. На самом деле, как было показано в § 9, п. 2, единое время релаксации (одинаковое для электрической проводимости и теплопроводности), не зависящее от типа возмущения (электрическое поле или градиент температуры), можно ввести только тогда, когда рассеяние упруго. Если процесс рассеяния носителей заряда неупруг, то «времена релаксации», определяющие электрическую проводимость и теплопроводность, вообще говоря, должны быть различными, т. е. неупругий механизм релаксации по-разному влияет на процесс электрической проводимости и теплопроводности, и поэтому отношение $L = \kappa_0/\sigma_0 T$, полученное из эксперимента, будет отличаться от L_0 .

Действительно, такое отличие было обнаружено при исследовании теплопроводности HgSe [20] и различных соединений халькогенидов свинца [21—23]. В этих работах показано, что в некоторой области температур и значений концентраций $L < L_0$, что соответствует общему выводу Займана [24, 25], который показал, что число Лоренца при неупругом механизме релаксации должно быть меньше, чем при упругом механизме (см. § 10 гл. 9 в [24] и § 8 гл. 8 в [25]). Это связано с тем, что при неупругом рассеянии возможны процессы, когда энергия носителей заряда может меняться существенно, а их импульс меняться незначительно. Такие процессы уменьшают теплопроводность и не меняют электрическую проводимость, и поэтому $L < L_0$.

На рис. 22 приведены зависимости L/L_0 от температуры, полученные на образцах n -PbTe с различными концентрациями [23], из которого видно, что с ростом концентрации L/L_0 стремится к единице во всем температурном интервале; наибольшее отличие L от L_0 имеет место при температуре жидкого азота; с ростом и понижением температуры $L/L_0 \rightarrow 1$.

Неупругость имеет место при рассеянии носителей заряда на оптических фононах и при межэлектронном рассеянии. Такие неупругие механизмы можно рассмотреть только вариационным методом, так как приближения времени релаксации при этом не проходит. В работе [26] показано, что зависимости, приведенные на рис. 22, качественно можно объяснить с учетом межэлектронного столкновения.

Теперь рассмотрим теплопроводность полупроводников, в которых тепло переносится двумя типами носителей заряда (два типа дырок, дырки и электроны, два типа электронов с разными эффективными массами). В этом случае, если в (14.54) заменить $\sigma_{11}(0) = \sigma_{11}^{(1)}(0) + \sigma_{11}^{(2)}(0)$, $\beta_{11}(0) = \beta_{11}^{(1)}(0) + \beta_{11}^{(2)}(0)$ и $\kappa_{11}(0) = \kappa_{11}^{(1)}(0) + \kappa_{11}^{(2)}(0)$, то для теплопроводности, обусловленной двумя типами носителей заряда, легко получим выражение

$$\kappa_0 = \kappa_1 + \kappa_2 + T\sigma_1\sigma_2(\sigma_1 + \sigma_2)^{-1}(\alpha_1 - \alpha_2)^2, \quad (14.62)$$

где κ_1 , κ_2 , σ_1 , σ_2 и α_1 , α_2 — парциальные, т. е. связанные с наличием только одного типа носителей, теплопроводность, электропроводность и термо-э. д. с. Выражения этих парциальных величин приведены выше. Используя эти выражения в (14.62), можно получить теплопроводность для различных случаев.

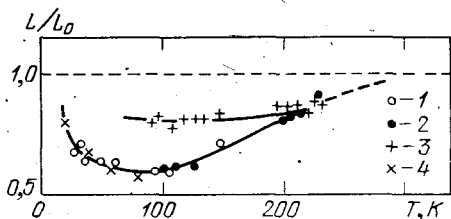


Рис. 22. Зависимость L/L_0 от температуры для n -PbTe [23]: 1 — $n = 5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$; 2 — $n = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (1 и 2 данные [21]); 3 — $n = 8,9 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; 4 — расчет с учетом межэлектронных столкновений для образца с $n = 5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$

Формулу (14.62) применим к одному частному случаю — полупроводнику со смешанной проводимостью. В этом случае $\kappa_1 = \kappa_n$, $\kappa_2 = \kappa_p$; $\sigma_1 = \sigma_n$, $\sigma_2 = \sigma_p$; $\alpha_1 = \alpha_n$, $\alpha_2 = \alpha_p$. Допустим, что зона проводимости и валентная зона параболически, а электронный и дырочный газы невырождены и имеют одинаковый параметр рассеяния. Подставляя значения соответствующих коэффициентов в (14.62), с учетом (14.45), (14.55) и (14.60) получим

$$\kappa_0 = \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 T \sigma \left[(r + 2) + \frac{\sigma_n \sigma_p}{\sigma^2} \left(2r + 4 + \frac{\varepsilon_g}{k_0 T} \right)^2 \right], \quad (14.63)$$

где $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$.

Если $\sigma_n \approx \sigma_p$, то второе слагаемое в (14.63), которое соответствует *биполярной диффузии* электрон-дырочной пары, может быть важнее, чем первое, так как $\varepsilon_g/k_0 T \gg 1$. Благодаря этому электрон-дырочная теплопроводность в полупроводниках со смешанной проводимостью может оказаться заметной.

Отметим, что из формулы (14.63), зная ряд параметров, можно определить ширину запрещенной зоны ε_g и ее зависимость от температуры. При этом надо измерить на образцах *n*- и *p*-типа электрическую проводимость, термо-э. д. с. и теплопроводность в области примесной и смешанной проводимости.

Формула (14.62) справедлива и для полуметаллов. Чтобы написать явный вид (14.62) для этого случая, во всех выражениях следует учесть, что $\eta_1 = \zeta_F/k_0 T$ и $\eta_2 = (\varepsilon_n - \zeta_F)/k_0 T$, где ε_n — перекрытие зоны проводимости и валентной зоны (см. рис. 11).

Электронная теплопроводность в полупроводниках и металлах более подробно рассмотрена в книге [27].

§ 15. Явления переноса в магнитном поле

Настоящий параграф посвящен рассмотрению кинетических эффектов в однородном постоянном некантованном магнитном поле.

Выражения основных кинетических коэффициентов, приведенные в (13.26) — (13.29), сводятся к известным табулированным интегралам или аналитически вычисляются только при определенных предположениях о структуре зоны, о механизмах рассеяния, о степени вырождения носителей тока и о величине напряженности магнитного поля. Только в случае сильного вырождения кинетические коэффициенты можно вычислить в произвольном магнитном поле без каких-либо предположений относительно функций $m(\varepsilon)$ и $\tau(\varepsilon)$. Рассмотрим основные кинетические эффекты в различных предельных случаях.

1. Эффект Холла. Сущность этого явления заключается в следующем. Если однородный проводник, в котором в направлении *Ox* течет ток j_x , поместим в магнитное поле $\mathbf{H}(0, 0, H)$, то под действием силы Лоренца носители заряда в зависимости от их знака будут отклоняться к одной из граней, перпендикулярных

направлению Oy . Благодаря этому на одной из граней будут скапливаться носители заряда, а на противоположной грани останется нескомпенсированный заряд другого знака, что приведет к возникновению поля E_y , перпендикулярного $H_z = H$ и току j_x . Процесс накопления заряда на гранях будет продолжаться до тех пор, пока действие поперечного электрического поля E_y не уравновесит действие силы Лоренца. После выполнения условия $eE_y = (e/c)vH$ носители заряда в среднем будут двигаться вдоль образца (по направлению Ox), накопление заряда (ток вдоль Oy) прекратится и установится стационарное состояние, соответствующее условию $j_y = 0$.

Величина поперечного поля E_y в стационарном состоянии, очевидно, должна быть пропорциональна величине тока j_x и магнитного поля H_z , т. е.

$$E_y = RH_z j_x. \quad (15.1)$$

Возникновение поперечного поля называется *эффектом Холла*, а коэффициент пропорциональности R в (15.1) — *постоянной Холла*. Очевидно, знаки R для электронной и дырочной проводимости будут противоположными.

В слабом магнитном поле ($v \ll 1$) из общей формулы (13.27) для постоянной Холла получим

$$R_0 = -a_r / nec, \quad (15.2)$$

где

$$a_r = \langle (\tau/m)^2 \rangle / \langle \tau/m \rangle^2 \quad (15.3)$$

— холл-фактор. Из (13.21) следует, что холл-фактор в следующих двух случаях равен единице: $a_r = 1$, если носители заряда полностью вырождены и если τ/m не зависит от энергии. Последний случай имеет место в параболической зоне при рассеянии на оптических фононах в области низких температур [см. (11.63) и (11.84)]. Отметим, что в указанных предположениях холл-фактор равен единице не только в слабом, но и в произвольном магнитном поле, что непосредственно видно из (13.27). Интересно также подчеркнуть, что указанные два условия, при которых холл-фактор $a_r = 1$, можно обобщить и сформулировать в виде одного условия: если угол поворота направления движения носителей в магнитном поле $\varphi = \Omega\tau = (eH/c)(\tau/m)$ (см. п. 2 настоящего параграфа) один и тот же для всех носителей заряда, то каждый носитель в эффекте Холла дает одинаковый вклад, и поэтому статистический фактор $a_r = 1$. Отсюда следует, что для этого требуется, чтобы отношение τ/m было одно и то же для каждого носителя. Это условие может выполняться, если τ/m от скорости носителей вовсе не зависит или же сами все носители имеют одинаковую скорость, что имеет место в сильно вырожденных образцах, так как в этом случае в проводимости участвуют те носители, у которых энергия равна граничной энергии Ферми.

В непараболической зоне для двухзонного приближения Кейна (3.26) холл-фактор, согласно (14.14) и (14.15), выражается через двухпараметрические интегралы Ферми (4.29) следующим образом (см. табл. 6):

$$a_r(\eta, \beta) = I_{3/2,0}^0 I_{2r+1/2,4}^0 (I_{r+1,2}^0)^{-2}, \quad (15.4)$$

который для параболической зоны ($\beta \rightarrow 0$), в силу (4.31), имеет вид

$$a_r(\eta) = F_{3/2} F_{2r+1/2} (F_{r+1})^{-2}, \quad (15.5)$$

где $F_r(\eta)$ — однопараметрические интегралы Ферми (4.33).

Т а б л и ц а 6

Средние значения типа (13.21) различных величин, входящих в кинетические коэффициенты, для известных моделей зон

	Непараболическая зона в двухзонном приближении Кейна (3.26)* (каждый член надо разделить на $I_{3/2,0}^0$)	Параболическая зона (каждый член надо разделить на $F_{3/2}$)	Параболическая зона, невырожденные полупроводники (каждый член надо разделить на $3\sqrt{\pi}/4$)
$\langle \tau/m \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n) I_{r+1,2}^0$	$(\tau_{0r}/m_n) F_{r+1}$	$(\tau_{0r}/m_n) \Gamma(r+2)$
$\langle x(\tau/m) \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n) I_{r+1,2}^1$	$(\tau_{0r}/m_n) F_{r+2}$	$(\tau_{0r}/m_n) \Gamma(r+3)$
$\langle x^2(\tau/m) \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n) I_{r+1,2}^2$	$(\tau_{0r}/m_n) F_{r+3}$	$(\tau_{0r}/m_n) \Gamma(r+4)$
$\langle (\tau/m)^2 \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 I_{2r+1/2,4}^0$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 F_{2r+1/2}$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 \Gamma(2r+3/2)$
$\langle x(\tau/m)^2 \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 I_{2r+1/2,4}^1$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 F_{2r+3/2}$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 \Gamma(2r+5/2)$
$\langle x^2(\tau/m)^2 \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 I_{2r+1/2,4}^2$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 F_{2r+5/2}$	$(\tau_{0r}/m_n)^2 \Gamma(2r+7/2)$
$\langle (\tau/m)^3 \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 I_{3r,6}^0$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 F_{3r}$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 \Gamma(3r+1)$
$\langle x(\tau/m)^3 \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 I_{3r,6}^1$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 F_{3r+1}$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 \Gamma(3r+2)$
$\langle x^2(\tau/m)^3 \rangle$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 I_{3r,6}^2$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 F_{3r+2}$	$(\tau_{0r}/m_n)^3 \Gamma(3r+3)$
$\langle m/\tau \rangle$	$(m_n/\tau_{0r}) I_{2-r,-2}^0$	$(m_n/\tau_{0r}) F_{2-r}$	$(m_n/\tau_{0r}) \Gamma(3-r)$
$\langle x(m/\tau) \rangle$	$(m_n/\tau_{0r}) I_{2-r,-2}^1$	$(m_n/\tau_{0r}) F_{3-r}$	$(m_n/\tau_{0r}) \Gamma(4-r)$
$\langle x^2(m/\tau) \rangle$	$(m_n/\tau_{0r}) I_{2-r,-2}^2$	$(m_n/\tau_{0r}) F_{4-r}$	$(m_n/\tau_{0r}) \Gamma(5-r)$
$\langle x \rangle$	$I_{3/2,0}^1$	$F_{5/2}$	$\frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{5}{2}$
$\langle x^2 \rangle$	$I_{3/2,0}^2$	$F_{7/2}$	$\frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{35}{4}$

* Для модели Кейна в трехзонном приближении (3.25) двухпараметрические интегралы $I_{n,h}^m(\eta, \beta)$ (4.39) следует заменить трехпараметрическими интегралами Ферми $\mathcal{I}_{n,h}^m(\eta, \beta, \delta)$ (14.8) с такими же индексами.

В случае невырожденных полупроводников, согласно (4.38), (15.5) переходит в известное выражение

$$a_r = (\sqrt[3]{\pi}/4) (\Gamma(2r + 3/2)/\Gamma^2(r + 2)), \quad (15.6)$$

которое при $r=0$ (рассеяние на акустических фононах) дает $a_0 = 3\pi/8 = 1,18$, при $r=1$ (рассеяние на полярных оптических фононах) $a_1 = 45\pi/128 = 1,1$, а при $r=2$ (рассеяние на ионах примеси) $a_2 = 315\pi/512 = 1,93$. Следовательно, в зависимости от степени вырождения холл-фактор может меняться в пределах $1 \leq a_r \leq 2$.

Отметим, что исследованием эффекта Холла в области примесной проводимости можно определить тип проводимости (по знаку R) и непосредственно найти концентрацию носителей тока n ; при этом, если образец невырожден, полученное значение n может быть завышено в a_r раз, т. е. не больше, чем в два раза.

Из (14.2) и (15.2) получим

$$|R_0| \sigma_0 c = u a_r \equiv u_H = e \langle (\tau/m)^2 \rangle / \langle \tau/m \rangle. \quad (15.7)$$

Величина u_H известна как *холловская подвижность*. Видно, что u_H от дрейфовой подвижности u отличается, точнее, в a_r раз больше.

Таким образом, одновременное изменение электрической проводимости σ_0 и постоянной Холла R в области примесной проводимости дает возможность определить тип проводимости, а также оценить концентрацию и подвижность носителей заряда.

В сильных магнитных полях ($v \gg 1$)*), как непосредственно следует из (13.27), постоянная Холла

$$R_\infty = -1/nec \quad (15.2')$$

от механизма рассеяния, закона дисперсии и степени вырождения носителей заряда не зависит, а определяется только концентрацией носителей заряда, т. е., измеряя R в сильном магнитном поле, n можно определить более точно.

Из сравнения (15.2) и (15.2') видно, что с ростом магнитного поля (при переходе из области $v \ll 1$ в область $v \gg 1$) постоянная Холла может уменьшаться, если полупроводник невырожден.

Рассмотрим эффект Холла в полупроводниках с двумя типами носителей заряда. В этом случае постоянную Холла при произвольном магнитном поле можно выразить через парциальные значения R_1 , R_2 и проводимости σ_1 , σ_2 , которые определяются только одним типом носителей.

*) Согласно (9.56) решение кинетического уравнения можно использовать и в области сильных магнитных полей, когда $v \gg 1$, но еще выполняется условие (8.22), т. е. квантование движения несущественно.

Когда присутствуют два типа носителей тока, компоненты тензора σ_{ik} в (13.15) следует представить в виде суммы $\sigma_{11} = \sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{11}^{(2)}$ и $\sigma_{12} = \sigma_{12}^{(1)} + \sigma_{12}^{(2)}$. Тогда

$$R = -H^{-1}(\sigma_{12}^{(1)} + \sigma_{12}^{(2)})[(\sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{11}^{(2)})^2 + (\sigma_{12}^{(1)} + \sigma_{12}^{(2)})^2]^{-1}. \quad (15.8)$$

С другой стороны, парциальные значения R_1 , R_2 и $\sigma_1 = \rho_1^{-1}$, $\sigma_2 = \rho_2^{-1}$ определяются следующими формулами:

$$R_1 = -\frac{1}{H} \frac{\sigma_{12}^{(1)}}{(\sigma_{11}^{(1)})^2 + (\sigma_{12}^{(1)})^2}, \quad \sigma_1 = \frac{(\sigma_{11}^{(1)})^2 + (\sigma_{12}^{(1)})^2}{\sigma_{11}^{(1)}} \quad (15.9)$$

и аналогично для R_2 и σ_2 .

Из (15.9) находим

$$\sigma_{11}^{(1)} = \frac{\sigma_1}{1 + H^2 R_1^2 \sigma_1^2}, \quad \sigma_{12}^{(1)} = -\frac{H R_1 \sigma_1^2}{1 + H^2 R_1^2 \sigma_1^2}. \quad (15.10)$$

Подставляя эти значения $\sigma_{11}^{(1)}$ и $\sigma_{12}^{(1)}$, а также аналогичные выражения для $\sigma_{11}^{(2)}$ и $\sigma_{12}^{(2)}$ в (15.8), для постоянной Холла в произвольном магнитном поле получим [28]

$$R = \frac{1}{D_0} [R_1 \sigma_1^2 + R_2 \sigma_2^2 + H^2 R_1 R_2 \sigma_1^2 \sigma_2^2 (R_1 + R_2)], \quad (15.11)$$

где

$$D_0 = (\sigma_1 + \sigma_2)^2 + H^2 \sigma_1^2 \sigma_2^2 (R_1 + R_2)^2. \quad (15.12)$$

В слабом магнитном поле ($H R_i \sigma_i \ll 1$) формула (15.11) принимает простой вид

$$R_0 = (R_1 \sigma_1^2 + R_2 \sigma_2^2) (\sigma_1 + \sigma_2)^{-2}. \quad (15.13)$$

В области смешанной проводимости $\sigma_1 = \sigma_n$, $\sigma_2 = \sigma_p$ и $R_1 = R_n$, $R_2 = R_p$, следовательно,

$$R_0 = (R_n \sigma_n^2 + R_p \sigma_p^2) (\sigma_n + \sigma_p)^{-2}, \quad (15.14)$$

причем R_n дается формулой (15.2), а R_p из (15.2) получается заменой $-e \rightarrow e$, $n \rightarrow p$ и $a_r \rightarrow a_r^{(p)}$. Тогда

$$R_0 = \frac{1}{ec} \frac{(a_r^{(n)} n u_n^2 + a_r^{(p)} p u_p^2)}{(n u_n + p u_p)^2}, \quad (15.15)$$

где $a_r^{(n)}$ и $a_r^{(p)}$ — холл-факторы для электронов и дырок.

Если электроны проводимости и дырки невырождены, то $a_r^{(n)} = a_r^{(p)} = a_r$ [см. (15.6)] и коэффициент Холла в невырожденном полупроводнике в области смешанной проводимости в слабом магнитном поле имеет вид

$$R_0 = \frac{a_r}{ec} \frac{(p u_p^2 - n u_n^2)}{(n u_n + p u_p)^2}; \quad (15.16)$$

здесь a_r определяется (15.6).

Видно, что в области смешанной проводимости эффект Холла меньше, чем в области примесной проводимости. Физически этот факт становится понятным, если учесть, что при переносе заряда в данном внешнем электрическом поле электроны проводимости и дырки в образце движутся в противоположном направлении, и поэтому в поперечном магнитном поле силой Лоренца они отклоняются на одну и ту же грань образца. Следовательно, скопление заряда на боковых гранях определяется только разностью подвижности и концентрации носителей разноименных зарядов.

Исследование эффекта Холла в области примесной и собственной проводимости позволяет определить отношение подвижностей электронов и дырок. Допустим, что мы имеем образец p -типа. В области примесной проводимости R положителен, и по его значению можно найти концентрацию акцепторов $N_a = p$. С ростом температуры начнут генерироваться неосновные носители — электроны проводимости, наступит смешанная проводимость и $R(T)$ уменьшится. При некоторой температуре $T = T_0$ коэффициент Холла может равняться нулю, $R(T_0) = 0$, а затем становится отрицательным. Согласно (15.16) R будет нулем при

$$n/p = (u_p/u_n)^2. \quad (15.17)$$

Очевидно, что $p - n = N_a$, N_a — концентрация акцепторов. С другой стороны, зная эффективные массы дырок и электронов и ширину запрещенной зоны, согласно (6.36), можно вычислить произведение $n \cdot p = n_i^2$ для температуры $T = T_0$. Таким образом, измеряя R в области примесной проводимости и находя точку T_0 , в которой $R(T_0) = 0$, в отдельности можем определить n и p , при которых $R = 0$, т. е. выполняется условие (15.17). Значение левой части n/p в (15.17) дает сведения об отношении подвижностей u_p/u_n .

Формулу (15.13) можно использовать при интерпретации особенностей эффекта Холла в образцах p -PbTe, где край валентной зоны имеет сложную структуру (рис. 9).

Теперь рассмотрим эффект Холла в области смешанной проводимости в сильном магнитном поле. Для вычисления R в этом случае можно разложить (13.23) и (13.36) по степеням малого параметра $v_{n,p}^{-1} \ll 1$ и подставить в (15.8). Здесь следует различать два случая: примесный полупроводник ($n \neq p$) и собственный полупроводник ($n = p$).

Для примесных полупроводников ($n \neq p$) получим

$$R_\infty = 1/ec(p - n). \quad (15.18)$$

В отличие от этого случая, в собственных полупроводниках ($n = p$) R_∞ зависит от механизма рассеяния и закона дисперсии зоны проводимости и валентной зоны и имеет вид

$$R_\infty = \frac{1}{nec} \frac{\langle (m/\tau)_n^2 \rangle - \langle (m/\tau)_p^2 \rangle}{[\langle (m/\tau)_n \rangle + \langle (m/\tau)_p \rangle]^2}. \quad (15.19)$$

Для параболической зоны и степенного закона для времени релаксации (12.1) формула (15.19), согласно (14.18), переходит в следующее выражение:

$$R_{\infty} = (d_r/nec) (u_p - u_n)/(u_p + u_n), \quad (15.20)$$

где

$$d_r = F_{3/2} F_{5/2-2r} (F_{2-r})^{-2}. \quad (15.21)$$

Отметим, что критерии применимости формул (15.18) и (15.19) различны. Проследив получение их из общей формулы (15.8), можно установить, что формула (15.18) справедлива при полях, удовлетворяющих условию

$$\frac{Hu_n}{c} \gg \frac{p + nu_n/u_p}{|n - p|}, \quad (15.22)$$

тогда как выражение (15.19) или (15.20) применимо при полях

$$Hu_n/c \gg |u_n - u_p|/u_p. \quad (15.23)$$

Из сравнения этих неравенств следует, что (15.22) является более жестким условием.

Обратим внимание на то, что эффект Холла в собственных полупроводниках от магнитного поля почти не зависит, так как (15.16) при $n = p$ отличается от (15.20) численным множителем порядка единицы. В отличие от этого, в примесных полупроводниках ($n \neq p$) с ростом магнитного поля коэффициент Холла должен расти от (15.16) до (15.18). Таким образом, в области смешанной проводимости, если измерить $R(H)$ и достичь полей, удовлетворяющих (15.22), то можно наблюдать рост R с увеличением магнитного поля. Это напоминает обратную картину — уменьшение R с ростом температуры, когда примесная область переходит в смешанную область проводимости, т. е. переход от значения (15.2) к значению (15.16).

2. Магнитное сопротивление — изменение сопротивления в магнитном поле. Качественно рассмотрим это явление. Известно, что в магнитном поле носители заряда, меняя свое первоначальное направление между двумя последовательными столкновениями (за время свободного пробега, которое порядка времени релаксации τ), движутся по окружности с радиусом $r = mv_c/eH$. В слабом магнитном поле угол поворота мал и равен отношению длины свободного пробега $l = v\tau$ к радиусу r :

$$\varphi \approx l/r = (eH/c)\tau/m. \quad (15.24)$$

Важным обстоятельством является то, что угол поворота не зависит от скорости носителей тока и определяется только отношением τ/m . Если проводник, вдоль которого течет ток j_x , поместить в магнитное поле H , перпендикулярное току, то носители тока начнут отклоняться по направлению Oy и в результате возникнет поле Холла E_y . Поле Холла выпрямляет эти отклонения носителей тока от первоначального направления. Если угол поворота φ , т. е. τ/m , одинаков для каждого носителя, то

траектория каждого отдельного носителя будет такой же, как и без магнитного поля. Следовательно, сопротивление проводника не изменится. Однако, если τ/m , т. е. угол поворота φ , различно для различных носителей, то поле Холла E_y может выпрямлять только некоторое среднее отклонение φ и, следовательно, носители с отклонением $\varphi < \bar{\varphi}$ и $\varphi > \bar{\varphi}$ будут иметь искривленные траектории. Это означает, что длина свободного пробега и тех ($\varphi < \bar{\varphi}$), и других ($\varphi > \bar{\varphi}$) носителей тока в направлении внешнего электрического поля будет меньше, чем без магнитного поля. В результате сопротивление в магнитном поле будет больше, чем без поля, $\rho(H) > \rho(0)$.

Таким образом, необходимым условием возникновения магнетосопротивления является то, что в проводнике мы должны иметь носители с различными τ/m . Это может иметь место, когда τ/m зависит от энергии носителей и при этом имеется распределение носителей тока по энергиям. Кроме того, сопротивление может изменяться в магнитном поле и в том случае, когда имеется два типа носителей заряда, если даже распределение по энергиям отсутствует, т. е. оба типа носителей находятся в вырожденном состоянии. В этом случае различные типы носителей (допустим, два сорта дырок с массами m_1 и m_2) будут иметь различные углы поворота, хотя бы из-за различия эффективных масс.

Теперь перейдем к количественному рассмотрению эффекта магнитного сопротивления. Согласно (13.26) магнитное сопротивление полупроводников с одним типом носителей тока имеет вид

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho(H) - \rho(0)}{\rho(0)} = \frac{\langle \tau/m \rangle}{D} \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1 + v^2} \right\rangle - 1, \quad (15.25)$$

где $\rho(0) = (ne^2 \langle \tau/m \rangle)^{-1}$ — сопротивление при $H = 0$, а D дается формулой (13.30).

Из (15.25) в соответствии с вышеприведенными качественными соображениями следует, что $\Delta\rho/\rho = 0$, если τ/m от энергии не зависит или же носители заряда сильно вырождены.

В слабом магнитном поле ($v \ll 1$) из (15.25) получим

$$\Delta\rho/\rho = (uH/c)^2 A_r, \quad (15.26)$$

где

$$A_r = b_r - a_r^2, \quad (15.27)$$

причем a_r дается формулой (15.3), u — дрейфовая подвижность (14.3), а

$$b_r = \langle (\tau/m)^3 \rangle / \langle \tau/m \rangle^3. \quad (15.28)$$

Выражение (15.26) можно представить в виде

$$\Delta\rho/\rho = b_r (uH/c)^2 - (u_H H/c)^2, \quad (15.26')$$

из которого следует, что магнитное сопротивление в слабом маг-

нитном поле в основном определяется разностью квадратов дрейфовой (14.3) и холловской (15.7) подвижностей.

В двухзонном приближении Кейна (3.26) величина b_r , согласно (14.14) и (14.15), выражается через двухпараметрические интегралы Ферми (4.29) следующим образом (см. табл. 6):

$$b_r(\eta, \beta) = (I_{3/2,0}^0)^2 I_{3r,6}^0 (I_{r+1,2}^0)^{-3}, \quad (15.29)$$

которая для параболической зоны ($\beta \rightarrow 0$), в силу (4.31), имеет вид

$$b_r(\eta) = F_{3r} (F_{3/2})^2 (F_{r+1})^{-3}. \quad (15.30)$$

В случае невырожденных полупроводников (15.30), согласно (4.38), переходит в известную формулу

$$b_r = (9\pi/16) \Gamma(3r+1) / \Gamma^3(r+2), \quad (15.31)$$

которая для различных механизмов рассеяния дает: при $r=0$

$$b_0 = \frac{9\pi}{16} = 1,77; \text{ при } r=1 \quad b_1 = 27\pi/64 = 1,32; \text{ при } r=2 \quad b_2 = 15\pi/8 = 5,89.$$

Тогда множитель A_r в формуле (15.26) для невырожденных полупроводников с параболической зоной будет иметь следующие числовые значения: рассеяние на акустических фононах ($r=0$) $A_0 \approx 0,38$; рассеяние на полярных оптических фононах ($r=1$) $A_1 \approx 0,11$; рассеяние на ионах примеси ($r=2$) $A_2 \approx 2,17$.

В случае полного вырождения $A_r = 0$. В первом исчезающем приближении по вырождению, если использовать асимптотику выражений (15.5) и (15.30), то для A_r получим

$$A_r = \pi^2/3 (k_0 T / \xi)^2 (r - 1/2)^2. \quad (15.31')$$

В сильном магнитном поле ($\nu \gg 1$) из (15.25) и (13.30) получаем простое выражение

$$(\Delta\rho/\rho)_\infty = c_r - 1, \quad (15.32)$$

где

$$c_r = \langle \tau/m \rangle \langle \dot{m}/\tau \rangle. \quad (15.33)$$

Из (15.32) видно, что в сильном магнитном поле сопротивление насыщается, $\rho_\infty(H) = c_r \rho(0)$, причем коэффициент c_r для известных моделей зоны принимает вид:

для непараболической зоны (см. табл. 6)

$$c_r = I_{r+1,2}^0 I_{2-r,-2}^0 (I_{3/2,0}^0)^{-2}, \quad (15.34)$$

для параболической зоны

$$c_r = F_{r+1} F_{2-r} (F_{3/2})^{-2}. \quad (15.35)$$

В случае классической статистики из (15.35), согласно (4.38), имеем

$$c_r = (16/9\pi) \Gamma(r+2) \Gamma(3-r), \quad (15.36)$$

числовое значение которого для различных механизмов рассея-

ния есть $c_0 = c_1 = 32/9\pi = 1,13$; $c_2 = 32/3\pi = 3,39$. Из этих значений и (15.32) следует, что существенное изменение сопротивления имеет место при рассеянии на ионах примеси.

Рассмотрим магнитное сопротивление полупроводников с двумя типами носителей заряда. Согласно (13.14) и (13.31) сопротивление в магнитном поле при наличии двух типов носителей имеет вид

$$\rho(H) = \frac{\sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{11}^{(2)}}{(\sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{11}^{(2)})^2 + (\sigma_{12}^{(1)} + \sigma_{12}^{(2)})^2}. \quad (15.37)$$

Подставляя (15.10) в (15.37), получим

$$\rho(H) = \frac{1}{D_0} [(\sigma_1 + \sigma_2) + H^2 \sigma_1 \sigma_2 (\bar{\sigma}_1 R_1^2 + \sigma_2 R_2^2)], \quad (15.38)$$

где D_0 определяется формулой (15.12). Тогда

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \left\{ \frac{(\sigma_1 + \sigma_2)}{D_0} [(\sigma_1 + \sigma_2) + H^2 \sigma_1 \sigma_2 (\sigma_1 R_1^2 + \sigma_2 R_2^2)] - 1 \right\}. \quad (15.39)$$

Здесь σ_1 , σ_2 и R_1 , R_2 — значения проводимости и постоянной Холла, определяемые только одним типом носителей тока в произвольном магнитном поле, т. е. эти величины в общем случае являются функциями магнитного поля H .

Эту общую формулу применим к частным случаям, когда оба типа носителей сильно вырождены или же в отдельности, для каждого типа носителей, отношение τ/m от энергии не зависит. В этих случаях, как видно из (13.26) и (13.27), в произвольном магнитном поле $\sigma_1 = en_1 u_1$, $\sigma_2 = en_2 u_2$, а также $R_1 = (en_1)^{-1}$, $R_2 = (en_2)^{-1}$. Тогда из (15.39) для магнитного сопротивления получим выражение

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{H^2}{c^2} \frac{n_1 n_2 u_1 u_2 (u_1 + u_2)^2}{(n_1 u_1 + n_2 u_2)^2 + \frac{H^2}{c^2} u_1^2 u_2^2 (n_1 + n_2)^2}, \quad (15.40)$$

где n_1 , n_2 и u_1 , u_2 — концентрации и подвижности разных типов носителей заряда.

Из (15.40) видно, что если имеется два типа носителей заряда ($n_1 \neq 0$, $n_2 \neq 0$), то магнетосопротивление отлично от нуля и в нулевом приближении по вырождению, и тогда, когда для каждого типа носителей τ/m от энергии не зависит. Это связано, в соответствии с качественным объяснением, приведенным в начале пункта, с тем, что в проводнике имеются две группы носителей с различными углами поворота: $\varphi_1 = (eH/c)(\tau_1/m_1)$ и $\varphi_2 = (eH/c)(\tau_2/m_2)$. Поле Холла eE_y может компенсировать некоторое среднее отклонение носителей, отличное от φ_1 и φ_2 , поэтому обе группы носителей дают вклад в магнетосопротивление. При $n_1 = 0$ или $n_2 = 0$ из (15.40) следует, что $\Delta\rho/\rho = 0$, т. е. магнитное сопротивление отлично от нуля только в следующем приближении по вырождению.

Формула (15.40) справедлива в произвольном магнитном поле. В слабом поле ($Hu_{1,2}/c \ll 1$) из (15.40) получим

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \left(\frac{H}{c}\right)^2 n_1 n_2 u_1 u_2 \left(\frac{u_1 + u_2}{n_1 u_1 + n_2 u_2}\right)^2. \quad (15.41)$$

В сильном магнитном поле ($Hu_{1,2}/c \gg 1$) формула (15.40) дает насыщенное значение магнетосопротивления

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_{\infty} = \frac{n_1 n_2}{u_1 u_2} \left(\frac{u_1 + u_2}{n_1 + n_2}\right)^2. \quad (15.42)$$

Формула (15.40) применима в случае, когда имеется два типа носителей заряда одного знака и оба они вырождены. В случае полуметаллов, хотя оба типа носителей вырождены, но они разного знака (рис. 11): $R_1 = -R_2$, и поэтому D_0 в (15.39), согласно (15.12), равен $D_0 = (\sigma_1 + \sigma_2)^2$. Следовательно, из (15.39) видно, что магнетосопротивление полуметаллов ($n_1 = n_2$) в произвольном магнитном поле имеет простой вид

$$\Delta\rho/\rho = u_n u_p (H/c)^2, \quad (15.43)$$

где u_n и u_p — подвижности электронов и дырок в полуметалле. Из (15.43) следует, что магнетосопротивление не насыщается и в области сильных магнитных полей в полуметаллах оно может достичь больших значений.

В полуметаллах ($n = p$), где электроны и дырки вырождены, $R_1 = -R_2$, из (15.11) для коэффициента Холла легко получим выражение

$$R = (1/nec) (u_p - u_n) / (u_p + u_n), \quad (15.44)$$

которое справедливо в произвольном магнитном поле.

Из последних двух формул видно, что, измеряя $\Delta\rho/\rho$ и R в произвольном магнитном поле, а также проводимость $\sigma = en(u_n + u_p)$ полуметалла, можно определить концентрацию электронов и дырок $n = p$, произведение $u_n \cdot u_p$ и разность $u_p - u_n = Rcs$, т. е. найти u_n и u_p в отдельности.

В заключение приведем выражения для магнетосопротивления в полупроводниках со смешанной проводимостью в слабом и сильном магнитных полях. Для получения этих выражений удобно исходить из (15.37). Здесь приведем результаты только для полупроводников, в которых электроны проводимости и дырки невырождены.

В слабых магнитных полях ($u_{n,p} H/c \ll 1$)

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{H^2}{c^2} \frac{b_r}{\sigma_n + \sigma_p} \left[(\sigma_n u_n^2 + \sigma_p u_p^2) - \frac{a_r^2}{b_r} \frac{(\sigma_n u_n - \sigma_p u_p)}{\sigma_n + \sigma_p} \right], \quad (15.45)$$

где a_r и b_r даются (15.6) и (15.31) соответственно.

В области сильных полей в примесных полупроводниках ($n \neq p$)

$$\rho_{\infty}(H) = c_r \frac{nu_p + pu_n}{eu_n u_p (n - p)^2}, \quad (15.46)$$

а в собственных полупроводниках, т. е. при $n = p$,

$$\rho_{\infty}(H) = \frac{1}{c_r} \left(\frac{H}{c} \right)^2 \frac{u_n u_p}{en (u_n + u_p)}, \quad (15.46')$$

где c_r имеет вид (15.36).

Видно, что в области смешанной проводимости сопротивление с ростом магнитного поля насыщается только в примесных полупроводниках ($n \neq p$), тогда как в собственных полупроводниках ($n = p$) сопротивление $\rho_{\infty}(H) \sim H^2$.

3. Поперечный эффект Нернста — Эттингсгаузена. Этот эффект является аналогом эффекта Холла и заключается в следующем: если вдоль проводника имеется градиент температуры $\nabla_x T$ (но отсутствуют токи) и он помещен в магнитное поле H_z , перпендикулярное градиенту температуры $\nabla_x T$, то возникает электрическое поле E_y . Очевидно, поле E_y будет пропорционально H_z и $\nabla_x T$:

$$E_y = -QH_z \nabla_x T, \quad (15.47)$$

где Q носит название коэффициента Нернста — Эттингсгаузена.

Опыт показывает, что величина этого эффекта для различных проводников различается на порядок: в металлах и в вырожденных полупроводниках эффект ничтожен, а в невырожденных полупроводниках имеет большое значение. Кроме того, в одних веществах эффект имеет положительный знак, в других — отрицательный; знак эффекта меняется в одном и том же образце в зависимости от температуры.

Качественно поясним возникновение эффекта и вышеуказанные закономерности. Для определенности рассмотрим полупроводник n -типа, вдоль которого поддерживается постоянный градиент температуры $\nabla_x T$, помещенный в магнитное поле H_z . Средняя тепловая скорость электронов $v_{2x}(0)$, движущихся от горячего конца образца, больше, чем средняя скорость электронов $v_{1x}(0)$, движущихся в обратном направлении. Эти две группы электронов магнитным полем будут отклоняться в противоположные стороны вдоль оси Oy на углы φ_2 и φ_1 (15.24) соответственно. Если углы отклонения «быстрых» и «медленных» электронов неодинаковы, то по оси Oy возникнет ток*):

$$j_y \sim (\varphi_2 - \varphi_1) \sim (\tau(v_2) - \tau(v_1)). \quad (15.48)$$

В стационарном состоянии (когда $j_y = 0$) в образце устано-

* Здесь предполагается, что эффективная масса носителей от энергии (скорости) не зависит.

вится определенное поперечное поле E_y — эффект Нернста — Эттингсгаузена.

Из (15.48) видно, что направление поперечного тока j_y , и следовательно знак поля Нернста — Эттингсгаузена E_y , определяется разностью времен релаксации «быстрых» $\tau(v_2)$ и «медленных» $\tau(v_1)$ электронов. Если с ростом энергии (скорости) время релаксации уменьшается, как это имеет место в случае рассеяния на акустических фононах, то $\tau(v_1) > \tau(v_2)$ и E_y будет иметь один знак, а если с ростом энергии τ растет (рассеяние на ионах примеси и на оптических фононах), то $\tau(v_1) < \tau(v_2)$ и E_y будет иметь противоположный знак.

Таким образом, знак поперечного эффекта Нернста — Эттингсгаузена определяется характером зависимости τ от энергии носителей заряда. Поэтому экспериментальное определение только знака этого эффекта дает качественное представление о механизме рассеяния в данном проводнике. С изменением температуры природа доминирующего механизма рассеяния меняется и, следовательно, должен меняться и знак эффекта. Это обстоятельство широко используется на практике.

Из вышеприведенного качественного объяснения возникновения эффекта следует, что величина его должна определяться распределением носителей заряда по скоростям, и поэтому он должен быть мал в вырожденных полупроводниках и металлах, где распределение по энергиям имеет почти прямоугольный вид, по сравнению со значением в невырожденных полупроводниках. Это подтверждается количественной теорией и наблюдается на эксперименте.

Отметим, что, в отличие от эффекта Холла, знак поперечного эффекта Нернста — Эттингсгаузена не зависит от знака заряда носителей и вклады электронов и дырок в полупроводниках со смешанной проводимостью складываются. Действительно, под действием температурного градиента движение электронов проводимости и дырок изменяется одинаково: оба типа носителей диффундируют от горячего конца образца к холодному. Магнитное же поле отклоняет отрицательные и положительные заряды в противоположные стороны, и, следовательно, поперечное поле E_y для обоих носителей будет одинакового направления. Знак эффекта, как отметили выше, определяется механизмом рассеяния.

Перейдем к количественному рассмотрению эффекта. Коэффициент Нернста — Эттингсгаузена в полупроводниках с одним типом носителей дается общей формулой (13.28), из которой видно, что $Q = 0$, если носители полностью вырождены или τ/m не зависит от энергии.

В слабом магнитном поле ($v \ll 1$) из общей формулы (13.28) для коэффициента Нернста — Эттингсгаузена получим выражение

$$Q_0 = (k_0/e) (u/c) \lambda_1 a_T, \quad (15.49)$$

где u — дрейфовая подвижность (14.3), a_T дается формулой

(15.3), а

$$\lambda_1 = \frac{\langle x(\tau/m)^2 \rangle}{\langle (\tau/m)^2 \rangle} - \frac{\langle x\tau/m \rangle}{\langle \tau/m \rangle}. \quad (15.50)$$

Согласно (15.7) и (15.49)

$$Q_0 = (k_0/e) (u_H/c) \lambda_1, \quad (15.49')$$

где u_H — холловская подвижность (15.7).

В непараболической зоне для двухзонного приближения Кейна (3.26) λ_1 , согласно (14.14) и (14.15), выражается через двухпараметрические интегралы Ферми (4.29) следующим образом (см. табл. 6):

$$\lambda_1(\eta, \beta) = I_{2r+1/2,4}^1 (I_{2r+1/2,4}^0)^{-1} - I_{r+1,2}^1 (I_{r+1,2}^0)^{-1}, \quad (15.51)$$

который для параболической зоны ($\beta \rightarrow 0$), в силу (4.31), имеет вид

$$\lambda_1(\eta) = F_{2r+3/2} (F_{2r+1/2})^{-1} - F_{r+2} (F_{r+1})^{-1}. \quad (15.52)$$

В случае невырожденных полупроводников ($\eta \rightarrow -\infty$), согласно (4.38), (15.52) переходит в простую формулу

$$\lambda_1 = r - 1/2. \quad (15.53)$$

В нулевом приближении по вырождению $a_r = 1$, но $\lambda_1 = 0$, а в первом исчезающем приближении для любой сферически-симметричной зоны

$$\lambda_1 = (r - 1/2) (\pi^2/3) (k_0 T/\zeta). \quad (15.54)$$

Из последних двух формул и (15.49) следует, что в вырожденных образцах Q_0 в $k_0 T/\zeta$ раз меньше, чем в невырожденных образцах, так как в обоих случаях a_r одного порядка ($a_r \approx 1$). Кроме того, видно, что знак Q_0 определяется параметром рассеяния r : при $r = 0$ (рассеяние на акустических фононах) и $r = 1; 2$ (рассеяние на ионах примеси и на оптических фононах) знаки Q_0 противоположны. Измеряя Q_0 и холловскую подвижность u_H , согласно (15.49'), можно определить λ_1 и, следовательно, оценить параметр рассеяния r .

В сильных магнитных полях ($\nu \gg 1$) из (13.28) следует*)

$$Q_\infty = \frac{k_0}{e} \frac{1}{H} \left(\frac{c}{u_H} \right) \lambda_\infty c_r, \quad (15.55)$$

где u — подвижность (14.3), c_r дается формулой (15.33), а

$$\lambda_\infty = \langle x \rangle - \langle x\tau/\tau \rangle / \langle m/\tau \rangle. \quad (15.56)$$

*) Легко видеть, что в сильном магнитном поле Q_∞ в $(u_H/c)^2 \gg 1$ раз меньше, чем Q_0 . В случае сильного вырождения действительно $Q_\infty = (u_H/c)^{-2} Q_0$. В более общем случае это равенство выполняется приблизительно.

Для двухзонной модели Кейна (3.26) из (15.56) получим выражение (см. табл. 6)

$$\lambda_{\infty}(\eta, \beta) = I_{3/2,0}^1 (I_{3/2,0}^0)^{-1} - I_{2-r,-2}^1 (I_{2-r,-2}^0)^{-1}, \quad (15.57)$$

которое для параболической зоны ($\beta \rightarrow 0$), в силу (4.31), имеет вид

$$\lambda_{\infty}(\eta) = F_{3/2}(F_{3/2})^{-1} - F_{2-r}(F_{2-r})^{-1}. \quad (15.58)$$

В случае невырожденных и сильно вырожденных полупроводников $\lambda_{\infty} = \lambda_1$, т. е. λ_{∞} имеет вид (15.53) и (15.54) соответственно.

Рассмотрим полупроводник с двумя типами носителей заряда. В этом случае (13.16) нужно переписать в виде

$$Q = \frac{1}{H} \frac{(\sigma_{12}^{(1)} + \sigma_{12}^{(2)}) (\beta_{11}^{(1)} + \beta_{11}^{(2)}) - (\sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{11}^{(2)}) (\beta_{12}^{(1)} + \beta_{12}^{(2)})}{(\sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{11}^{(2)})^2 + (\sigma_{12}^{(1)} + \sigma_{12}^{(2)})^2}. \quad (15.59)$$

Используя (15.10) и аналогичные выражения $\beta_{11}^{(1)}$, $\beta_{11}^{(2)}$, $\beta_{12}^{(1)}$ и $\beta_{12}^{(2)}$, найденные из (13.16) и (13.17), в (15.59) Q выразим через парциальные величины R , σ , α и Q . Когда в проводимости участвуют два типа носителей заряда,

$$Q = \frac{1}{D_0} \{ Q_1 [\sigma_1 (\sigma_1 + \sigma_2) + \sigma_1^2 \sigma_2^2 R_2 (R_1 + R_2) H^2] + Q_2 [\sigma_2 (\sigma_1 + \sigma_2) + \sigma_1^2 \sigma_2^2 R_1 (R_1 + R_2) H^2] + \sigma_1 \sigma_2 (\alpha_1 - \alpha_2) (R_1 \sigma_1 - R_2 \sigma_2) \}, \quad (15.60)$$

где D_0 дается формулой (15.12).

Формулы (15.59) и (15.60) можно применить к любому полупроводнику с двумя типами носителей тока при любом магнитном поле и при любой степени вырождения. Здесь приведем только результаты для полупроводников со смешанной проводимостью, когда оба типа носителей невырождены.

В слабом магнитном поле

$$Q_0 = \frac{k_0}{ec} \frac{a_r}{(\sigma_n + \sigma_p)^2} \left[\left(r - \frac{1}{2} \right) (\sigma_n^2 u_n + \sigma_p^2 u_p) + \sigma_n \sigma_p (u_p + u_n) (3r + 7/2 + \varepsilon_g/k_0 T) \right]. \quad (15.61)$$

В сильном магнитном поле при $n \neq p$

$$Q_{\infty} = \frac{k_0}{e} \frac{c}{H^2} \frac{c_r}{(n-p)^2} \frac{1}{u_n u_p} \left[\left(r - \frac{1}{2} \right) (n^2 u_p + p^2 u_n) + n p (u_n + u_p) (11/2 - r + \varepsilon_g/k_0 T) \right], \quad (15.62)$$

а при $n = p$

$$Q_{\infty} = \frac{1}{c_r} \frac{k_0}{ec} \frac{u_n u_p}{u_n + u_p} \left(5 + \frac{\varepsilon_g}{k_0 T} \right), \quad (15.63)$$

где c_r дается формулой (15.36).

Видно, что при $n = p$ в сильном магнитном поле Q_{∞} насыщается и может достигь довольно больших значений.

4. Изменение термо-э. д. с. в поперечном магнитном поле.
Внесение проводника с градиентом температуры $\nabla_x T$ в магнитное поле H_z приводит не только к возникновению поперечного поля E_y , но и к изменению термо-э. д. с. на величину $\Delta\alpha = \alpha(H) - \alpha(0)$. Знак $\Delta\alpha$ для электронных и дырочных полупроводников противоположен; кроме того, для полупроводника с одним сортом носителей заряда в зависимости от области температур $\Delta\alpha$ может иметь разные знаки. Последнее связано с тем, что в разных температурных областях доминируют различные механизмы рассеяния. Поясним это качественно.

Рассмотрим электронный полупроводник. Термо-э. д. с. в отсутствие магнитного поля определяется разностью компонент скоростей «быстрых» и «медленных» электронов $[v_{2x}(0) - v_{1x}(0)]$ вдоль градиента температуры. В магнитном поле эти компоненты изменяются, причем эти изменения зависят от угла поворота φ (15.24), т. е. от времени свободного пробега τ . Так, например, если τ для «медленных» электронов больше, чем для «быстрых», то $v_{1x}(H)/v_{1x}(0) < v_{2x}(H)/v_{2x}(0)$ и $\alpha(H)$, определяемая разностью $[v_{2x}(H) - v_{1x}(H)]$, будет больше, чем $\alpha(0)$. Наоборот, если τ увеличивается с ростом энергии (скорости) электрона, то $v_{1x}(H)/v_{1x}(0) > v_{2x}(H)/v_{2x}(0)$ и, следовательно, $\alpha(H) < \alpha(0)$ — термо-э. д. с. в магнитном поле уменьшается.

Таким образом, в полупроводниках термо-э. д. с. по величине увеличивается, если τ уменьшается с ростом энергии носителей заряда (рассеяние на акустических фононах), и уменьшается, если τ увеличивается с ростом энергии носителей заряда (рассеяние на оптических фононах и на ионизованных атомах примеси).

Термо-э. д. с. электронного полупроводника со сферически-симметричной зоной в произвольном магнитном поле выражается общей формулой (13.29), из которой видно, что $\alpha(H) = \alpha(0)$, т. е. термо-э. д. с. магнитным полем не изменяется, если носители полностью вырождены или τ/m от энергии не зависит.

В слабом магнитном поле ($v \ll 1$) из общей формулы (13.29) для термо-э. д. с. получим выражение

$$\alpha(H) = \alpha(0) + (k_0/e) (uH/c)^2 B_r, \quad (15.64)$$

где

$$B_r = \lambda_2 b_r - \lambda_1 a_r^2, \quad (15.65)$$

a_r , b_r и λ_1 даются формулами (15.3), (15.28) и (15.50) соответственно, а λ_2 имеет вид

$$\lambda_2 = \frac{\langle x(\tau/m)^3 \rangle}{\langle (\tau/m)^3 \rangle} - \frac{\langle x\tau/m \rangle}{\langle \tau/m \rangle}. \quad (15.66)$$

В двухзонном приближении Кейна (3.26) для непараболической зоны (15.66) через двухпараметрические интегралы

выражается следующим образом (см. табл. 6):

$$\lambda_2(\eta, \beta) = I_{3r,6}^1 (I_{3r,6}^0)^{-1} - I_{r+1,2}^1 (I_{r+1,2}^0)^{-1}, \quad (15.67)$$

который для параболической зоны ($\beta \rightarrow 0$), в силу (4.31), принимает вид

$$\lambda_2(\eta) = F_{3r+1} (F_{3r})^{-1} - F_{r+2} (F_{r+1})^{-1}. \quad (15.68)$$

Для невырожденных полупроводников с параболической зоной, согласно (4.38), из формулы (15.68) следует, что $\lambda_2 = 2\lambda_1 = 2r - 1$, и поэтому

$$B_r = (r - 1/2) (2b_r - a_r^2). \quad (15.69)$$

Для металлов и сильно вырожденных полупроводников из (15.65) легко показать, что в первом исчезающем приближении по вырождению $\lambda_2 = 2\lambda_1$, где λ_1 есть (15.54). Поэтому коэффициент B_r в этом случае имеет вид

$$B_r = (r - 1/2) (\pi^2/3) (k_0 T / \xi). \quad (15.70)$$

Из сравнения (15.70) и (15.31) видно, что изменение термо-э. д. с. пропорционально первой степени малой величины параметра вырождения $k_0 T / \xi$, тогда как магнетосопротивление $\Delta\rho/\rho \sim (k_0 T / \xi)^2$.

В сильных магнитных полях ($\nu \gg 1$) из (13.29) для термо-э. д. с. непосредственно следует очень простая формула

$$\alpha_\infty = - (k_0/e) (\langle x \rangle - \eta), \quad (15.71)$$

для непараболической зоны (см. табл. 6)

$$\alpha_\infty = - (k_0/e) [I_{3/2,0}^1 (I_{3/2,0}^0)^{-1} - \eta], \quad (15.72)$$

а для параболической зоны

$$\alpha_\infty = - (k_0/e) [F_{5/2} (F_{3/2})^{-1} - \eta]. \quad (15.73)$$

В невырожденных полупроводниках

$$\alpha_\infty = - (k_0/e) (5/2 - \eta), \quad (15.74)$$

а в сильно вырожденных полупроводниках

$$\alpha_\infty = - (k_0/e) (\pi^2 k_0 T / 2\xi). \quad (15.75)$$

Важная особенность термо-э. д. с. в сильных магнитных полях заключается в том, что α_∞ насыщается и от механизма рассеяния не зависит. Поэтому, измеряя термо-э. д. с. в сильных поперечных магнитных полях, можно найти приведенный уровень химического потенциала η и, следовательно, при известной концентрации n на основе одной из формул (4.43), (4.44) или (4.46) можно определить эффективную массу электрона проводимости m_n . Этот метод широко используется на практике, так как он является более точным по сравнению с методом, основанным на измерении термо-э. д. с. без магнитного поля $\alpha(0)$.

В полупроводниках с двумя типами носителей заряда выражение (13.17) для термо-э. д. с. следует переписать в виде

$$\alpha(H) = \frac{(\sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{11}^{(2)})(\beta_{11}^{(1)} + \beta_{11}^{(2)}) + (\sigma_{12}^{(1)} + \sigma_{12}^{(2)})(\beta_{12}^{(1)} + \beta_{12}^{(2)})}{(\sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{11}^{(2)})^2 + (\sigma_{12}^{(1)} + \sigma_{12}^{(2)})^2}. \quad (15.76)$$

С помощью этой формулы $\alpha(H)$, так же как и (15.59), легко выразить через парциальные кинетические коэффициенты, определяемые только одним типом носителей тока. В результате имеем

$$\alpha(H) = \frac{1}{D_0} \{ Q_1 [\sigma_1(\sigma_1 + \sigma_2) + \sigma_1^2 \sigma_2^2 R_2 (R_1 + R_2) H^2] + \\ + Q_2 [\sigma_2(\sigma_1 + \sigma_2) + \sigma_1^2 \sigma_2^2 R_1 (R_1 + R_2) H^2] + \\ + \sigma_1 \sigma_2 (\alpha_1 - \alpha_2) (R_1 \sigma_1 - R_2 \sigma_2) \}, \quad (15.77)$$

где D_0 определен в (15.12).

Последняя формула справедлива в произвольном магнитном поле, из которой можно получить выражения для α в слабом и сильном магнитном полях. Из-за громоздкости выражения для $\alpha(H)$ в слабом поле приводить его здесь не будем. Оно приведено в книге [29].

Здесь приведем термо-э. д. с. только в сильных магнитных полях $\alpha_\infty(H)$ для полупроводников со смешанной проводимостью, в которых зона параболична, а электроны проводимости и дырки невырождены. В этом случае при $n \neq p$

$$\alpha_\infty(H) = -\frac{k_0}{e} \left(\frac{5}{2} \frac{n+p}{n-p} + \frac{e_g}{k_0 T} \frac{p}{n-p} - \frac{\zeta}{k_0 T} \right) \quad (15.78)$$

и при $n = p$

$$\alpha_\infty(H) = \alpha(0) + \frac{k_0}{e} \frac{u_p - u_n}{u_p + u_n} (d_r - 1) \left(5 + \frac{e_g}{k_0 T} \right), \quad (15.79)$$

где d_r определено (15.21), а $\alpha(0)$ дается формулой (14.49).

Из (15.78) видно, что термо-э. д. с. в сильных магнитных полях насыщается и не зависит от механизма рассеяния электронов и дырок в примесных полупроводниках ($n \neq p$), а в собственных ($n = p$) полупроводниках $\alpha_\infty(H)$ существенно зависит от механизма рассеяния.

5. Эффект Маджи — Риги — Ледюка — изменение электронной части теплопроводности в поперечном магнитном поле. В поперечном магнитном поле теплопроводность уменьшается из-за уменьшения эффективной длины свободного пробега носителей заряда вдоль градиента температуры вследствие закручивания их траекторий.

В случае полупроводника с одним типом носителей тока из общей формулы (13.18) для теплопроводности в произвольном

магнитном поле получим выражение

$$\begin{aligned} \kappa(H) = \kappa_{\Phi} + \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 T\sigma_0 \frac{1}{\langle \tau/m \rangle} & \left\{ \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{x^2}{1+v^2} \right\rangle - \right. \\ & - \frac{1}{D} \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{x}{1+v^2} \right\rangle \left(\left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1+v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{x}{1+v^2} \right\rangle + \right. \\ & + \left. \left. \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1+v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{xv}{1+v^2} \right\rangle \right) - \frac{1}{D} \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{xv}{1+v^2} \right\rangle \times \\ & \times \left. \left(\left\langle \frac{\tau}{m} \frac{x}{1+v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1+v^2} \right\rangle - \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1+v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{xv}{1+v^2} \right\rangle \right) \right\}, \end{aligned} \quad (15.80)$$

где σ_0 — электропроводность (14.2), D определяется (13.30).

Отметим, что электронная теплопроводность, как видно из (15.80), изменяется в магнитном поле и тогда, когда τ/m не зависит от энергии.

В слабом магнитном поле ($v \ll 1$) из (15.50) имеем

$$\kappa(H) = \kappa_{\Phi} + \kappa_0 - (k_0/e)^2 T\sigma_0 (uH/c)^2 L_2(\eta, \beta), \quad (15.81)$$

где κ_0 — электронная теплопроводность без магнитного поля (14.55). Явный вид $L_2(\eta, \beta)$ легко получить из (15.80), разлагая по степеням $v = (eH/c)(\tau/m) \ll 1$. Здесь его приводить не будем из-за громоздкости. Для параболической и непараболической зон явный вид $L_2(\eta, \beta)$ дан в книге [16].

Для сильно вырожденных полупроводников $L_2 = \pi^2/3$, а для невырожденных полупроводников с параболическим законом дисперсии

$$L_2 = (4r^2 - r + 2) b_r - (r - 1/2)^2 a_r^2. \quad (15.81')$$

В сильном магнитном поле ($v \gg 1$) из (15.80) для $\kappa(H)$ легко получить выражение

$$\kappa_{\infty}(H) = \kappa_{\Phi} + (k_0/e)^2 T\sigma_0 (c/uH)^2 \lambda'_2 c_r, \quad (15.82)$$

где c_r дается формулой (15.33), а

$$\lambda'_2 = \langle x \rangle^2 + \frac{\langle x^2 m / \tau \rangle}{\langle m / \tau \rangle} - 2 \frac{\langle x \rangle \langle xm / \tau \rangle}{\langle m / \tau \rangle}. \quad (15.83)$$

Используя табл. 6, можно найти явный вид λ'_2 для известных моделей зоны. В частности, если m/τ от энергии не зависит, $\lambda'_2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = I_{3/2,0}^2 (I_{3/2,0}^0)^{-1} - (I_{3/2,0}^1)^2 (I_{3/2,0}^0)^{-2}$. Легко показать, что в случае сильного вырождения для любой зависимости $\tau(\epsilon)/m(\epsilon)$ коэффициент $\lambda'_2 = \pi^2/3$, а $c_r = 1$.

Следует отметить одно практически важное обстоятельство. Как видно из (15.82), в сильном магнитном поле электронная часть теплопроводности $\sim (c/uH)^2 \ll 1$. Таким образом, если измерить теплопроводность в области сильных магнитных полей, то полученное значение почти будет совпадать с фоновой

частью теплопроводности $\kappa_{\infty}(H) \approx \kappa_{\phi}$. Определив таким путем κ_{ϕ} и измерив теплопроводность без магнитного поля $\kappa = \kappa_{\phi} + \kappa_0$, можно найти электронную часть теплопроводности κ_0 . Этим методом можно экспериментально найти фононную κ_{ϕ} и электронную κ_0 теплопроводности в отдельности в полупроводниках с одним типом носителей заряда [20—22].

В полупроводниках с двумя типами носителей заряда $\kappa(H)$ в произвольном магнитном поле можно выразить через парциальные коэффициенты κ , σ , α , R и Q [49]:

$$\begin{aligned} \kappa(H) = & \kappa_{\phi} + \kappa_1 + \kappa_2 + \\ & + T \frac{1}{D_0} \{ \sigma_1 \sigma_2 (\sigma_1 + \sigma_2) (\alpha_1 - \alpha_2)^2 - (Q_1 - Q_2) \sigma_1 \sigma_2 [(\sigma_1 + \sigma_2) (Q_1 - Q_2) + \\ & + 2\sigma_1 \sigma_2 (R_1 + R_2) (\alpha_1 - \alpha_2)] H^2 \}, \quad (15.84) \end{aligned}$$

где D_0 определено в (15.12).

Рассмотрим полупроводник со смешанной проводимостью. В слабом магнитном поле выражение теплопроводности очень громоздко, поэтому при H^2 оставим только члены, содержащие $(\varepsilon_g/k_0T)^2 \gg 1$:

$$\begin{aligned} \kappa(H) \approx & \kappa_{\phi} + \kappa_0 - \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 T \left(\frac{H}{c} \right)^2 \frac{\sigma_n \sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p} \left[(\sigma_n u_p^2 + \sigma_p u_n^2) b_r - \right. \\ & \left. - a_r^2 \frac{\sigma_n \sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p} (u_n + u_p)^2 \right] \left(\frac{\varepsilon_g}{k_0 T} \right)^2. \quad (15.85) \end{aligned}$$

В сильном магнитном поле при $n \neq p$ электронная часть теплопроводности $\sim H^{-2}$ и поэтому мала (см. (19.12) в книге [16]).

Для собственных полупроводников ($n = p$) в сильных магнитных полях теплопроводность насыщается и имеет вид

$$\kappa_{\infty}(H) = \kappa_{\phi} + \frac{n}{c_r} \frac{k_0^2 T}{e} \frac{u_n u_p}{u_n + u_p} \left(5 + \frac{\varepsilon_g}{k_0 T} \right)^2, \quad (15.86)$$

где c_r определено в (15.36).

6. Эффект Риги — Ледюка — возникновение поперечного градиента температуры $\nabla_y T$ при наличии продольного градиента температуры $\nabla_x T$ и перпендикулярного ему магнитного поля H_z , когда отсутствуют токи ($j_x = j_y = 0$) и поперечный поток энергии $w_y = 0$. Естественно, что возникший градиент температуры должен быть пропорционален $\nabla_x T$ и магнитному полю:

$$\nabla_y T = -S H_z \nabla_x T, \quad (15.87)$$

где S — коэффициент Риги — Ледюка.

Механизм возникновения эффекта Риги — Ледюка можно объяснить следующим образом. Если на концах образца полупроводника n -типа поддерживаются различные температуры и он помещен в магнитное поле, перпендикулярное направлению градиента температуры, то электроны, движущиеся от горячего конца к холодному, будут отклоняться в одну сторону, а элект-

роны, движущиеся от холодного конца, — в другую, следовательно, одна грань образца, будет нагреваться, а противоположная — охлаждаться. При отсутствии потока энергии ($w_y = 0$) установится определенный поперечный градиент температуры. Это и есть эффект Риги — Ледюка. Очевидно, направление возникшего поперечного градиента температуры, т. е. знак коэффициента S , будет зависеть от знака заряда носителей. Для n - и p -типа полупроводников S должен иметь разные знаки, и поэтому в области смешанной проводимости эффект должен быть мал. Кроме того, из качественного объяснения следует, что эффект будет отличен от нуля и тогда, когда отклонения $\varphi = (eH/c)(\tau/m)$ «горячих» и «холодных» потоков одинаковы, т. е. τ/m не зависит от энергии носителей. Этим отличается данный эффект от магнетосопротивления, магнетотермо-э. д. с. $\Delta\alpha$ и эффект Нернста — Эттинггаузена.

Все эти качественные выводы подтверждаются теоретическими расчетами. Общую формулу (13.19) для S применим к полупроводникам n -типа в слабых и сильных магнитных полях.

В области слабых магнитных полей ($v \ll 1$) из (13.19) для электронных полупроводников получим выражение

$$S_0 = \frac{\sigma_0}{\kappa_\phi + \kappa_0} \frac{u}{c} \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 T \lambda_3 a_r, \quad (15.88)$$

где $\sigma_0 = en\mu$, u — подвижность (14.3), a_r определено (15.3), а

$$\lambda_3 = \frac{\langle x\tau/m \rangle^2}{\langle \tau/m \rangle^2} - 2 \frac{\langle x(\tau/m)^2 \rangle \langle x\tau/m \rangle}{\langle (\tau/m)^2 \rangle \langle \tau/m \rangle} + \frac{\langle x^2(\tau/m)^2 \rangle}{\langle (\tau/m)^2 \rangle}. \quad (15.89)$$

Используя табл. 6, легко можно найти явный вид λ_3 для различных моделей зоны. Для вырожденных полупроводников, в силу (4.25), в исчезающем приближении по вырождению (15.89) дает $\lambda_3 = \pi^2/3$.

Из последних двух формул следует, что S отличен от нуля и тогда, когда τ/m от энергии не зависит. Действительно, в этом случае $a_r = 1$; $\lambda_3 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \neq 0$ (см. табл. 6).

В сильных магнитных полях ($v \gg 1$) (13.19) для S дает простую формулу

$$S_\infty = (enc/H^2 \kappa_\phi) (k_0/e)^2 T (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2). \quad (15.90)$$

Видно, что в сильных магнитных полях коэффициент Риги — Ледюка в полупроводниках с одним типом носителей заряда не зависит от механизма рассеяния, а определяется только фононной теплопроводностью. Поэтому, зная концентрацию n и измеряя S_∞ в сильном магнитном поле, из (15.90) непосредственно можно найти фононную теплопроводность κ_ϕ . Это есть один из прямых методов выделения фононной доли теплопроводности в полупроводниках с большой подвижностью носителей заряда, в которых легко выполняется условие $v \gg 1$, т. е. $uH/c \gg 1$.

Для невырожденных полупроводников с параболической зоной, согласно табл. 6, (15.90) имеет особенно простой вид

$$S_{\infty} = \frac{5}{2} \frac{1}{\kappa_{\Phi}} \frac{enc}{H^2} \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 T. \quad (15.90')$$

В общем случае непараболической зоны и любой степени вырождения в (15.90) надо подставить значения $\langle x^2 \rangle$ и $\langle x \rangle$ из табл. 6.

В полупроводниках с двумя типами носителей заряда S в произвольном магнитном поле можно выразить через парциальные коэффициенты [28]:

$$S = S_1 + S_2 + \frac{T}{\kappa(H)} \frac{1}{D_0} \{ 2\sigma_1\sigma_2(\sigma_1 + \sigma_2)(\alpha_1 - \alpha_2)(Q_1 - Q_2) + \sigma_1^2\sigma_2^2(R_1 + R_2)[(\alpha_1 - \alpha_2)^2 - (Q_1 - Q_2)^2 H^2] \}, \quad (15.91)$$

где $\kappa(H)$ — теплопроводность (15.84), а D_0 дается формулой (15.12).

Явный вид S для полупроводников в области смешанной проводимости в слабом и сильном магнитном полях приведен в § 18 и 19 в книге [16].

7. Эффект Эттингсгаузена — возникновение поперечного градиента температуры $\nabla_y T$ в проводнике, с током j_x , помещенном в магнитном поле H_z при отсутствии поперечных токов $j_y = 0$ и $w_y = 0$. Очевидно, эффект должен быть пропорционален току и магнитному полю:

$$\nabla_y T = -PH_z j_x, \quad (15.92)$$

где P — коэффициент Эттингсгаузена.

Возникновение этого эффекта можно объяснить следующим образом. Известно, что при наличии тока и перпендикулярного ему магнитного поля на носители тока действуют две силы: сила Лоренца evH/c и сила Холла eE_y . Эти силы направлены противоположно и в стационарном состоянии в среднем компенсируют друг друга, другими словами, поле Холла выпрямляет траектории носителей, имеющих среднее отклонение магнитным полем $\bar{\varphi} = (eH/c)(\tau(v)/m(\bar{v}))$. Следовательно, носители с отклонениями $\varphi > \bar{\varphi}$ и $\varphi < \bar{\varphi}$ будут двигаться в противоположные стороны вдоль оси Oy , т. е. носители со скоростью $v > \bar{v}$ и $v < \bar{v}$ будут отклоняться к противоположным граням образца и тем самым возникнет градиент температуры $\nabla_y T$. Ясно, что эффект будет иметь место только тогда, когда τ/m зависит от скорости, а знак эффекта (направление градиента $\nabla_y T$) будет определяться тем, как τ/m зависит от скорости (энергии) и не будет зависеть от знака заряда носителей. В зависимости от того, что τ/m растет или уменьшается с ростом энергии (скорости), знак эффекта должен быть разным.

Коэффициент Эттингсгаузена P в общем случае, как видно из (13.20), определяется отношением Q к теплопроводности

$\kappa(H)$. Поэтому формулы из пп. 3 и 5 настоящего параграфа в сочетании с (13.20) дают возможность найти явный вид P для разных случаев. В частности, в слабых магнитных полях из (15.49'), (15.81) и (13.20) для P получим выражение

$$P = \frac{k_0 T}{e} \frac{u_H}{c} \frac{\lambda_1}{\kappa_\Phi + \kappa_0}, \quad (15.93)$$

которое в невырожденных полупроводниках, согласно (15.53), примет вид

$$P = \frac{k_0 T}{e} \frac{u_H}{c} \frac{(r - 1/2)}{\kappa_\Phi + \kappa_0}, \quad (15.94)$$

где u_H — холловская подвижность (15.7).

Из (15.94) следуют все сделанные выше качественные выводы: при $r = 1/2$ (τ не зависит от энергии) $P = 0$; при $r = 0$ и $r = 1$ и 2 знак P противоположен.

Отметим, что выражение для коэффициента Нернста B (7.15) можно определить с помощью формулы (13.20), а кинетические коэффициенты в *адиабатических условиях* можно найти, если использовать соответствующие соотношения, приведенные в § 7.

8. Смешанный механизм рассеяния. В § 14 и в предыдущих пунктах настоящего параграфа мы показали, что кинетические эффекты выражаются через известные интегралы Ферми только в том случае, когда действует один механизм рассеяния с соответствующим временем релаксации вида (12.1) или (12.4). Однако имеются ситуации, в которых одновременно действуют два или несколько механизмов рассеяния, т. е. имеет место смешанный механизм. Так, например, релаксация по импульсу носителей тока может определяться одновременным действием механизмов рассеяния на ионах примеси и на акустических фононах или на оптических фононах.

Определим эффективное время релаксации, когда действует несколько механизмов рассеяния. Пусть $W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, $W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, ... обозначают вероятности перехода электрона из состояния \mathbf{k} в \mathbf{k}' благодаря действию отдельных механизмов. Если эти процессы рассеяния альтернативны, т. е. может произойти либо один из них, либо другой, то полная вероятность рассеяния

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_i W_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (15.95)$$

Поскольку мы предполагаем, что эти механизмы носят упругий характер, то, подставляя (15.95) в (9.23), можно вычислить обратное эффективное время релаксации

$$\tau_{\text{эф}}^{-1} = \sum_i \tau_i^{-1}, \quad (15.96)$$

где

$$1/\tau_i = \sum_{\mathbf{k}'} W_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \mathbf{k}\mathbf{k}'/k^2) \quad (15.97)$$

— обратное время релаксации, соответствующее отдельному ме-

ханизму рассеяния. Явный вид τ_i для конкретных механизмов приведем в §§ 10—12.

Все формулы кинетических коэффициентов, приведенные в § 14 и в настоящем параграфе, справедливы и при наличии смешанного механизма рассеяния, только в них под знаком усреднения $\langle \dots \rangle$ следует заменить τ на $\tau_{\text{эф}}$ (15.96). При такой замене среднее типа $\langle \tau_{\text{эф}}/m \rangle$ (13.21) не сводится к известным интегралам, даже если отдельные τ_i имеют вид степенной функции (12.1). Поэтому в случае смешанного механизма среднее значение типа $\langle \tau_{\text{эф}}/m \rangle$ (см. табл. 6) нужно вычислить численным интегрированием.

Рассмотрим простой случай, когда действуют два механизма с временами релаксации τ_1 и τ_2 . Тогда, согласно (15.96), эффективное время релаксации

$$\tau_{\text{эф}} = \tau_1 \tau_2 / (\tau_1 + \tau_2). \quad (15.98)$$

В простейшем случае параболической зоны, когда τ_1 и τ_2 имеют вид (12.1) с параметрами рассеяния r_1 и r_2 из (15.98), в силу (14.3), получим

$$\tau_{\text{эф}} = \frac{m_n}{e} u_1 \frac{F_{3/2}}{F_{r_1+1}} \frac{x^{r_2-1/2}}{x^{r_2-r_1} + u_0^2}, \quad u_0^2 = \frac{u_1}{u_2} \frac{F_{r_2+1}}{F_{r_1+1}}, \quad (15.99)$$

где u_1 и u_2 — подвижности, определяемые только одним механизмом рассеяния.

Тогда электропроводность при смешанном механизме

$$\sigma_{\text{эф}} = en u_{\text{эф}}, \quad u_{\text{эф}} = u_1 \frac{F_{3/2}}{F_{r_1+1}} \left\langle \frac{x^{r_2-1/2}}{u_0^2 + x^{r_2-r_1}} \right\rangle. \quad (15.100)$$

В случае, когда действуют механизмы рассеяния на акустических фононах ($u_1 = u_2$; $r_1 = 0$) и на ионах примеси ($u_2 = u_{\text{пр}}$; $r_2 = 2$),

$$u_{\text{эф}} = u_l \frac{F_{3/2}(\eta)}{F_1(\eta)} \left\langle \frac{x^{3/2}}{u_0^2 + x^2} \right\rangle, \quad u_0^2 = \frac{u_l}{u_{\text{пр}}} \frac{F_3}{F_1}. \quad (15.101)$$

Для этого простого случая различные кинетические эффекты рассмотрены в работах [4, 5, 12]. Только для невырожденных полупроводников среднее $\langle \dots \rangle$ в (15.101) выражается через интегральные синус и косинус [12]. Результаты указанных работ изложены в [16].

Легко видеть, что $\rho(0) = \sigma_{\text{эф}}^{-1} \neq \rho_1(0) + \rho_2(0)$, т. е. при смешанном механизме вклады отдельных механизмов рассеяния в сопротивление аддитивно не складываются [12].

Таким образом, учет смешанного механизма рассеяния при вычислении кинетических коэффициентов без магнитного поля и в слабых магнитных полях приводит даже для параболической зоны к вычислению сложных интегралов типа (15.100). Для непараболической зоны эти интегралы еще усложняются.

В отличие от этих случаев, в сильных магнитных полях ($u_{эф}H/c \gg 1$) учет смешанного механизма очень прост. Термоэ. д. с., коэффициент Холла и Риги — Ледюка в сильных магнитных полях от механизма рассеяния вообще не зависят. Покажем, что для тех кинетических коэффициентов, которые зависят от механизма рассеяния, в сильном магнитном поле вклады отдельных механизмов аддитивно складываются. Действительно, формулы (15.32) и (15.55) легко переписать в виде

$$\begin{aligned} \rho(\infty) &= (1/e^2 n) \langle m/\tau \rangle, \\ Q_\infty &= (k_0/e^2) (c/H^2) (\langle x \rangle \langle m/\tau \rangle - \langle xm/\tau \rangle). \end{aligned} \quad (15.102)$$

В эти выражения вместо τ^{-1} подставим $\tau_{эф}^{-1}$ из (15.96). Теперь видно, что вклады отдельных механизмов аддитивно складываются:

$$\rho_{эф}(\infty) = \sum_i \rho_i(\infty), \quad Q_{эф} = \sum_i Q_i(\infty). \quad (15.103)$$

Аналогичный результат имеет место для электронной части теплопроводности $\kappa_\infty^{эп}(H)$, если использовать (15.82) и (15.96).

Формулы (15.103) дают возможность исследовать влияние смешанного механизма рассеяния в сильных магнитных полях, взяв любую комбинацию существующих механизмов рассеяния. В полупроводниках с параболической зоной совместное действие двух механизмов — рассеяние на акустических фронах и на ионах примеси — рассмотрено в работе [11].

9. Вырожденные полупроводники в произвольном магнитном поле. В предыдущих пунктах было показано, что для окончательного выражения кинетических коэффициентов через интегралы Ферми необходимо использовать явный вид закона дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(k)$ и времени релаксации $\tau = \tau(\varepsilon)$, причем это удается только в области слабых ($\nu \ll 1$) и сильных ($\nu \gg 1$) магнитных полей. Однако, если предположить, что полупроводник сильно вырожден, то вышеуказанные ограничения не нужны, и кинетические коэффициенты можно вычислить в произвольном магнитном поле для любого изотропного закона дисперсии и для любой зависимости времени релаксации τ от энергии ε [15].

Если использовать (4.25), то из (13.26) — (13.29), (13.18) и (13.19) для основных кинетических коэффициентов в сильно вырожденных электронных полупроводниках в произвольном магнитном поле получим следующие выражения:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{3\pi^2}{4} \left(\frac{k_0 T}{\xi^*} \right)^2 \frac{\nu^2}{1 + \nu^2} \gamma^2(n, r), \quad (15.104)$$

$$R = -\frac{1}{enc} \left[1 + \frac{3\pi^2}{4} \left(\frac{k_0 T}{\xi^*} \right)^2 \frac{\nu^2}{1 + \nu^2} \gamma^2(n, r) \right], \quad (15.105)$$

$$Q = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_0}{e} \left(\frac{k_0 T}{\xi^*} \right) \frac{\nu}{H(1 + \nu^2)} \gamma(n, r), \quad (15.106)$$

$$\alpha(H) = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_0 T}{\xi^*} \right) \left(1 + \frac{\gamma(n, r)}{1 + \nu^2} \right), \quad (15.107)$$

$$\kappa(H) = \kappa_\Phi + \kappa_{эл}(H) = \kappa_\Phi + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 \frac{\sigma_0 T}{1 + \nu^2}, \quad (15.108)$$

$$S(H) = (\nu/H) \kappa_{эл}(H) / \kappa(H), \quad P = TQ / \kappa(H), \quad (15.109)$$

где $\gamma(n, r)$ — параметр, определяющий зависимость τ/m от энергии или от концентрации (14.44), ξ^* дается (14.42),

$$\nu = (eH/c) \tau(\xi) / m(\xi) \equiv Hu(\xi) / c. \quad (15.110)$$

Заметим, что порядок кинетических коэффициентов по малому параметру $k_0 T / \xi^*$ различен: магнетосопротивление имеет второй порядок малости, Q , α и P имеют первый порядок, а R , $\kappa_{эл}(H)$ и S — нулевой порядок.

Приведенные выражения являются общими, они справедливы и при смешанном механизме рассеяния. Если действует только один механизм с параметром рассеяния r , то, как было показано в п. 2 § 14, параметр $\gamma(n, r)$ (14.44) приобретает вид

$$\gamma(n, r) = 2/3(r - 1/2 - \gamma(n)), \quad (15.111)$$

где $\gamma(n)$ характеризует только непараболичность зоны (14.35), т. е. связан с зависимостью эффективной массы от энергии $m(\xi)$ или от концентрации $m(n)$: $\gamma(n) = 0$ для параболической зоны; $\gamma(n) = 1$ для сильно непараболической зоны.

Отметим, что формулы (15.104) — (15.109) с учетом (15.111) наглядно подтверждают качественные соображения, приведенные в начале пп. 2—7 настоящего параграфа относительно того, что величина и знак того или иного эффекта определяются зависимостью именно отношения τ/m от энергии. Действительно, видно, что $\Delta\rho/\rho$, Q , P и $\Delta\alpha$ отличны от нуля, если $\gamma(n, r) \neq 0$, что имеет место тогда, когда хотя бы $r \neq 1/2$ или $\gamma(n) \neq 0$. Более того, Q , P и $\Delta\alpha \sim \gamma(n, r)$, т. е. знак определяется значением r (зависимостью τ от энергии) и величиной $\gamma(n)$ (насколько сильно растет $m(\xi)$ с энергией). Таким образом, знак Q , P и $\Delta\alpha$ определяется зависимостью $\tau(\epsilon)$ от энергии и непараболичностью зоны $m(\epsilon)$.

Измеряя кинетические эффекты в произвольном магнитном поле и используя приведенные выше выражения, можно найти величины ν , $\gamma(n, r)$, ξ^* и тем самым определить основные параметры вырожденных полупроводников, такие как концентрация носителей n , эффективная масса на поверхности Ферми $m(\xi)$, подвижность $u(\xi)$ и механизмы рассеяния. Такой метод определения характеристических параметров является более точным по сравнению с обычным методом, где используются приближенные формулы для кинетических коэффициентов, пригодные в слабых ($\nu \ll 1$) и сильных ($\nu \gg 1$) магнитных полях.

Из (15.104) — (15.109) можно получить следующие полезные соотношения между кинетическими коэффициентами:

$$R = -(1/nec)[1 + (\Delta\rho/\rho)_\infty],$$

$$|\alpha(0) - \alpha(\infty)| = \frac{c}{u} Q, \quad \frac{S_0}{S_\infty} = \frac{\kappa_\Phi}{\kappa_\Phi + \kappa_0} \frac{Q_0}{Q_\infty}, \quad (15.112)$$

где R — коэффициент Холла в слабом ($v \ll 1$) магнитном поле, $(\Delta\rho/\rho)_\infty$ — изменение сопротивления в сильном ($v \gg 1$) магнитном поле,

$$\alpha(\infty) = -\frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{2} \frac{k_0 T}{\zeta^*} \quad (15.113)$$

— термо-э. д. с. в предельно сильном ($v \gg 1$) магнитном поле, Q_0 , S_0 и Q_∞ , S_∞ — коэффициенты Нернста — Эттингсгаузена и Риги — Ледюка в слабом и сильном магнитных полях соответственно.

Отметим, что в произвольном магнитном поле в вырожденных полупроводниках и металлах закон Видемана — Франца имеет место для каждой компоненты в отдельности:

$$\kappa_{ih} = (\pi^2/3) (k_0/e)^2 \sigma_{ih}. \quad (15.113a)$$

10. Явления переноса при рассеянии на оптических фононах. Известно, что рассеяние на оптических фононах носит неупругий характер. Именно этим обусловлены некоторые качественные особенности магнетосопротивления в полупроводниках в сильных магнитных полях при рассеянии на полярных оптических фононах в области низких температур [29]. Рассеяние на полярных оптических фононах в ионных кристаллах рассмотрено в работах [2, 30]. В области высоких температур, когда $k_0 T \gg \hbar\omega_0$, где ω_0 — частота оптического фонона, неупругостью можно пренебречь, и процесс рассеяния описывается временем релаксации, зависящим от энергии как степенная функция (см. табл. 5). Было показано [2], что при рассеянии на оптических фононах время релаксации можно ввести и в области низких температур $k_0 T \ll \hbar\omega_0$ (см. § 11), причем в этом случае τ определяется формулой (11.90), из которой видно, что τ от энергии не зависит. Следовательно, в примесных полупроводниках с параболической зоной отношение τ/m не зависит от энергии, и поэтому такие эффекты, как магнитное сопротивление, поперечный эффект Нернста — Эттингсгаузена, магнетотермо-э. д. с. и эффект Эттингсгаузена, в этом случае должны отсутствовать *).

Однако более последовательное рассмотрение показало, что поперечное магнетосопротивление [31—33] и другие кинетические эффекты [33, 34] при низких температурах отсутствуют только в слабых магнитных полях, а в области сильных магнит-

*) В предыдущих пунктах настоящего параграфа мы показали, что указанные эффекты определяются именно зависимостью τ/m от энергии.

ных полей и низких температур ($k_0 T \ll \hbar \omega_0$) эти эффекты при рассеянии на оптических фононах не только отличны от нуля, но они имеют аномально большие значения. Здесь на примере рассеяния электронов проводимости на неполярных оптических фононах покажем, что действительно это так.

В смысле неупругости рассеяния принципиальной разницы между полярными и неполярными оптическими фононами нет. Но в отличие от полярных фононов, как было показано в § 11, при рассеянии на неполярных оптических фононах можно ввести время релаксации во всей области температур [см. (11.57)].

Рассмотрим невырожденный полупроводник с параболической зоной. В этом случае время релаксации для рассеяния на неполярных оптических фононах дается формулой (11.66), которую можно переписать в виде

$$\frac{1}{\tau} \equiv \frac{1}{\tau_1} = \frac{N_0}{\tau_0} (x + x_0)^{1/2} \text{ при } x < x_0, \quad (15.114)$$

$$\frac{1}{\tau} \equiv \frac{1}{\tau_2} = \frac{N_0}{\tau_0} [(x + x_0)^{1/2} + (x - x_0)^{1/2} e^{x_0}] \text{ при } x > x_0, \quad (15.115)$$

где

$$\tau_0 = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{\rho a^2 \omega_0 \hbar^3}{E_0^2 m_n^{3/2} (k_0 T)^{1/2}}, \quad x = \frac{\varepsilon}{k_0 T}, \quad x_0 = \frac{\hbar \omega_0}{k_0 T},$$

$$N_0 = (e^{x_0} - 1)^{-1}. \quad (15.116)$$

Очевидно, что τ_1 связано только с поглощением оптических фононов электронами с энергией $\varepsilon < \hbar \omega_0$ (т. е. $x < x_0$), так как в этой области испускание фононов ($\hbar \omega_0 > \varepsilon$) невозможно. Величина τ_2 описывает релаксацию электронов с энергией $\varepsilon > \hbar \omega_0$ ($x > x_0$), где возможны процессы как поглощения [первый член в (15.115)], так и испускания [второй член в (15.115)] оптических фононов.

Из (15.115) легко видеть, что при низких температурах ($x_0 \gg 1$) в области энергии $\varepsilon > \hbar \omega_0$ поглощение не играет роли и $\tau_2 \approx \tau_0 (x - x_0)^{-1/2}$ намного меньше времени $\tau_1 = \tau_0 (x + x_0)^{-1/2} e^{x_0}$, связанного только с поглощением.

Вычислим электрическую проводимость $\sigma_n = en\mu$, т. е. подвижность μ при рассеянии на неполярных оптических фононах в невырожденных полупроводниках с параболической зоной. В этом случае, согласно (13.21), (15.114) и (15.115), подвижность (14.3) имеет вид

$$\mu = e \langle \tau / m_n \rangle = \frac{4}{3} \frac{e \tau_0}{\sqrt{\pi} m_n} (e^{x_0} - 1) \left[\int_0^{x_0} e^{-x} \frac{x^{3/2} dx}{(x + x_0)^{1/2}} + \right.$$

$$\left. + e^{-x_0} \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{(x + x_0)^{3/2} dx}{(x + 2x_0)^{1/2} + x^{1/2} e^{x_0}} \right]. \quad (15.117)$$

Эта формула позволяет определить температурную зависимость подвижности при рассеянии на неполярных оптических фононах во всей области температур.

При низких температурах, когда $x_0 \gg 1$, подвижность

$$u = \frac{e}{m_n} \langle \tau \rangle = \frac{e\tau_0}{m_n} \frac{e^{x_0}}{\sqrt{x_0}} \left(1 + \frac{4}{3} x_0^2 e^{-2x_0} \right). \quad (15.118)$$

Второй член в скобке учитывает испускание фононов электронами в области с энергией $\epsilon \gg \hbar\omega_0$, т. е. связан с τ_2 . Видно, что он много меньше единицы, так как $x_0 \gg 1$. Следовательно, при низких температурах ($x_0 \gg 1$) τ_2 в проводимость вклада не дает и подвижность определяется только τ_1 , т. е.

$$u = \frac{e}{m_n} \langle \tau_1 \rangle = (e\tau_0/m_n) (k_0T/\hbar\omega_0)^{1/2} \exp(\hbar\omega_0/k_0T), \quad (15.119)$$

что соответствует выражению для времени релаксации (11.67).

Очевидно, что τ_2 при низких температурах ($x_0 \gg 1$) не даст вклада в кинетические эффекты и в слабых магнитных полях $v_1 = e\tau_1 H/m_n c \ll 1$, $v_2 = e\tau_2 H/m_n c \ll 1$, поскольку, как известно, в слабых полях кинетические коэффициенты определяются средними типа $\langle \tau/m \rangle$, $\langle (\tau/m)^2 \rangle$, $\langle (\tau/m)^3 \rangle$ и т. д. Таким образом, в области слабых магнитных полей должны отсутствовать те кинетические эффекты, которые определяются зависимостью τ/m от энергии при рассеянии на оптических фононах в области низких температур.

Теперь покажем, что в сильных магнитных полях положение существенно меняется: вклад τ_2 является определяющим, и изменение сопротивления в магнитном поле очень большое.

Сначала рассмотрим сильные магнитные поля, удовлетворяющие условию $v_2 = \Omega\tau_2 \gg 1$. Поскольку $\tau_1 > \tau_2$, то и $v_1 = \Omega\tau_1 \gg 1$. Таким образом, рассмотрим область магнитных полей $1 \ll v_2 \ll v_1 = uH/c$. В этом случае магнитное сопротивление дается формулой (15.32). Если эффективная масса m , как мы здесь предполагаем, не зависит от энергии, то (15.32) имеет вид

$$(\Delta\rho/\rho)_\infty = \langle \tau \rangle \langle 1/\tau \rangle - 1. \quad (15.120)$$

Из (15.118) следует, что при $x_0 \gg 1$

$$\langle \tau \rangle = \langle \tau_1 \rangle = \tau_0 x_0^{-1/2} e^{x_0}. \quad (15.121)$$

Аналогично можно вычислить $\langle 1/\tau \rangle$. В нашем случае это среднее определяется интегралом

$$\langle 1/\tau \rangle = \frac{4}{3} \frac{N_0}{\sqrt{\pi} \tau_0} \left\{ \int_0^{x_0} e^{-x} (x + x_0)^{1/2} x^{3/2} dx + \int_{x_0}^{\infty} e^{-x} [(x + x_0)^{1/2} + (x - x_0)^{1/2} e^{x_0}] x^{3/2} dx \right\}. \quad (15.122)$$

При $x_0 \gg 1$ легко получим

$$\langle 1/\tau \rangle = \tau_0^{-1} x_0^{1/2} e^{-x_0} \left(1 + \frac{2}{3} x_0 \right). \quad (15.123)$$

Второй член в скобке появился из-за τ_2 , т. е. связан с процессом испускания фононов электронами с энергией $\varepsilon > \hbar\omega_0$; при $x_0 \gg 1$ этот член является определяющим.

Подставляя (15.121) и (15.123) в (15.120), получим

$$(\Delta\rho/\rho)_\infty = 2x_0/3 = 2/3 (\hbar\omega_0/k_0T) \gg 1. \quad (15.124)$$

Отметим, что для упругих механизмов рассеяния $(\Delta\rho/\rho)_\infty \approx 1$.

Выражения для коэффициента Нернста — Эттингсгаузена и теплопроводности в сильном магнитном поле можно получить из (15.55) и (15.82). Для этого нам нужно вычислить средние значения $\langle x/\tau \rangle$ и $\langle x^2/\tau \rangle$. Их можно вычислить так же, как и (15.123). В результате имеем

$$\langle x/\tau \rangle = \tau_0^{-1} x_0^{1/2} \left(\frac{5}{2} + \frac{2}{3} x_0^2 \right) e^{-x_0}, \quad \langle x^2/\tau \rangle = \tau_0^{-1} x_0^{1/2} \left(\frac{35}{4} + \frac{2}{3} x_0^3 \right) e^{-x_0}. \quad (15.125)$$

Используя вышеприведенные средние значения, а также $\langle x \rangle = 5/2$ (см. табл. 6), из (15.55) и (15.82) легко получим следующие выражения:

$$Q_\infty = \frac{k_0}{e} \frac{1}{H} \left(\frac{c}{uH} \right) \frac{x_0}{3} (5 - 2x_0), \quad (15.126)$$

$$\kappa_\infty(H) = \kappa_\Phi + \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 T \sigma_0 \left(\frac{c}{uH} \right)^2 \left(\frac{5}{2} + \frac{25}{6} x_0 - \frac{10}{3} x_0^2 + \frac{2}{3} x_0^3 \right), \quad (15.127)$$

где $\sigma_0 = e n u$ — электрическая проводимость, u — подвижность, определяемая рассеянием на оптических фононах при низких температурах (15.119). При очень больших значениях x_0 последние формулы принимают простой вид

$$Q_\infty = \frac{2}{3} \frac{k_0}{e} \frac{1}{H} \left(\frac{c}{uH} \right) \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0T} \right)^2, \quad (15.128)$$

$$\kappa_\infty(H) = \kappa_\Phi + \frac{2}{3} \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 T \sigma_0 \left(\frac{c}{uH} \right)^2 \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0T} \right)^3.$$

Видно, что по сравнению с обычными значениями для упругих механизмов рассеяния эти коэффициенты имеют большое значение.

• Коэффициент Эттингсгаузена можно найти из (13.20), если использовать (15.128).

Можно рассмотреть также область магнитных полей, в которой выполняется условие $v_1 \gg 1 \gg v_2$, т. е. $(eH/m_n c) \tau_1 \gg 1 \gg (eH/m_n c) \tau_2$. Это означает, что рассматриваемое магнитное поле для электронов с энергией $0 \leq \varepsilon < \hbar\omega_0$ (с временем релаксации

τ_1) является сильным, а для электронов с энергией $\varepsilon > \hbar\omega_0$ (с временем релаксации τ_2) — слабым. Поскольку $\tau_2 < \tau_1$, то такая область магнитных полей существует.

Для вычисления магнитного сопротивления и коэффициента Нернста — Эттингсгаузена в этом случае следует исходить из общих формул (13.26) и (13.28). Если вспомнить, что мы рассматриваем полупроводники с параболической зоной, т. е. $m = m_n = \text{const}$, то, согласно (15.25), магнитное сопротивление определяется формулой

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\langle\tau\rangle\langle\tau/(1+v^2)\rangle}{\langle\tau/(1+v^2)\rangle^2 + \langle\tau v/(1+v^2)\rangle^2} - 1, \quad (15.129)$$

где $\rho = (1/ne^2)(m_n/\langle\tau\rangle)$ — удельное сопротивление без магнитного поля.

Учитывая, что $v_1 \gg 1$ и $v_2 \ll 1$, согласно (13.21), для невырожденных полупроводников можно приближенно вычислить средние, входящие в (15.129). Так, например,

$$\left\langle \frac{\tau}{1+v^2} \right\rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[\int_0^{x_0} \frac{\tau_1}{v_1^2} e^{-x} x^{3/2} dx + \int_{x_0}^{\infty} \tau_2 e^{-x} x^{3/2} dx \right]. \quad (15.130)$$

Подставляя τ_1 и τ_2 из (15.114) и (15.115), переходя в последнем интеграле к новой переменной $x - x_0 \rightarrow x$ при $x_0 \gg 1$, из (15.130) получим

$$\left\langle \frac{\tau}{1+v^2} \right\rangle \simeq \tau_0^{-1} x_0^{1/2} e^{-x_0} \Omega^{-2} + \frac{4}{3} \tau_0 x_0^{3/2} e^{-x_0}. \quad (15.131)$$

В этом же приближении $\langle\tau v/(1+v^2)\rangle \simeq \Omega^{-1}$, где $\Omega = eH/m_n c$.

Тогда, подставляя эти значения и учитывая (15.121), из (15.129) легко получим выражение*)

$$\Delta\rho/\rho = (4/3) (\Omega\tau_0)^2 (\hbar\omega_0/k_0 T). \quad (15.132)$$

Аналогичные вычисления для коэффициента Нернста — Эттингсгаузена (13.28) при $x_0 \gg 1$ дают

$$Q = -\frac{4}{3} \frac{k_0}{e} \left(\frac{c}{uH} \right) (\Omega\tau_0)^2 \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0 T} \right)^2. \quad (15.133)$$

Видно, что и в случае $v_1 \gg 1$, $v_2 \ll 1$ при рассеянии на оптических фононах в области низких температур ($k_0 T \ll \hbar\omega_0$) кинетические эффекты могут быть большими.

Следует отметить, что формулы (15.124), (15.128), (15.132) и (15.133), которые совпадают с результатами работ [31—34], полученными другим методом, справедливы и для рассеяния на полярных оптических фононах.

*) Заметим, что величина τ_0 (15.116), как следует из (15.115), при $x_0 \gg 1$ порядка времени τ_2 .

§ 16. Явления переноса в полупроводниках типа p -Ge

Известно, что край валентной зоны германия и кремния состоит из зон тяжелых и легких дырок, вырожденных в точке $\mathbf{k} = 0$ (см. рис. 5). Следовательно, в дырочной проводимости участвуют два типа носителей: тяжелые и легкие дырки с эффективными массами m_1 и m_2 соответственно. Закон дисперсии для этих зон носит довольно сложный характер [см. формулу (3.4)]. Однако здесь для простоты мы предполагаем, что зоны тяжелых и легких дырок изотропны (3.6). Если отсчитать энергию дырок от вершины валентной зоны вниз, то энергию тяжелых и легких дырок можно записать в виде

$$\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m_1 \text{ и } \varepsilon_2(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m_2. \quad (16.1)$$

В этом параграфе индексы 1 и 2 будут относиться к тяжелым и легким дыркам соответственно.

Очевидно, подвижности этих носителей должны быть разными. Если предположить, что тяжелые и легкие дырки ведут себя самостоятельно и рассеиваются на акустических фононах, то, согласно (14.3) и (11.44), отношение подвижностей *)

$$u_1/u_2 = (m_2/m_1)^{5/2}. \quad (16.2)$$

Однако опыт дает, что отношение $u_1/u_2 = m_2/m_1$ [35, 36]. Такое несоответствие показывает, что теория явлений переноса в полупроводниках типа p -Ge, где зоны вырождены, требует особого рассмотрения. Теория явлений переноса и рассеяния носителей заряда в полупроводниках типа p -Ge развита в работах [37—41], в которых было показано, что переходы между зонами тяжелых и легких дырок в процессе релаксации играют важную роль.

Здесь мы рассмотрим упрощенный вариант этой теории, предполагая, что закон дисперсии зон тяжелых и легких дырок изотропен (16.1) и константа деформационного потенциала E_1 одна и та же для тяжелых и легких дырок.

1. Система кинетических уравнений для тяжелых и легких дырок. Неравновесные функции распределения тяжелых и легких дырок обозначим через $f_1(\mathbf{k})$ и $f_2(\mathbf{k})$. При учете переходов между зонами тяжелых и легких дырок эти функции удовлетворяют системе кинетических уравнений. Символически эту систему можем записать в виде

$$\begin{aligned} \widehat{D}f_1(\mathbf{k}) &= I(f_1, f_2), \\ \widehat{D}f_2(\mathbf{k}) &= I(f_2, f_1). \end{aligned} \quad (16.3)$$

Здесь

$$\widehat{D}f_i(\mathbf{k}) = \mathbf{v}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{r}} f_i + \frac{e}{\hbar} \left(\mathbf{E}_0 + \frac{1}{c} [\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{H}] \right) \nabla_{\mathbf{k}} f_i, \quad i = 1, 2, \quad (16.4)$$

*) Предполагается, что константа деформационного потенциала для тяжелых и легких дырок одинакова.

— левая часть кинетического уравнения (8.11), записанная для дырок, а интеграл столкновения с учетом межзонных переходов имеет вид

$$I(f_1, f_2) = \sum_{\mathbf{k}'} \{W_{11}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_1(\mathbf{k}') [1 - f_1(\mathbf{k})] - W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_1(\mathbf{k}) \times \\ \times [1 - f_1(\mathbf{k}')] \} + \sum_{\mathbf{k}'} \{W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_2(\mathbf{k}') [1 - f_1(\mathbf{k})] - W_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_1(\mathbf{k}) \times \\ \times [1 - f_2(\mathbf{k}')] \}, \quad (16.5)$$

где первая сумма учитывает переходы в пределах зоны тяжелых дырок, а вторая сумма описывает переходы между зонами тяжелых и легких дырок; W_{11} , W_{12} , W_{21} есть соответствующие вероятности перехода. Интеграл столкновения $I(f_2, f_1)$ из (16.5) получается взаимной заменой индексов $1 \rightleftharpoons 2$.

Как обычно, неравновесные функции распределения дырок представим в виде

$$f_i(\mathbf{k}) = f_{i0}(\mathbf{k}) + f'_i(\mathbf{k}), \quad i = 1, 2, \quad (16.6)$$

причем $f'_i(\mathbf{k}) \ll f_{i0}(\mathbf{k})$, где $f_{i0}(\mathbf{k})$ — равновесная функция распределения для дырок, $f'_i(\mathbf{k})$ — неравновесная добавка.

Подставляя (16.6) в (16.5) и в соответствующее выражение $I(f_1, f_2)$ и $I(f_2, f_1)$, учитывая принцип детального равновесия типа (9.2) и ограничиваясь линейными по неравновесной добавке $f'_i(\mathbf{k})$ членами, для правых частей системы уравнений (16.3) получим следующий явный вид:

$$\begin{aligned} \widehat{D}f_1(\mathbf{k}) &= -f'_1(\mathbf{k})/\tau_{11} - f'_1(\mathbf{k})/\tau'_{12} + f'_2(\mathbf{k})/\tau_{21}, \\ \widehat{D}f_2(\mathbf{k}) &= -f'_2(\mathbf{k})/\tau_{22} - f'_2(\mathbf{k})/\tau'_{21} + f'_1(\mathbf{k})/\tau_{12}, \end{aligned} \quad (16.7)$$

где введены обозначения

$$\frac{1}{\tau_{11}} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[\frac{1 - f_{10}(\mathbf{k}')}{1 - f_{10}(\mathbf{k})} - \frac{f_{10}(\mathbf{k})}{f_{10}(\mathbf{k}')} \frac{f'_1(\mathbf{k}')}{f'_1(\mathbf{k})} \right], \quad (16.8)$$

$$\frac{1}{\tau'_{12}} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{1 - f_{20}(\mathbf{k}')}{1 - f_{10}(\mathbf{k})}, \quad (16.9)$$

$$\frac{1}{\tau_{21}} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{1 - f_{10}(\mathbf{k})}{1 - f_{20}(\mathbf{k}')} \frac{f'_2(\mathbf{k}')}{f'_2(\mathbf{k})}, \quad (16.10)$$

а выражения для τ_{22} , τ'_{21} и τ_{12} получим из (16.8) — (16.10), если в них поменять местами индексы $1 \rightleftharpoons 2$.

Отметим, что τ_{11} , τ'_{12} и τ_{21} (соответственно τ_{22} , τ'_{21} и τ_{12}) в отдельности есть просто обозначения и в общем случае не имеют смысла времени релаксации. Более того, τ_{11} и τ'_{21} (а также τ_{22} и τ'_{12}) содержат неизвестные функции $f'_1(\mathbf{k})$ и $f'_2(\mathbf{k})$. Поэтому в общем случае (16.7) остается системой интегродифференциальных уравнений.

Как видно из (16.7), уравнения для $f_1(\mathbf{k})$ и $f_2(\mathbf{k})$ зацепляются и составляют систему только за счет величин τ_{21}^{-1} и τ_{12}^{-1} , которые связаны с приходом дырок из другой зоны: для $f_1(\mathbf{k})$ приход из зоны легких дырок в зону тяжелых дырок [первый член во второй сумме в (16.5)], а для $f_2(\mathbf{k})$ приход из зоны тяжелых дырок в зону легких дырок.

В том случае, когда приход из другой зоны невозможен или не играет роли,

$$\tau_{21}^{-1} = 0, \quad \tau_{12}^{-1} = 0 \quad (16.11)$$

и система (16.7) распадается на два самостоятельных уравнения для $f'_1(\mathbf{k})$ и $f'_2(\mathbf{k})$. Очевидно, выполнение (16.11) зависит от характера рассеяния, т. е. от вида вероятности перехода $W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ и $W_{12}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$.

Рассеяние дырок в полупроводниках типа p -Ge с учетом вырождения валентных зон рассмотрено в работах [65—67]. Было показано, что в предположении изотропности валентных зон (16.1) учет базисных волновых функций дырок в вероятности перехода приводит к дополнительному множителю, зависящему от угла между \mathbf{k} и \mathbf{k}' . Этот множитель один и тот же как для рассеяния на фононах [38, 39], так и для рассеяния на ионах примеси [40]. Так, например, для рассеяния внутри одной зоны

$$W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (16.12)$$

а для рассеяния между зонами

$$W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) F_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (16.13)$$

где

$$F_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{4} [1 + 3(\mathbf{k}'\mathbf{k}/kk')^2], \quad F_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 1 - F_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (16.14)$$

а вероятности перехода $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ для различных конкретных механизмов рассеяния приведены в формулах (10.28), (11.41), (11.53), (11.75) и (11.100).

2. Расчет времени релаксации дырок с учетом межзонных переходов. Изложенная в этом параграфе теория явлений переноса применима не только для p -Ge и p -Si. Она справедлива также и для многих полупроводников $A^{III}B^V$ p -типа, в частности p -InSb, так как структура края валентной зоны у них почти одинакова (см. § 3), если не учитывать непараболичность зоны легких дырок в полупроводниках типа InSb. Поэтому мы здесь проанализируем не только механизмы рассеяния, доминирующие в Ge и Si (ионы примеси, акустические и неполярные оптические фононы), но и другие механизмы, такие как рассеяние на полярных оптических фононах и на пьезоакустических фононах.

Для упругих и квазиупругих механизмов рассеяния на ионах примеси, на акустических и пьезоакустических фононах вероят-

ности переходов в пределах одной зоны (16.12) и между зонами (16.13) можно представить в виде

$$W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \cdot F_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\varepsilon_1(\mathbf{k}') - \varepsilon_1(\mathbf{k})), \quad (16.15)$$

$$W_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \\ = W_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \cdot F_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\varepsilon_2(\mathbf{k}') - \varepsilon_1(\mathbf{k})), \quad (16.16)$$

где только $W_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ различны для разных механизмов рассеяния. Согласно (10.28), (11.41) и (11.99) величины $W_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ имеют следующие значения при рассеянии на ионах примеси, акустических и пьезоакустических фононах:

$$W_0^{\text{пр}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi N_{\text{пр}}}{\hbar V} \left(\frac{4\pi e^2}{\kappa} \right)^2 \frac{1}{[(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 + r_0^{-2}]^2}, \quad (16.17)$$

$$W_0^{\text{ак}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_0^{\text{ак}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{E_1}{v_0} \right)^2 \frac{k_0 T}{MN}, \quad (16.18)$$

$$W_0^{\text{pz}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eE_{\text{pz}}}{\chi v_0} \right)^2 \frac{k_0 T}{NM} \frac{1}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}, \quad (16.19)$$

$N_{\text{пр}}$ — концентрация ионов примеси; для акустических фононов предполагается, что легкие и тяжелые дырки имеют одинаковую константу деформационного потенциала.

При неупругом рассеянии на оптических фононах соответствующие вероятности перехода без учета дисперсии частоты имеют вид

$$W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [N_0 \delta(\varepsilon_1(\mathbf{k}') - \varepsilon_1(\mathbf{k}) - \hbar\omega_0) + \\ + (N_0 + 1) \delta(\varepsilon_1(\mathbf{k}') - \varepsilon_1(\mathbf{k}) + \hbar\omega_0)], \quad (16.20)$$

$$W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = W_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [N_0 \delta(\varepsilon_1(\mathbf{k}) - \varepsilon_2(\mathbf{k}') - \hbar\omega_0) + \\ + (N_0 + 1) \delta(\varepsilon_1(\mathbf{k}) - \varepsilon_2(\mathbf{k}') + \hbar\omega_0)], \quad (16.21)$$

$$W_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [N_0 \delta(\varepsilon_2(\mathbf{k}') - \varepsilon_1(\mathbf{k}) - \hbar\omega_0) + \\ + (N_0 + 1) \delta(\varepsilon_2(\mathbf{k}') - \varepsilon_1(\mathbf{k}) + \hbar\omega_0)], \quad (16.22)$$

где, согласно (11.53) и (11.75), $W_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ для неполярных и полярных оптических фононов дается выражениями

$$W_0^{\text{опт}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_0^{\text{опт}} = \frac{\pi E_0^2}{NM\omega_0} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2, \quad (16.23)$$

$$W_0^{\text{пол}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{4\pi^2 e^2}{V\kappa^*} \frac{\omega_0}{(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2}. \quad (16.24)$$

Из вышеприведенных формул видно, что для механизмов рассеяния на акустических и неполярных оптических фононах вероятности перехода являются четной функцией \mathbf{k}' , в частности, $W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{11}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$ и $W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = W_{21}(-\mathbf{k}', \mathbf{k})$. Поэтому при таких механизмах рассеяния приход из других состояний в \mathbf{k} -состояние не играет роли и $\tau_{21}^{-1} = 0$, что видно из (16.10),

поскольку $f_2'(\mathbf{k}') \sim \mathbf{k}'$, а равновесные функции являются четной функцией \mathbf{k}' . По этой причине в (16.8) второй член исчезает и τ_{11}^{-1} не содержит неизвестной функции $f_1'(\mathbf{k})$. В результате при рассеянии на акустических и неполярных оптических фононах, если не пренебречь неупругостью и дисперсией оптических фононов, то выполняются условия (16.11) и система (16.7) распадается на два самостоятельных уравнения для $f_1'(\mathbf{k})$ и $f_2'(\mathbf{k})$:

$$\hat{D}f_i(\mathbf{k}) = -f_i'(\mathbf{k})/\tau_i, \quad i = 1, 2, \quad (16.25)$$

где τ_1 и τ_2 имеют смысл времен релаксации тяжелых и легких дырок, которые определяются уходом из \mathbf{k} -состояния в \mathbf{k}' -состояния в данной зоне τ_{11} и уходом в другую зону τ_{12}' :

$$1/\tau_1 = 1/\tau_{11} + 1/\tau_{12}', \quad 1/\tau_2 = 1/\tau_{22} + 1/\tau_{21}', \quad (16.26)$$

где

$$\frac{1}{\tau_1} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{1 - f_{10}'(\mathbf{k}')}{1 - f_{10}(\mathbf{k})}, \quad (16.27)$$

а τ_{12}' дается формулой (16.9); τ_{22} и τ_{21}' получаются из (16.27) и (16.9) заменой $1 \Leftrightarrow 2$.

В случае рассеяния на акустических фононах, как известно, процесс можно считать упругим, и тогда, согласно (16.26), (16.9) и (16.27),

$$\tau_1^{-1} = \sum_{\mathbf{k}'} [W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + W_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')]. \quad (16.28)$$

Подставляя в (16.28) выражения вероятности (16.15), (16.16) и (16.18) и интегрируя по \mathbf{k}' , согласно (2.15), с использованием закона сохранения энергии, для времени релаксации тяжелых дырок получим выражение *)

$$\frac{1}{\tau_1^{\text{ак}}} = \frac{E_1^2 (2k_0 T)^{3/2}}{4\pi \hbar^4 \rho v_0^2} (m_1^{3/2} + m_2^{3/2}) \left(\frac{\varepsilon}{k_0 T} \right)^{1/2}. \quad (16.29)$$

Аналогичный расчет для времени релаксации легких дырок $\tau_2^{\text{ак}}$ точно приводит к результату (16.29). Таким образом, в приближении сферических зон (16.1) учет межзонных переходов выравнивает времена релаксации тяжелых и легких дырок при рассеянии на акустических фононах $\tau_1^{\text{ак}} = \tau_2^{\text{ак}}$. Отсюда вытекает, что отношение подвижностей $u_1/u_2 = \langle \tau_1^{\text{ак}} \rangle / m_1 \cdot m_2 / \langle \tau_2^{\text{ак}} \rangle = m_2/m_1$ в соответствии с экспериментом [35].

В случае рассеяния на неполярных оптических фононах, суммируя (16.27) и (16.9), учитывая (16.20) и (16.22) и интегрируя по \mathbf{k}' , так же как и при переходе из (11.56) в (11.57), для

*) Рассеяние на акустических фононах более подробно рассмотрено в [67].

времен релаксации тяжелых дырок с учетом межзонных переходов получим выражение

$$\frac{1}{\tau_1^{\text{опт}}} = \frac{\pi}{2\sqrt{2}} \frac{E_0^2}{\rho a^2 \omega_0 \hbar^3} (m_1^{3/2} + m_2^{3/2}) \frac{N_0}{f_0(\varepsilon_1)} \left[f_0(\varepsilon_1 + \hbar\omega_0) \times \right. \\ \left. \times \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0 T}\right) (\varepsilon_1 + \hbar\omega_0)^{1/2} + f_0(\varepsilon_1 - \hbar\omega_0) (\varepsilon_1 - \hbar\omega_0)^{1/2} \right]. \quad (16.30)$$

Выражение для времен релаксации легких дырок $\tau_2^{\text{опт}}$ из (16.30) получится заменой 1 \Rightarrow 2. Из этого следует, что и в случае рассеяния на неполярных оптических фононах средние значения времен релаксации для тяжелых и легких дырок с учетом процесса ухода из одной зоны также выравниваются: $\langle \tau_1^{\text{опт}} \rangle = \langle \tau_2^{\text{опт}} \rangle$. Это обеспечивает правильность соотношения $u_1/u_2 = m_2/m_1$.

Еще в одном случае система уравнений (16.7) распадается на два уравнения (16.25), только по другой причине. Действительно, при рассеянии на полярных оптических фононах в области низких температур, когда $k_0 T \ll \hbar\omega_0$ ($\varepsilon \ll \hbar\omega_0$), возможен только один процесс: уход из \mathbf{k} -состояния с поглощением оптических фононов $\varepsilon(\mathbf{k}') = \varepsilon(\mathbf{k}) + \hbar\omega_0$ и невозможен приход в \mathbf{k} -состояние. Поэтому, в частности, вероятности перехода из зоны легких дырок в зону тяжелых дырок и наоборот равны нулю: $W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 0$, $W_{12}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 0$ и выполняется условие (16.11), следовательно, (16.7) переходит в (16.25). Легко можно показать, что и в этом случае времена релаксации легких и тяжелых дырок равны: $\tau_1 = \tau_2$.

Таким образом, при рассеянии на акустических, неполярных оптических и на полярных оптических фононах в области низких температур ($k_0 T \ll \hbar\omega_0$) функции распределения тяжелых и легких дырок $f_1(\mathbf{k})$ и $f_2(\mathbf{k})$ определяются самостоятельно из уравнений (16.25), а их времена релаксации равны между собой, если предположить, что они имеют изотропный закон дисперсии (16.1).

Теперь рассмотрим случай, когда система (16.7) не распадается на отдельные уравнения. Это имеет место при рассеянии на ионах примесей, на пьезоакустических фононах и на полярных оптических фононах в области высоких температур ($k_0 T \gg \hbar\omega_0$). Действительно, из (16.17), (16.19) и (16.24) видно, что $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \neq W(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$, и поэтому, как следует из (16.27), $\tau_{21}^{-1} \neq 0$.

Однако, поскольку указанные механизмы рассеяния носят упругий или квазиупругий характер, то величины τ_{11} , τ_{21} , τ_{22} и τ_{12} не зависят от неизвестных функций $f_1(\mathbf{k})$, $f_2(\mathbf{k})$, и их можно вычислить (см. § 9). Тогда (16.7) хотя и остается системой, но она уже становится системой дифференциальных уравнений, которую легко решить. В случае упругих механизмов рассеяния

система (16.7) имеет вид

$$\begin{aligned}\widehat{D}f_1(\mathbf{k}) &= -f'_1(\mathbf{k})/\tau_1 + f'_2(\mathbf{k})/\tau_{21}, \\ \widehat{D}f_2(\mathbf{k}) &= -f'_2(\mathbf{k})/\tau_2 + f'_1(\mathbf{k})/\tau_{12},\end{aligned}\quad (16.31)$$

где

$$1/\tau_1 = 1/\tau_{11} + 1/\tau'_{12}, \quad 1/\tau_{11} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \mathbf{k}\mathbf{k}'/kk'), \quad (16.32)$$

$$1/\tau'_{12} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad 1/\tau_{21} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{21}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \mathbf{k}\mathbf{k}'/kk'. \quad (16.33)$$

При получении этих выражений из (16.8) — (16.10) мы учли упругость рассеяния и поступили так же, как и при переходе из (9.7) к (9.23). Формулы для τ_2 и τ_{12} из (16.32) и (16.33) получим, если в них заменим индексы $1 \rightleftharpoons 2$.

Рассеяние на ионах примеси рассмотрено в работе [40], где было показано, что межзонные переходы в этом случае играют небольшую роль. Механизмы рассеяния на полярных оптических и пьезоакустических фононах в упругом приближении аналогичны и поэтому мы здесь рассмотрим лишь рассеяние на полярных оптических фононах и вычислим величины τ_1 , τ_2 , τ_{21} и τ_{12} , входящие в систему кинетических уравнений (16.31).

Из (16.32) и (16.33) видно, что τ_1^{-1} определяется уходом и приходом в пределах зоны тяжелых дырок (τ_{11}), а также уходом из зоны тяжелых дырок в зону легких дырок (τ'_{12}). Величина же τ_{21} определяется только приходом из зоны легких дырок в зону тяжелых дырок.

Если приход из другой зоны играет роль $\tau_{21}^{-1} \neq 0$, то тяжелые и легкие дырки не характеризуются самостоятельным временем релаксации даже при упругом рассеянии. В этом случае неравновесные добавки к функции распределения следует определить из решения системы уравнений (16.31).

Подставляя соответствующие выражения вероятности рассеяния на полярных оптических фононах в (16.32), для τ_1^{-1} легко получим

$$\frac{1}{\tau_1^{\text{пол}}} = \frac{e^2}{\sqrt{2}} \frac{k_0 T}{\kappa^* \hbar^2} \frac{m_1^{1/2}}{\varepsilon^{1/2}} \left[1 + \frac{3}{2} \frac{m_2}{m_1} A_0(m_1, m_2) \right], \quad (16.34)$$

где

$$A_0(m_1, m_2) = b + \frac{1}{2}(b^2 - 1) \ln [(b - 1)/(b + 1)], \quad (16.35)$$

а

$$b = (m_1 + m_2)/2(m_1 m_2)^{1/2}. \quad (16.36)$$

Видно, что $A_0(m_1, m_2) = A_0(m_2, m_1)$, а безразмерный параметр $b \geq 1$.

Аналогично, для величины τ_{21}^{-1} , связанной с приходом из зоны легких дырок в зону тяжелых дырок, имеем

$$\frac{1}{\tau_{21}^{\text{пол}}} = \frac{3\epsilon^2}{2\sqrt{2}\kappa^*} \frac{k_0 T}{\hbar^2} \frac{1}{\epsilon^{1/2}} \frac{m_2}{m_1^{1/2}} A(m_1, m_2), \quad (16.37)$$

где

$$A(m_1, m_2) = b^2 - \frac{2}{3} + \frac{b}{2}(b^2 - 1) \ln \frac{b-1}{b+1}; \quad (16.38)$$

b дается (16.36).

Выражение для $1/\tau_2^{\text{пол}}$ следует из (16.34) при замене индексов 1 \rightleftharpoons 2. При одинаковом значении энергии

$$\tau_{12}^{\text{пол}} = (m_2/m_1)^{3/2} \tau_{21}^{\text{пол}}. \quad (16.39)$$

Таким образом, мы определили величины, входящие в (16.31), при рассеянии на полярных оптических фононах в области высоких температур ($k_0 T \gg \hbar\omega_0$) и тем самым нашли явный вид системы уравнений для неравновесной добавки функции распределения тяжелых $f'_1(\mathbf{k})$ и легких дырок $f'_2(\mathbf{k})$. Аналогичные результаты можно получить для рассеяния на пьезоакустических фононах и также можно вычислить τ_1 , τ_2 , τ_{21} и τ_{12} для рассеяния на фононах примесей.

3. Электрическая проводимость и другие кинетические коэффициенты. Зная $f'_1(\mathbf{k})$ и $f'_2(\mathbf{k})$, можно вычислить плотность тока, переносимого тяжелыми и легкими дырками, следующим образом:

$$\mathbf{j} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int f'_1(\mathbf{k}) \mathbf{v}_1 d\mathbf{k} + \frac{2e}{(2\pi)^3} \int f'_2(\mathbf{k}) \mathbf{v}_2 d\mathbf{k}. \quad (16.40)$$

Вначале рассмотрим случай, когда $f'_1(\mathbf{k})$ и $f'_2(\mathbf{k})$ определяются из самостоятельного уравнения (16.25) и учет межзонных переходов выравнивает времена релаксации: $\tau_1 = \tau_2$. Как видели выше, этот случай имеет место при рассеянии на акустических и неполярных оптических фононах, а также на полярных оптических фононах в области низких температур. В этом случае, очевидно, все формулы § 14 и 15, написанные для полупроводников с двумя типами носителей одинакового знака, будут справедливы.

Подставляя решение (16.25), связанное только с электрическим полем, в (16.40), для полной проводимости получим выражение

$$\sigma = e p_1 u_1 + e p_2 u_2, \quad (16.41)$$

где p_1 , p_2 и u_1 , u_2 — концентрации и подвижности тяжелых и легких дырок, причем

$$p_2/p_1 = (m_2/m_1)^{3/2}, \quad (16.42)$$

а подвижности невырожденных дырок, определяемые рассеянием

на акустических фононах, с учетом (16.29) имеют вид

$$u_1 = \frac{4\sqrt{\pi}}{3} \frac{e}{m_1} \frac{\hbar^4 \rho v_0^2}{E_1^2 (k_0 T)^{3/2}} \frac{1}{(m_1^{3/2} + m_2^{3/2})}, \quad u_2 = \frac{m_1}{m_2} u_1. \quad (16.43)$$

Тогда

$$\sigma = e r_1 u_1 [1 + (m_2/m_1)^{1/2}]. \quad (16.44)$$

Приведем выражения для других кинетических коэффициентов только невырожденных полупроводников типа p -Ge при рассеянии на акустических фононах. Из (14.48) и (14.29) с учетом $\tau_1 = \tau_2$ для термо-э. д. с. получим; что $\alpha_1 = \alpha_2$, следовательно, термо-э. д. с. p -образца

$$\alpha = (k_0/e) (2 - \eta), \quad (16.45)$$

где

$$\eta = \ln \left[\frac{\pi \sqrt{2\pi} \hbar^3}{(k_0 T)^{3/2}} \frac{p}{(m_1^{3/2} + m_2^{3/2})} \right], \quad (16.46)$$

$p = p_1 + p_2$ — полная концентрация дырок.

Согласно (14.65) и $\alpha_1 = \alpha_2$ для теплопроводности, обусловленной дырками, имеем

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = 2(k_0/e)^2 T (\sigma_1 + \sigma_2) = 2(k_0/e)^2 T e r_1 u_1 [1 + (m_2/m_1)^{1/2}]. \quad (16.47)$$

Для коэффициентов Холла R и Нернста — Эттингсгаузена Q в слабом магнитном поле из (15.11) и (15.60) получим выражения

$$R = \frac{3\pi}{8} \frac{1}{e c p} \frac{1}{(m_1 m_2)^{1/2}} \frac{(m_1^{3/2} + m_2^{3/2})}{(m_1^{1/2} + m_2^{1/2})}, \quad (16.48)$$

$$Q = -\frac{3\pi}{16} \frac{k_0}{e c} u_1 \left(\frac{m_1}{m_2} \right)^{1/2}. \quad (16.49)$$

Видно, что в случае выравнивания времен релаксации дырок кинетические коэффициенты для p -Ge упрощаются.

Теперь рассмотрим случай, когда для определения $f'_1(\mathbf{k})$ и $f'_2(\mathbf{k})$ необходимо решить систему уравнений (16.31). Это, как мы уже знаем, имеет место при рассеянии на фононах примеси, на полярных и пьезоакустических фононах. Последние два механизма могут играть существенную роль в полупроводниках p -InSb.

Решение системы уравнений (16.31) без магнитного поля ($H = 0$) при одной и той же энергии имеет вид

$$f'_1 = \frac{\tau_{12} \tau_2 \tau_1}{\tau_2 \tau_1 - \tau_{21} \tau_{12}} \left[(\mathbf{v}_2 \Phi_0) + \frac{\tau_{21}}{\tau_2} (\mathbf{v}_1 \Phi_0) \right] \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right), \quad (16.50)$$

$$f'_2 = \frac{\tau_{21} \tau_1 \tau_2}{\tau_1 \tau_2 - \tau_{12} \tau_{21}} \left[(\mathbf{v}_1 \Phi_0) + \frac{\tau_{12}}{\tau_1} (\mathbf{v}_2 \Phi) \right] \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right), \quad (16.51)$$

где

$$\Phi_0 = eE_0 + k_0 T \nabla_r ((\epsilon - \zeta)/k_0 T) \quad (16.52)$$

— обобщенная возмущающая сила, действующая на распределение дырок [см. (9.16)].

Подставляя это решение в (16.40), можно вычислить электрическую проводимость σ и термо-э. д. с. α .

В результате для термо-э. д. с. получим $\alpha = (k_0/e)(3 - \eta)$, где η дается формулой (16.46), т. е. такой же результат, как и при рассеянии на акустических фононах (16.45). Таким образом, наличие перекрестных членов с τ_{12}^{-1} и τ_{21}^{-1} (приход из другой зоны) в системе (16.31) для термо-э. д. с. роли не играет.

Что касается подвижностей, то для них перекрестные члены с τ_{12}^{-1} и τ_{21}^{-1} в системе (16.31) играют важную роль. Действительно, используя (16.50) и (16.51), а также явный вид величин τ_1 и τ_{21} , из (16.34) и (16.37) для отношения подвижностей получим

$$\frac{u_1}{u_2} = \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{3/2} \frac{1 + \frac{3}{2} \left[A(m_1, m_2) + \frac{m_1}{m_2} A_0(m_1, m_2) \right]}{1 + \frac{3}{2} \left[A(m_1, m_2) + \frac{m_2}{m_1} A_0(m_1, m_2) \right]}, \quad (16.53)$$

функции $A_0(m_1, m_2)$ и $A(m_1, m_2)$ даны в (16.35) и (16.38).

Видно, что в этом случае отношение u_1/u_2 сильно зависит от эффективных масс дырок. В частности, если $m_1 \gg m_2^*$, то безразмерный параметр $b \approx 1/2(m_1/m_2)^{1/2} \gg 1$, а функции

$$A_0(m_1, m_2) \approx 1/2(m_1/m_2)^{1/2}, \quad A(m_1, m_2) \approx m_1/4m_2. \quad (16.54)$$

Учитывая эти асимптотики, из (16.53) при $m_1 \gg m_2$ легко получим

$$u_1/u_2 \approx 2m_2/m_1, \quad (16.55)$$

что соответствует результату работы [42].

Если бы мы не учли перекрестные члены с τ_{12}^{-1} и τ_{21}^{-1} (приход из другой зоны) в (16.31), то вместо (16.53) имели бы отношение

$$\frac{u_1}{u_2} = \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{3/2} \frac{1 + (3m_1/2m_2) A_0(m_1, m_2)}{1 + (3m_2/2m_1) A_0(m_1, m_2)}, \quad (16.56)$$

которое при $m_1 \gg m_2$ дает

$$u_1/u_2 \approx 3/4 \text{ или } \tau_1/\tau_2 \approx 3m_1/4m_2 \gg 1. \quad (16.57)$$

Сравнение (16.55) и (16.57) показывает, насколько важен для отношения подвижностей тяжелых и легких дырок учет перекрестных членов в системе (16.31).

*) Например, для p -InSb отношение $m_1/m_2 \approx 30$.

В принципе систему уравнений (16.31) можно решить и в магнитном поле ($H \neq 0$). Найденные при этом функции $f'_1(\mathbf{k})$ и $f'_2(\mathbf{k})$ совместно с (16.40) дадут возможность вычислить любой кинетический коэффициент с учетом межзонных переходов.

§ 17. Увлечение носителей заряда фононами в полупроводниках с произвольной изотропной зоной

До сих пор при рассмотрении взаимодействия носителей заряда с фононами мы предполагали, что распределение фононов равновесно и дается функцией Планка (11.19). Однако наличие градиента температуры в полупроводнике, в котором исследуются термоэлектрические и термомагнитные явления, приводит к неравновесному распределению фононного газа. Очевидно, наибольшее отклонение от равновесного распределения будут иметь те фононы, у которых волновой вектор направлен вдоль градиента температуры. Вследствие этого рассеяние носителей заряда фононами становится анизотропным — направленным, носители чаще получают импульсы в сторону холодного конца образца, чем в противоположную. Таким образом, в полупроводнике возникает некая статистическая сила, пропорциональная градиенту температуры, обусловленная неравновесностью распределения фононов. Эта сила в свою очередь вызывает дополнительное изменение функции распределения носителей, в результате чего возникает дополнительный ток. Такое косвенное действие градиента температуры на систему носителей получило название *увлечение носителей заряда фононами*.

Механизм увлечения носителей заряда фононами при наличии градиента температуры впервые был предложен Гуревичем [43]. Учет этого механизма, в частности, объясняет аномальную температурную зависимость термо-э. д. с. в области низких температур, которую никак нельзя объяснить в рамках обычной теории термо-э. д. с., учитывающей только непосредственное — диффузионное действие градиента температуры на распределение носителей заряда.

Теории эффекта фононного увлечения в полупроводниках посвящены работы [44, 45], в которых вычислены термо-э. д. с. и термомагнитные коэффициенты с учетом неравновесности фононов в невырожденных полупроводниках с параболическим законом дисперсии в области слабых магнитных полей.

В настоящем параграфе увлечение носителей заряда фононами на основе работы [46] рассмотрено в более общем случае, а именно, предполагается, что энергия носителей в полупроводнике описывается произвольным изотропным законом дисперсии и их степень вырождения произвольна. Внешнее магнитное поле любое, но неквантовое. Кроме того, здесь учитывается взаимодействие носителей тока как с деформационными, так и с пьезоакустическими неравновесными фононами.

1. Решение кинетического уравнения с учетом неравновесности фононов. Для определенности рассмотрим электронный полупроводник с произвольной изотропной зоной. Кинетическое уравнение для электронов проводимости (8.11) символически представим в виде

$$\widehat{D}f = I(f) + I(N_q, f), \quad (17.1)$$

где $\widehat{D}f$ — левая часть уравнения (8.11), $I(f)$ обозначает часть интеграла столкновения, связанную с рассеянием на примесях, а $I(N_q, f)$ — интеграл столкновения, обусловленный рассеянием на фононах с функцией распределения N_q .

Неравновесную функцию распределения фононов N_q нужно определить из кинетического уравнения

$$(\partial N_q / \partial t)_{\text{поле}} + (\partial N_q / \partial t)_{\text{ст}} = 0, \quad (17.2)$$

где

$$(\partial N_q / \partial t)_{\text{поле}} = v_g \nabla_{\mathbf{r}} N_q, \quad (17.3)$$

а $v_g = v_0(\mathbf{q}/q)$ — групповая скорость длинноволновых фононов, v_0 — скорость звука.

Релаксация фононной подсистемы, выведенной из равновесия температурным градиентом, вообще говоря, определяется рассеянием фононов на фононах, фононов на границах образца и фононов на носителях заряда. Поэтому в общем случае столкновительный член в (17.2) зависит и от неравновесной функции электронов проводимости $f(\mathbf{k})$, а уравнения (17.1) и (17.2) следует решать совместно, как систему уравнений для функции распределения электронов проводимости $f(\mathbf{k})$ и фононов N_q . Однако, если предположить, что частота фонон-фононных столкновений намного больше, чем частота столкновений фононов с носителями заряда, то релаксация фононов будет определяться в основном рассеянием фононов друг на друге. При этом, если ввести время релаксации длинноволновых акустических фононов $\tau_\phi(q)$, т. е. если столкновительный член представить как

$$(\partial N_q / \partial t)_{\text{ст}} = - (N_q - N_q^{(0)}) / \tau_\phi(q), \quad (17.4)$$

то уравнение (17.4) с учетом (17.3) будет иметь вид

$$v_g \nabla_{\mathbf{r}} N_q = (N_q - N_q^{(0)}) / \tau_\phi(q), \quad (17.5)$$

где $N_q^{(0)} = [\exp(\hbar\omega_q/k_0T) - 1]^{-1}$ — равновесная функция распределения фононов.

Таким образом, при предположении о том, что фонон-электронные столкновения в релаксации фононов не играют роли, неравновесная функция распределения фононов N_q находится из самостоятельного уравнения (17.5). По-видимому, это предположение хорошо выполняется в полупроводниках, где концентрация носителей не так велика.

Для неравновесной функции распределения положим

$$N_q = N_q^{(0)} + N'_q, \quad (17.6)$$

где N'_q — малая неравновесная добавка к функции распределения фононов, которая, естественно, пропорциональна градиенту температуры. Подставляя (17.6) в (17.5), в линейном приближении получим

$$N'_q = (v_0 \tau_\Phi / q) (dN_q^{(0)} / dT) (q \nabla T). \quad (17.7)$$

Подставим неравновесные функции распределения электронов проводимости (9.4) и фононов (17.6) в правую часть (17.1). Тогда кинетическое уравнение (17.1) символически примет вид *)

$$\hat{D}f = I(f_1) + I(N_q^{(0)}, f_1) + I(N'_q, f_0) + I(N'_q, f_1). \quad (17.8)$$

Здесь последний член соответствует рассеянию неравновесных электронов на неравновесных фононах. Этим членом можно пренебречь как величиной второго порядка малости. В правой части первые два члена есть интеграл столкновения неравновесных электронов на примесях и на равновесных фононах. В упругом приближении они выражаются эффективным временем релаксации электронов проводимости τ , т. е.

$$I(f_1) + I(N_q^{(0)}, f_1) = -f_1 / \tau, \quad (17.9)$$

где τ — эффективное время релаксации, описывающее столкновения электронов проводимости с примесями и равновесными фононами, которое вычислено в §§ 10 и 11. Если примесное рассеяние отсутствует, то $\tau = \tau_{ак}$.

Третий член в правой части (17.8) соответствует взаимодействию равновесных электронов с неравновесными фононами и определяет эффект увлечения электронов фононами, его мы обозначим как $I(N'_q, f_0) = I_\Phi(N'_q, f_0)$.

В результате кинетическое уравнение электронов проводимости (17.8) в линейном приближении с учетом эффекта увлечения электронов фононами приобретает вид

$$\hat{D}f = -f_1 / \tau + I_\Phi(N'_q, f_0). \quad (17.10)$$

Теперь найдем явный вид $I_\Phi(N'_q, f_0)$. Учитывая (11.34) и (17.6) в правой части уравнения (8.11), для $I_\Phi(N'_q, f_0)$ получим выражение

$$I_\Phi(N'_q, f_0) = \sum_{k'q} w_1(q) N'_q [f_0(\mathbf{k}') - f_0(\mathbf{k})] \{ \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k + \hbar\omega_q) \delta_{k', k-q} + \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k - \hbar\omega_q) \delta_{k, k+q} \}, \quad (17.11)$$

которое справедливо для полупроводников с произвольной степенью вырождения.

*) При получении (17.8) мы использовали принцип детального равновесия (9.2), т. е. учли, что $I(f_0) + I(N_q^{(0)}, f_0) = 0$.

В случае рассеяния на пьезоакустических фононах $w_1(q)$ следует заменить на $w_{pz}(q)$ из (11.99).

Из (17.11) следует, что если пренебречь неупругостью взаимодействия электронов с фононами, то $I_\Phi(N'_q, f_0) = 0$, т. е. увлечение отсутствует. Поэтому мы должны частично учитывать неупругость, а именно, полагать, что

$$f_0(\mathbf{k}') = f_0(\mathbf{k}) + (\partial f_0(\mathbf{k})/\partial \varepsilon_k)(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k). \quad (17.12)$$

Учтем закон сохранения энергии $\varepsilon_{k'} = \varepsilon_k \mp \hbar\omega_q$ в этом выражении и после этого пренебрежем энергией фононов в аргументе δ -функций в (17.11). В результате из (17.11) имеем

$$I_\Phi(N'_q, f_0) = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} w_1(q) N'_q \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_k} \hbar\omega_q (\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}} - \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{q}}) \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k). \quad (17.13)$$

Во второй сумме в (17.13) заменим $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ и, согласно (17.7), учтем, что $N'_{-\mathbf{q}} = -N'_q$. Тогда получим

$$I_\Phi(N'_q, f_0) = \sum 2w_1(q) N'_q \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_k} \hbar\omega_q \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (17.14)$$

Подставим (17.7) в (17.14) и учтем, что $\omega_q = v_0 q$ и $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{k}/m(\varepsilon)$. В результате (17.14) легко можно представить в виде

$$I_\Phi(N'_q, f_0) = (\partial f_0/\partial \varepsilon)(\mathbf{v}\Phi_{0\Phi}(\varepsilon)), \quad (17.15)$$

где

$$\Phi_{0\Phi}(\varepsilon) = -A_\Phi(\varepsilon) k_0 \nabla T \quad (17.16)$$

есть статистическая сила увлечения, а безразмерная величина

$$A_\Phi(\varepsilon) = \frac{2m(\varepsilon)v_0^2}{k_0} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} w_1(q) \tau_\Phi(q) \frac{dN_q^{(0)}}{dT} \left(1 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{k^2}\right) \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k) \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}' - \mathbf{k}}. \quad (17.17)$$

Если использовать явное выражение $\widehat{D}f$ как левую часть (8.11), то в линейном приближении кинетическое уравнение (17.10) можно представить в виде

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{r}} f_0 - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \nabla_{\mathbf{k}} f_0 - \frac{e}{\hbar c} [\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{H}] \nabla_{\mathbf{k}} f_1 = -\frac{f_1}{\tau(k)} + I_\Phi(N'_q, f_0). \quad (17.18)$$

Выищем решение этого уравнения при отсутствии магнитного поля $H=0$. В этом случае, согласно (9.13), (9.14) и (17.15), из (17.18) для неравновесной добавки к функции распределения электронов проводимости $f_1(\mathbf{k})$ получим выражение

$$f_1(\mathbf{k}) = -\tau(k) (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \Phi'_0(\varepsilon)) (\partial f_0/\partial \varepsilon), \quad (17.19)$$

где

$$\Phi'_0(\varepsilon) = -e\mathbf{E} - \frac{(\varepsilon - \xi)}{k_0 T} k_0 \nabla T - A_\Phi(\varepsilon) k_0 \nabla T \quad (17.20)$$

— обобщенная возмущающая сила с учетом эффекта увлечения.

Видно, что эта сила от (9.16) отличается наличием последнего члена, который связан с эффектом увлечения электронов проводимости дрейфующей фононной системой против градиента температуры. Получается, что, когда система электронов проводимости взаимодействует с дрейфующей фононной системой, то на нее действует *статистическая сила увлечения*, равная $-A_{\Phi}(\epsilon)k_0\nabla T$, где безразмерная величина $A_{\Phi}(\epsilon)$, как видно из (17.17), зависит от константы электрон-фононного и фонон-фононного взаимодействия.

При наличии магнитного поля ($H \neq 0$) решение (17.18) можно искать по аналогии с (17.19) в виде

$$f_1(\mathbf{k}) = -\tau(k) (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \Phi'(\epsilon)) (\partial f_0 / \partial \epsilon), \quad (17.21)$$

где $\Phi'(\epsilon)$ — обобщенная возмущающая сила в магнитном поле дается формулой (9.50), только в ней $\Phi_0(\epsilon)$ следует заменить на $\Phi'_0(\epsilon)$ из (17.20), т. е.

$$\Phi'(\epsilon) = \frac{1}{1 + \nu^2} \left\{ \Phi'_0 + \frac{e}{c} \frac{\tau}{m} [\mathbf{H} \Phi'_0] + \left(\frac{e\tau}{mc} \right)^2 \mathbf{H} (\mathbf{H} \Phi'_0) \right\}. \quad (17.22)$$

Это выражение совместно с (17.21), (17.20) и (9.4) определяет решение кинетического уравнения в полупроводниках с произвольной изотропной зоной в произвольном магнитном поле с учетом эффекта увлечения электронов проводимости фононами.

2. Вычисление кинетических коэффициентов, связанных с эффектом увлечения. Решение (17.22) дает возможность вычислить все кинетические коэффициенты с учетом неравновесности фононов. Мы здесь вычислим только термо-э. д. с. $\alpha_{\Phi}(H)$ и коэффициент Нернста — Эттингсгаузена Q_{Φ} . Выберем ось z вдоль магнитного поля $\mathbf{H}(0, 0, H)$ и соответствующие компоненты (17.22) подставим в (13.3). Тогда для компонент плотности тока с учетом увлечения получим

$$\begin{aligned} j_x &= \sigma_{11} E_x - \sigma_{12} E_y - \beta'_{11} \nabla_x T + \beta'_{12} \nabla_y T, \\ j_y &= \sigma_{12} E_x + \sigma_{11} E_y - \beta'_{12} \nabla_x T - \beta'_{11} \nabla_y T, \end{aligned} \quad (17.23)$$

где

$$\beta'_{11} = \beta_{11} + \beta_{11}^{(\Phi)}; \quad \beta'_{12} = \beta_{12} + \beta_{12}^{(\Phi)}, \quad (17.24)$$

σ_{11} , σ_{12} и β_{11} , β_{12} даются формулами (13.23) и (13.24), а часть тензоров

$$\beta_{11}^{(\Phi)} = -nek_0 \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{A_{\Phi}(\epsilon)}{1 + \nu^2} \right\rangle, \quad \beta_{12}^{(\Phi)} = -nek_0 \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{\nu A_{\Phi}(\epsilon)}{1 + \nu^2} \right\rangle \quad (17.25)$$

определяется увлечением, $A_{\Phi}(\epsilon)$ — дается (17.17); усреднение имеет тот же смысл, что и (13.21).

Термо-э. д. с. α_{Φ} и коэффициент Q_{Φ} , связанные с эффектом увлечения, в соответствии с (13.17) и (13.16), определяются

следующим образом:

$$\alpha_{\Phi} = (\sigma_{11}\beta_{11}^{(\Phi)} + \sigma_{12}\beta_{12}^{(\Phi)}) (\sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2)^{-1}, \quad (17.26)$$

$$Q_{\Phi} = H^{-1} (\sigma_{12}\beta_{11}^{(\Phi)} - \sigma_{11}\beta_{12}^{(\Phi)}) (\sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2)^{-1} \quad (17.27)$$

или в более явном виде [80]

$$\alpha_{\Phi} = -\frac{k_0}{e} \frac{1}{D} \left[\left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1+v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{A_{\Phi}(\epsilon)}{1+v^2} \right\rangle + \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1+v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v A_{\Phi}(\epsilon)}{1+v^2} \right\rangle \right], \quad (17.28)$$

$$Q_{\Phi} = \frac{k_0}{e} \frac{1}{HD} \left[\left\langle \frac{\tau}{m} \frac{1}{1+v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v A_{\Phi}(\epsilon)}{1+v^2} \right\rangle - \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v}{1+v^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{A_{\Phi}(\epsilon)}{1+v^2} \right\rangle \right], \quad (17.29)$$

где D — дается (13.30).

Видно, что для вычисления $\alpha_{\Phi}(H, T)$ и $Q_{\Phi}(H, T)$ необходимо знать явный вид $A_{\Phi}(\epsilon)$. Для этого, как следует из (17.17), надо исходить из конкретных механизмов взаимодействия электронов проводимости с фононами $w_1(q)$ и механизма релаксации фононов $\tau_{\Phi}(q)$.

Для релаксации длинноволновых фононов известны три неэлектронных механизма:

1) механизм релаксации Херринга [47]

$$\tau_{\Phi}^{-1}(q) = \Lambda_2 q^2, \quad \Lambda_2 \approx (k_0 T)^3 / \rho \hbar^2 v_0^3; \quad (17.30)$$

2) механизм релаксации Ландау — Румера [48] и Симонса [49]

$$\tau_{\Phi}^{-1}(q) = \Lambda_1 q, \quad \Lambda_1 \approx (\hbar/\rho)(k_0 T/\hbar v_0)^4; \quad (17.31)$$

3) рассеяние фононов на границах образца

$$\tau_{\Phi}^{-1} \approx v_0/L, \quad (17.32)$$

что может иметь место при достаточно низких температурах. Здесь L — размер образца, v_0 — скорость звука, ρ — плотность.

Мы здесь рассмотрим два механизма взаимодействия электронов проводимости с акустическими фононами: взаимодействие через деформационный потенциал и пьезопотенциал.

В случае взаимодействия электронов проводимости с акустическими фононами через деформационный потенциал, (11.36) подставим в (17.17). Тогда для указанных механизмов релаксации фононов в (17.30) — (17.32), соответственно, получим

$$A_{\Phi}(\epsilon) = (E_1^2/2\pi\hbar^3\rho\Lambda_2) (m^2(\epsilon)/k(\epsilon)), \quad (17.33)$$

$$A_{\Phi}(\epsilon) = (2E_1^2/3\pi\hbar^3\rho\Lambda_1) m^2(\epsilon), \quad (17.34)$$

$$A_{\Phi}(\epsilon) = (E_1^2/\pi\hbar^3\rho) (L/v_0) k(\epsilon) m^2(\epsilon). \quad (17.35)$$

При получении этих выражений из (17.17) мы положили, что $N_q^{(0)} \approx k_0 T / \hbar \omega_q = k_0 T / \hbar v_0 q$.

В случае взаимодействия электронов проводимости с акустическими фононами через пьезопотенциал в (17.17) вместо $w_1(q)$ подставим (11.99) с учетом (11.102). Тогда, используя (17.30) — (17.32), из (17.17) получим, что для механизма Херринга сила увлечения $A_\Phi(\epsilon)$ логарифмически расходится, а для механизма Ландау — Румера и Симонса

$$A_\Phi(\epsilon) = (e^2 v_0^2 \Pi_0^2 / 2\pi \kappa \hbar^2 \Lambda_1) (m^2(\epsilon) / k^2(\epsilon)), \quad (17.36)$$

а при рассеянии фононов на границах образца

$$A_\Phi(\epsilon) = (e^2 v_0^2 \Pi_0^2 / 4\pi \kappa \hbar^2) (L / v_0) (m^2(\epsilon) / k(\epsilon)). \quad (17.37)$$

Выражения (17.33) — (17.37), которые справедливы для произвольной изотропной зоны с законом дисперсии $k = k(\epsilon)$ и эффективной массой $m(\epsilon) = \hbar^2 k (dk/d\epsilon)$, совместно с (1.28) и (17.29) дают возможность анализировать все особенности термо-э. д. с. увлечения $\alpha_\Phi(H, T)$ и $Q_\Phi(H, T)$ в полупроводниках. Отметим некоторые из этих особенностей.

Из (17.28) и (17.29) следует, что если электроны проводимости полностью вырождены, то $Q_\Phi = 0$, а α_Φ отлична от нуля и независимо от наличия магнитного поля равна

$$\alpha_\Phi(T) = -(k_0/e) A_\Phi(T, \zeta), \quad (17.38)$$

где ζ — граница Ферми. Таким образом, термо-э. д. с. увлечения α_Φ отлична от нуля даже если не учесть температурное размытие границы Ферми, тогда как Q_Φ , как обычно, определяется этим размытием.

Поскольку $A_\Phi \sim \Lambda_1^{-1} \sim T^{-4}$ или $A_\Phi \sim \Lambda_2^{-1} \sim T^{-3}$, то при низких температурах в вырожденных образцах α_Φ может доминировать над обычной диффузионной термо-э. д. с. $\alpha \sim T$. Поэтому, измеряя $\alpha_\Phi(T)$ при низких температурах, из (17.38) можно определить $A_\Phi(T, \zeta)$. Следовательно, найти силу увлечения электронов на границе Ферми фононами. При более низких температурах, где основную роль играет рассеяние фононов, на границе образца $A_\Phi(\zeta)$ не зависит от температуры и $\alpha_\Phi(T)$ насыщается. Однако при очень низких температурах, когда выполняется условие $k_0 T \ll \hbar \omega_q$, число фононов $N_q^{(0)} \sim \exp(-\hbar \omega_q / k_0 T)$ и, как видно из (17.16) и (17.17) сила увлечения, и следовательно α_Φ , стремится к нулю при $T \rightarrow 0$.

Из (17.34), (17.28) и (17.29) видно, что если зона параболическая ($m(\epsilon) = m_n = \text{const}$), то в случае действия механизма Ландау — Румера и Симонса ($\tau_\Phi^{-1} \sim q$), независимо от наличия магнитного поля и степени вырождения электронов проводимости,

$Q_\phi = 0^*$), а термо-э.д.с.

$$\alpha_\phi(T) = -\frac{k_0}{e} \frac{2}{3\pi} \frac{E_1^2 m^2}{\hbar^3 \Lambda_1 \rho}. \quad (17.39)$$

Если зона непараболична, т. е. $m(\epsilon)$ зависит от энергии, то коэффициент Q_ϕ при всех механизмах релаксации фононов отличен от нуля. Из того, что $A_\phi(\epsilon) \sim m^2(\epsilon)$, следует, что непараболичность зоны играет важную роль в эффекте увлечения носителей фононами.

Из (17.28) легко показать, что в области сильных магнитных полей ($\nu \gg 1$) α_ϕ не зависит от механизма релаксации электронов проводимости, так же как и обычная термо-э. д. с., но сильно зависит от температуры и определяется только средней силой увлечения, а именно, в этом случае

$$\alpha_\phi(\infty, T) = -(k_0/e) \langle A_\phi(\epsilon) \rangle. \quad (17.40)$$

Таким образом, измеряя α_ϕ при сильных магнитных полях ($\nu \gg 1$), из (17.40) непосредственно можно найти среднюю силу увлечения $\langle A_\phi(\epsilon) \rangle$, тем самым оценить константу взаимодействия.

При отсутствии магнитного поля ($\nu = 0$) из (17.28) для термо-э. д. с. увлечения имеем

$$\alpha_\phi(0) = -(k_0/e) \langle A_\phi(\epsilon) \tau/m \rangle / \langle \tau/m \rangle, \quad (17.41)$$

а для отношения $\alpha_\phi(0)/\alpha(0)$ получим

$$\frac{\alpha_\phi(0)}{\alpha(0)} = \frac{\langle \tau/m A_\phi(\epsilon) \rangle / \langle \tau/m \rangle}{\langle x\tau/m \rangle / \langle \tau/m \rangle - \eta}, \quad (17.42)$$

где $\alpha(0)$ — обычная диффузионная термо-э. д. с. при $H = 0$. Очевидно, это отношение с ростом степени вырождения увеличивается.

В слабых магнитных полях ($\nu \ll 1$) из (17.29) для Q_ϕ следует

$$Q_\phi = (k_0 u / e c) a_r \lambda_\phi(T), \quad (17.43)$$

где $u = e \langle \tau/m \rangle$ — подвижность, a_r дается (15.3), а

$$\lambda_\phi(T) = \frac{\langle (\tau/m)^2 A_\phi(\epsilon) \rangle}{\langle (\tau/m)^2 \rangle} - \frac{\langle \tau/m A_\phi(\epsilon) \rangle}{\langle \tau/m \rangle}. \quad (17.44)$$

Если возьмем отношение (17.43) к обычному коэффициенту Q_0 (15.49), то получим

$$Q_\phi / Q_0 = \lambda_\phi / \lambda_1, \quad (17.45)$$

где λ_1 дается (15.50).

*) Отметим, что этот результат имеет место только в том случае, если электроны взаимодействуют с неравновесными акустическими фононами через потенциал деформации. В случае взаимодействия через пьезопотенциал, как видно из (17.36) и (17.28), $Q_\phi \neq 0$ при механизме $\tau_\phi^{-1} \sim q$ и для параболической зоны.

Отметим следующее обстоятельство. Из (15.53) видно, что при рассеянии на акустических фононах ($r=0$) $\lambda_1 < 0$. С другой стороны, используя (17.33), непосредственным вычислением можно показать, что $\lambda_\phi > 0$, т. е. Q_ϕ и Q_0 имеют противоположные знаки. Следовательно, с понижением температуры Q должен менять свой знак, так как в области низких температур Q будет определяться увлечением электронов проводимости фононами. Такое же изменение знака Q должно иметь место и при взаимодействии носителей с акустическими фононами через пьезопотенциал.

Глава 5

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С АНИЗОТРОПНОЙ НЕПАРАБОЛИЧЕСКОЙ ЗОНОЙ. АНИЗОТРОПНОЕ РАССЕЯНИЕ

В предыдущей главе изложена классическая теория явлений переноса в полупроводниках с изотропной зоной. Однако, как известно, во многих полупроводниках, таких как электронный германий и кремний, халькогениды свинца, теллурид висмута, селенид таллия и т. д., энергетическая зона анизотропна. Теория кинетических эффектов в таких полупроводниках развита в ряде работ [1—21]. В некоторых из них [1—3, 5—7, 9—13] рассмотрены кинетические эффекты только с учетом анизотропии зоны в параболическом приближении (эффективная масса — тензор с независимыми от энергии компонентами), а рассеяние считалось изотропным (скалярное время релаксации). В приближении скалярного времени релаксации анизотропная непараболическая зона рассмотрена в работе [19].

Однако рассеяние носителей заряда в полупроводниках может иметь существенно анизотропный характер. *Анизотропным* называется рассеяние в случае, когда вероятность перехода $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ зависит как от направления волнового вектора \mathbf{k} в начальном состоянии, так и в конечном состоянии \mathbf{k}' , в отдельности, тогда как в случае *изотропного рассеяния* $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ зависит только от угла между \mathbf{k} и \mathbf{k}' . Анизотропия рассеяния, как отмечено в [16], может быть обусловлена различными причинами: анизотропией рассеивающего потенциала (пьезоэлектрические полупроводники, рассеяние на ионах в кристаллах с анизотропией диэлектрической постоянной), анизотропией фононного спектра и, наконец, анизотропией энергетического спектра носителей заряда.

В случае анизотропного спектра рассеяние носителей заряда определяется не одной константой деформационного потенциала, а тензором констант деформационного потенциала, не скалярной эффективной массой, а компонентами тензора эффективной массы. Теория анизотропного рассеяния именно для этого случая была развита в работах Херринга и Фогта [4], Самойловича с сотрудниками [14, 15]. Результаты последних работ подробно изложены в монографии [16]. В этих работах вычисление компо-

ненты тензора времени релаксации в n -Ge и n -Si при рассеянии на акустических фононах и на ионах примеси.

Явления переноса в полупроводниках с анизотропным непараболическим законом дисперсии в приближении тензора времени релаксации рассмотрены в работах [17—19]. К таким полупроводникам относятся халькогениды свинца: PbTe, PbSe, PbS.

В данной главе коротко изложена теория электронных явлений переноса в полупроводниках с анизотропной зоной при анизотропном рассеянии описываемым тензором времени релаксации. Учтена непараболичность анизотропной зоны и предположено, что степень вырождения носителей заряда произвольна. Полученные здесь результаты применимы как к n -Ge, n -Si, так и к халькогенидам свинца: PbTe, PbSe и PbS.

§ 18. Решение кинетического уравнения для анизотропной зоны в приближении тензора времени релаксации

Рассмотрим для определенности электронный полупроводник со многими минимумами в энергетическом спектре, причем изоэнергетическая поверхность вблизи каждого минимума представляет собой эллипсоид общего вида, описываемого уравнением

$$B(\epsilon) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_{01}} + \frac{k_y^2}{m_{02}} + \frac{k_z^2}{m_{03}} \right), \quad (18.1)$$

где m_{0i} — компоненты эффективной массы на дне зоны проводимости, $B(\epsilon)$ — любая гладкая функция энергии ϵ . В частности, для n -Ge и n -Si $B(\epsilon) = \epsilon$, для халькогенидов свинца (PbTe, PbSe, PbS), согласно (3.39) $B(\epsilon) = \epsilon(1 + (\epsilon/\epsilon_g))$, а для всех указанных полупроводников $m_{01} = m_{02} = m_{0L}$, $m_{03} = m_{0\parallel}$, т. е. (18.1) является эллипсоидом вращения (см. § 3, п. 2, 6).

В главных осях эллипсоида, естественно, тензор эффективной массы будет диагонален:

$$m_{ik}^{-1} = m_i^{-1} \delta_{ik}, \quad (18.2)$$

где m_i — диагональные компоненты эффективной массы, связывающие компоненты скорости и импульса:

$$v_i = \hbar^{-1} (\partial \epsilon / \partial k_i) = \hbar k_i / m_i. \quad (18.3)$$

В общем случае $m_i^{-1} = (1/\hbar^2 k_i) (\partial \epsilon / \partial k_i)$ зависит от энергии и эта зависимость определяется функцией $B(\epsilon)$:

$$m_i(\epsilon) = m_{0i} (\partial B(\epsilon) / \partial \epsilon). \quad (18.4)$$

1. Решение кинетического уравнения. Если ограничиться упругим рассеянием ($\epsilon = \epsilon'$), то, согласно принципу детального равновесия (9.3), $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, и кинетическое уравнение

(8.11) можно переписать в виде

$$v \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} \left(\mathbf{E}_0 + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right) \nabla_{\mathbf{k}} f = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})), \quad (18.5)$$

решение которого представим как

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - (\partial f_0 / \partial \varepsilon) (\mathbf{v} \mathbf{P}(\varepsilon)), \quad (18.6)$$

где $\mathbf{P}(\varepsilon)$ — неизвестный вектор, подлежащий определению, имеет смысл импульса обобщенной силы [см. формулы (9.40) и (9.38)].

Подставим (18.6) в правую часть (18.5) и введем обратный тензор времени релаксации $\hat{\tau}^{-1}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})) = \\ = - \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{P}(\varepsilon) \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (\mathbf{v}' - \mathbf{v}) \Rightarrow (\partial f_0 / \partial \varepsilon) (\mathbf{P}(\hat{\tau}^{-1} \mathbf{v})). \end{aligned} \quad (18.7)$$

Тогда в линейном приближении уравнение (18.5) примет вид

$$v \nabla_{\mathbf{r}} f_0 - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \nabla_{\mathbf{k}} f_0 + \frac{e}{\hbar c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{v} \mathbf{P}(\varepsilon)) = \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\mathbf{P}(\hat{\tau}^{-1} \mathbf{v})). \quad (18.8)$$

В системе, связанной с главными осями эллипсоида (18.1), тензор времени релаксации $\hat{\tau}$, в соответствии с (18.2), должен быть диагонален, т. е.

$$\tau_{ik} = \tau_i \delta_{ik}. \quad (18.9)$$

Преобразуем множитель $\nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{v} \mathbf{P})$ в (18.8). Для этого введем единичный вектор \mathbf{n} в \mathbf{k} -пространстве. Тогда

$$\nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{v} \mathbf{P}) = \sum_{\alpha \beta} n_{\alpha} \frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} (v_{\beta} P_{\beta}) = \sum_{\alpha \beta} n_{\alpha} \left(P_{\beta} \frac{\partial v_{\beta}}{\partial k_{\alpha}} + v_{\beta} \frac{\partial P_{\beta}}{\partial k_{\alpha}} \right), \quad (18.10)$$

где n_{α} — компоненты единичного вектора в \mathbf{k} -пространстве.

Если учтем (18.3) и $\partial v_{\beta} / \partial k_{\alpha} = (\hbar / m_{\beta}) \delta_{\alpha \beta}$, то (18.10) можно представить в виде

$$\nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{v} \mathbf{P}) = \hbar (\hat{\mathbf{m}}^{-1} \mathbf{P}) + \hbar \mathbf{v} \sum_{\beta} v_{\beta} (\partial P_{\beta} / \partial \varepsilon), \quad (18.11)$$

где $\hat{\mathbf{m}}^{-1}$ — диагональный тензор обратной эффективной массы (18.2).

Подставляя (18.11) в (18.8) и учитывая (9.13) и (9.14), для вектора $\mathbf{P}(\varepsilon)$ получим уравнение

$$v \Phi_0 + (e/c) \mathbf{v} [\mathbf{H} (\hat{\mathbf{m}}^{-1} \mathbf{P})] = (\mathbf{P}(\hat{\tau}^{-1} \mathbf{v})), \quad (18.12)$$

где Φ_0 — обобщенная возмущающая сила (9.16).

Для решения векторного уравнения (18.12) удобно $\mathbf{P}(\varepsilon)$ представить в виде

$$\mathbf{P}(\varepsilon) = (\hat{\tau}^{-1} \Phi(\varepsilon)). \quad (18.13)$$

Тогда с учетом диагональности тензора $\hat{\tau}$ (18.9), правая часть (18.12) будет иметь вид

$$(\mathbf{P}(\hat{\tau}^{-1}\mathbf{v})) = (\Phi\mathbf{v}). \quad (18.14)$$

Учитывая последние два соотношения и сокращая на $\mathbf{v} \neq 0$, из (18.12) для $\Phi(\epsilon)$ получим уравнение [ср. с (9.47)]

$$\Phi_0 + \frac{e}{c} [\widehat{\mathbf{Hm}}^{-1}(\hat{\tau}\Phi)] = \Phi. \quad (18.15)$$

Решая это уравнение с учетом диагональности тензоров \hat{m} и $\hat{\tau}$ (18.2) и (18.9), можно найти компоненты вектора $\Phi(\epsilon)$. В результате для нужного нам вектора $\mathbf{P}(\epsilon)$ (18.13) имеем компактное решение

$$\mathbf{P}(\epsilon) = \frac{1}{1 + v_0^2} \left\{ \hat{\tau}\Phi_0 + \frac{e}{c} \hat{\tau} [\widehat{\mathbf{Hm}}^{-1}(\hat{\tau}\Phi_0)] + \frac{e^2}{c^2} \frac{|\hat{\tau}|}{|\hat{\mathbf{m}}|} (\mathbf{H}\Phi_0)(\widehat{\mathbf{mH}}) \right\}, \quad (18.16)$$

где

$$v_0^2 = \frac{e^2}{c^2} \frac{|\hat{\tau}|}{|\hat{\mathbf{m}}|} (\widehat{\mathbf{mH}})(\tau^{-1}\mathbf{H}), \quad (18.17)$$

а $|\hat{\tau}| = \tau_1\tau_2\tau_3$, $|\hat{\mathbf{m}}| = m_1m_2m_3$ — определители диагональных тензоров времени релаксации $\hat{\tau}$ и эффективной массы $\hat{\mathbf{m}}$.

Отметим, что в случае скалярных эффективной массы и времени релаксации (18.16) сводится к известному решению (9.40) с (9.50).

2. Плотность тока. Решение (18.16) дает возможность вычислить плотности тока и потока энергии в самом общем случае анизотропного спектра и рассеяния в произвольном магнитном поле.

Исходя из общего выражения (8.1), i -ю компоненту плотности тока для спектра (18.1) можно привести к виду

$$j_i = - \frac{e(8m_{01}m_{02}m_{03})^{1/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) B^{3/2}(\epsilon) \frac{P_i(\epsilon)}{m_i(\epsilon)} d\epsilon, \quad (18.18)$$

при этом мы деформировали эллипсоид (18.1) заменой $k_i = \sqrt{m_{0i}}k'_i$ и перешли к интегрированию по энергии, учитывая тот факт, что P_i и m_i зависят от ϵ .

Введем формулу усреднения для анизотропного спектра (18.1):

$$\langle A(\epsilon) \rangle = \frac{(8m_{01}m_{02}m_{03})^{1/2}}{3\pi^2\hbar^3 n_0} \int \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) B^{3/2}(\epsilon) A(\epsilon) d\epsilon, \quad (18.19)$$

где

$$n_0 = \frac{(8m_{01}m_{02}m_{03})^{1/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) B^{3/2}(\epsilon) d\epsilon \quad (18.20)$$

есть концентрация носителей заряда в одной долине со спектром

(18.1). Отметим, что в случае изотропной зоны (18.19) сводится к формуле усреднения (13.21).

Тогда (18.18) имеет следующий символический вид:

$$j_i = -en_0 \langle P_i(\epsilon)/m_i(\epsilon) \rangle. \quad (18.21)$$

Эта формула имеет ясный физический смысл: компоненты плотности тока определяются средним соответствующих компонент дрейфовой скорости, так как P_i есть компоненты импульса силы, вызывающей дрейф, а P_i/m_i — скорость дрейфа.

Аналогичным образом, в силу (8.2), можно также вычислить компоненты плотности потока энергии.

§ 19. Тензоры проводимости в полупроводниках с анизотропным законом дисперсии

1. Тензоры проводимости в главных осях эллипсоида. Используя решение (18.16) из (18.21) можно найти явный вид обобщенного закона Ома в системе координат, связанной с главными осями одного эллипсоида (18.1):

$$j_i = \sigma_{ik} E_k + \beta_{ik} \nabla_k T \quad (i, k = 1, 2, 3), \quad (19.1)$$

т. е. можно определить компоненты тензоров проводимости σ_{ik} и β_{ik} в главных осях одного эллипсоида, где E_k — компоненты градиента электрохимического потенциала, а $\nabla_k T$ — градиент температуры.

Ограничимся областью слабых магнитных полей ($v_0 \ll 1$). Тогда в (18.16) можно положить $(1 + v_0^2)^{-1} \approx 1 - v_0^2$. Подставляя (18.16) в (18.21), получим явный вид соотношения (19.1). В результате для компоненты тензора проводимости σ_{ik} в главных осях одного эллипсоида с точностью до $\sim H^2$ получим

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= e^2 n_0 \langle \tau_1/m_1 \rangle - \frac{e^3 n_0}{c^2} \left(\left\langle \frac{\tau_1^2 \tau_3}{m_1^2 m_3} \right\rangle H_2^2 + \left\langle \frac{\tau_1^2 \tau_2}{m_1^2 m_2} \right\rangle H_3^2 \right), \\ \sigma_{12} &= -\frac{e^2 n_0}{c} \left\langle \frac{\tau_1 \tau_2}{m_1 m_2} \right\rangle H_3 + \frac{e^3 n_0}{c^2} \left\langle \frac{\tau_1 \tau_2 \tau_3}{m_1 m_2 m_3} \right\rangle H_1 H_2, \\ \sigma_{13} &= \frac{e^2 n_0}{c} \left\langle \frac{\tau_1 \tau_3}{m_1 m_3} \right\rangle H_2 + \frac{e^3 n_0}{c^2} \left\langle \frac{\tau_1 \tau_2 \tau_3}{m_1 m_2 m_3} \right\rangle H_1 H_3, \end{aligned} \quad (19.2)$$

$$\sigma_{22} = e^2 n_0 \left\langle \frac{\tau_2}{m_2} \right\rangle - \frac{e^3 n_0}{c^2} \left(\left\langle \frac{\tau_2^2 \tau_3}{m_2^2 m_3} \right\rangle H_1^2 + \left\langle \frac{\tau_1 \tau_2^2}{m_1 m_2^2} \right\rangle H_3^2 \right),$$

$$\sigma_{23} = -\frac{e^2 n_0}{c} \left\langle \frac{\tau_2 \tau_3}{m_2 m_3} \right\rangle H_1 + \frac{e^3 n_0}{c^2} \left\langle \frac{\tau_1 \tau_2 \tau_3}{m_1 m_2 m_3} \right\rangle H_2 H_3,$$

$$\sigma_{33} = e^2 n_0 \langle \tau_3/m_3 \rangle - \frac{e^3 n_0}{c^2} \left(\left\langle \frac{\tau_2 \tau_3^2}{m_2 m_3^2} \right\rangle H_1^2 + \left\langle \frac{\tau_1 \tau_3^2}{m_1 m_3^2} \right\rangle H_2^2 \right),$$

$$\sigma_{21}(\mathbf{H}) = \sigma_{12}(-\mathbf{H}), \quad \sigma_{31}(\mathbf{H}) = \sigma_{13}(-\mathbf{H}), \quad \sigma_{32}(\mathbf{H}) = \sigma_{23}(-\mathbf{H}),$$

где H_1, H_2, H_3 — компоненты вектора напряженности магнитного поля в главных осях эллипсоида.

Эти выражения упрощаются и тензор проводимости характеризуется только одним параметром анизотропии в том случае, когда все компоненты тензора эффективной массы и тензора времени релаксации имеют одинаковые зависимости от энергии и, кроме того, эллипсоиды (18.1) являются эллипсоидами вращения. Эти условия запишем в виде

$$\tau_i(\epsilon) = \tau_{0i} \tau^*(\epsilon), \quad m_i(\epsilon) = m_{0i} m^*(\epsilon), \quad (19.3)$$

где $\tau^*(\epsilon)$ и $m^*(\epsilon)$ — безразмерные величины, определяющие зависимости τ_i и m_i от энергии ϵ .

При этих условиях, которые выполняются для многих известных полупроводников, тензор (19.2) имеет простой вид

$$(\sigma_{ik}) = \begin{pmatrix} a_1 + a_3 (H_2^2 + \gamma H_3^2) & a_2 H_3 - a_3 H_1 H_2 & -\frac{a_2}{\gamma} H_2 - a_3 H_1 H_3 \\ -a_2 H_3 - a_3 H_1 H_2 & a_1 + a_3 (H_1^2 + \gamma H_3^2) & \frac{a_2}{\gamma} H_1 - a_3 H_2 H_3 \\ \frac{a_2}{\gamma} H_2 - a_3 H_1 H_3 & -\frac{a_2}{\gamma} H_1 - a_3 H_2 H_3 & \frac{a_1}{\gamma} + \frac{a_3}{\gamma} (H_1^2 + H_2^2) \end{pmatrix}. \quad (19.5)$$

Здесь

$$a_1 = e^2 n_0 \langle \tau_{\perp} / m_{\perp} \rangle, \quad a_2 = -\frac{e^3 n_0}{c} \langle \tau_{\perp}^2 / m_{\perp}^2 \rangle, \quad (19.6)$$

$$a_3 = -\frac{e^4 n_0}{c^2} \left\langle \frac{\tau_{\perp}^2 \tau_{\parallel}}{m_{\perp}^2 m_{\parallel}} \right\rangle,$$

а параметр

$$\gamma = (m_{0\parallel} / m_{0\perp}) (\tau_{0\perp} / \tau_{0\parallel}) \quad (19.7)$$

характеризует анизотропию спектра и рассеяния.

Термомагнитный тензор β_{ik} получается из (19.5), если заменить a_1, a_2, a_3 коэффициентами b_1, b_2, b_3 , соответственно,

$$b_1 = \frac{en_0}{T} \langle (\epsilon - \zeta) \tau_{\perp} / m_{\perp} \rangle, \quad b_2 = -\frac{en_0}{Tc} \langle (\epsilon - \zeta) \tau_{\perp}^2 / m_{\perp}^2 \rangle, \quad (19.8)$$

$$b_3 = -\frac{e^2 n_0}{Tc^2} \left\langle (\epsilon - \zeta)^2 \frac{\tau_{\perp}^2 \tau_{\parallel}}{m_{\perp}^2 m_{\parallel}} \right\rangle.$$

При получении (19.8) мы в (18.16) использовали явный вид возмущающей силы (9.16).

2. Тензор проводимости в фиксированной системе координат. Мы нашли явный вид тензора проводимости в слабом магнитном поле в главных осях одного эллипсоида (19.5). Однако в кубических полупроводниках, в которых зона анизотропна, экстрему-

мы находятся не в центре зоны Бриллюэна и поэтому их несколько. Такие структуры зоны получили название многоэллипсоидной или многодолинной модели (см. § 3).

Здесь в зависимости от расположения эллипсоидов в зоне Бриллюэна мы рассмотрим две модели, которые соответствуют структуре зоны проводимости реальных полупроводников.

Модель А — минимумы зоны проводимости находятся в направлениях [111] на границе зоны Бриллюэна в L -точках (см. рис. 4), причем изоэнергетические поверхности около минимумов представляют собой эллипсоиды вращения, с осью вращения, направленной по оси типа [111]. Эта модель реализуется в n -Ge и в соединениях халькогенидов свинца $PbTe$, $PbSe$ и PbS (см. § 3, п. 2 и 6). Отметим, что для n -Ge зона параболична (3.3), а для халькогенидов закон дисперсии непараболичен (3.39). Число минимумов в этой модели равно восьми, а число полных эллипсоидов, приходящих в зону Бриллюэна, равно четырем.

Модель В — минимумы зоны проводимости расположены в направлениях [100] внутри зоны Бриллюэна (см. рис. 5), причем изоэнергетические поверхности около каждого из 6 минимумов представляют собой эллипсоиды вращения с осью вращения, направленной по оси типа [100]. Эта модель реализуется в n -Si, в котором закон дисперсии около каждого минимума имеет вид (3.3).

Предположим, что процессы рассеяния, связанные с перебором электрона проводимости из одного минимума в другой, не имеют место, т. е. не учтем междолинные переходы. В этом приближении токи для каждого эллипсоида независимы и полный ток представляет собой сумму токов, обусловленных отдельными минимумами.

Для того, чтобы учесть вклады всех эллипсоидов и найти полный тензор проводимости, определим тензор проводимости в *фиксированной системе координат*, оси которой направлены по ребрам куба элементарной ячейки. Для этого преобразуем (19.5) соответствующим образом в эту систему и просуммируем вклады от всех эллипсоидов. Этот этап необходим, потому что расположения эллипсоидов нам известны только в фиксированной системе.

При суммировании вкладов отдельных эллипсоидов следует учесть, что полярный θ и азимутальный φ углы, определяющие направления оси вращения эллипсоидов, принимают следующие значения:

для модели А

$$\cos \theta = 1/\sqrt{3}, \quad \varphi = (2n + 1)\pi/4, \quad n = 0, 1, 2, 3; \quad (19.9)$$

для модели В

$$\begin{aligned} \theta = \varphi = 0; \quad \theta = \pi, \quad \varphi = 0; \quad \theta = \pi/2, \quad \varphi = 0, \\ \theta = \pi/2, \quad \varphi = \pi, \quad \theta = \varphi = \pi/2, \quad \theta = \pi/2, \quad \varphi = 3\pi/2. \end{aligned} \quad (19.10)$$

В результате для полного тензора проводимости в фиксиро-

ванной системе координат получим выражение

$$(\sigma_{ik}) = \begin{pmatrix} \sigma_0 + \sigma_1 (H_y^2 + H_z^2) + \sigma_2 H_x^2 & \sigma_3 H_z + \sigma_4 H_x H_y & -\sigma_3 H_y + \sigma_4 H_x H_z \\ -\sigma_3 H_z + \sigma_4 H_x H_y & \sigma_0 + \sigma_1 (H_x^2 + H_z^2) + \sigma_2 H_y^2 & \sigma_3 H_x + \sigma_4 H_y H_z \\ \sigma_3 H_y + \sigma_4 H_x H_z & -\sigma_3 H_x + \sigma_4 H_y H_z & \sigma_0 + \sigma_1 (H_x^2 + H_y^2) + \sigma_2 H_z^2 \end{pmatrix}; \quad (19.11)$$

здесь H_x, H_y, H_z — компоненты вектора напряженности магнитного поля в фиксированной системе. Введены обозначения для модели А:

$$\sigma_0 = (4a_1/3\gamma) (1 + 2\gamma), \quad \sigma_1 = (4a_3/9\gamma) (2 + 5\gamma + 2\gamma^2), \quad (19.12)$$

$$\sigma_2 = (8a_3/9\gamma) (1 - \gamma)^2, \quad \sigma_3 = (4a_2/3\gamma) (2 + \gamma), \quad \sigma_4 = -\sigma_1;$$

для модели В:

$$\sigma_0 = (2a_1/\gamma) (1 + 2\gamma), \quad \sigma_1 = (2a_3/\gamma) (1 + \gamma + \gamma^2), \quad \sigma_2 = 0, \quad (19.13)$$

$$\sigma_3 = (2a_2/\gamma) (2 + \gamma), \quad \sigma_4 = -6a_3.$$

Аналогично преобразуется тензор β_{ik} .

3. Тензоры проводимости в подвижной системе координат. Для того чтобы найти кинетические коэффициенты для произвольного направления магнитного поля, тока и градиента температуры, нам нужно знать явный вид тензоров проводимости в *подвижной системе координат*, оси которой произвольным образом направлены в пространстве относительно кристаллографических осей.

Подвижная система получается из фиксированной следующим образом: а) совершаем поворот фиксированной системы вокруг оси z на угол φ ; полученную систему назовем (x', y', z) ; б) совершаем поворот новой системы вокруг оси y' на угол θ ; в результате получим систему (x'', y', z') ; в) совершаем поворот вокруг x'' на угол ψ . Легко показать, что в этом случае матрица преобразования фиксированной системы к подвижной имеет вид

$$\begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi & \cos \theta \sin \varphi & -\sin \theta \\ -\cos \varphi \sin \theta \sin \psi - \sin \varphi \cos \psi & \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \sin \theta \sin \psi & -\cos \theta \sin \psi \\ \sin \theta \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \sin \psi & \sin \varphi \cos \psi \sin \theta + \cos \varphi \sin \psi & \cos \theta \cos \psi \end{pmatrix}. \quad (19.14)$$

Отметим, что при повороте осей вышеуказанную последовательность необходимо соблюдать, так как все последующие результаты справедливы именно для такой последовательности.

Пусть ось z подвижной системы совпадает с направлением магнитного поля \mathbf{H} , а ось x с направлением электрического тока (в случае гальваномагнитных явлений) или градиента температуры (в случае термомагнитных явлений). Тогда все заданные направления магнитного поля и тока (или градиента температу-

ры) мы можем получить путем выбора соответствующих углов поворота. Например, допустим, нам надо знать кинетические коэффициенты в случае, когда \mathbf{H} направлено по оси $[\bar{1}10]$, а ток (или градиент температуры) — по $[\bar{1}10]$. Для этого фиксированную систему нужно повернуть так, чтобы ее ось совпала с направлением $[\bar{1}10]$, а ось x — с $[\bar{1}10]$. Легко представить, что для получения требуемых результатов в окончательных формулах достаточно положить $\varphi = \pi/4$, $\theta = 0$, $\psi = \pi/2$. Таким путем все возможные варианты можно сразу получить из общих окончательных выражений.

Используя матрицу преобразования (19.14), можно показать, что тензор проводимости σ_{ik} в подвижной системе координат имеет вид (напомним, что магнитное поле H направлено по оси z подвижной системы)

$$(\sigma_{ik}) = \begin{pmatrix} \sigma_0 + q_1 H^2 & \sigma_3 H + 0(H^2) & 0(H^2) \\ -\sigma_3 H + 0(H^2) & \sigma_0 + q_2 H^2 & 0(H^2) \\ 0(H^2) & 0(H^2) & \sigma_0 + q_3 H^2 \end{pmatrix}, \quad (19.15)$$

где

$$q_1 = \sigma_1 - (\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_4)\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi), \quad (19.16)$$

$$q_2 = \sigma_1 - (\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_4)\sigma_{22}(\varphi, \theta, \psi), \quad (19.17)$$

$$q_3 = \sigma_2 + (\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_4)\sigma_{33}(\varphi, \theta, \psi), \quad (19.18)$$

$$\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi) = (\cos^2 \theta)/2 [(4 - \sin^2 2\varphi) \sin^2 \theta \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \sin^2 2\varphi - 1/2 \sin \theta \sin \varphi \sin 2\psi], \quad (19.19)$$

$$\sigma_{22}(\varphi, \theta, \psi) = 1/2 [\sin^2 \theta \sin^2 2\varphi + \sin^2 2\psi - 1/16 (4 - \sin^2 2\varphi) \sin^2 2\theta \sin^2 2\psi - 1/4 (1 + 7 \sin^2 \theta) \sin^2 2\varphi \sin^2 2\psi + (1 + \sin^2 \theta) \sin \theta \sin 2\varphi \sin 2\psi \cos 2\psi \cos 2\varphi], \quad (19.20)$$

$$\sigma_{33}(\varphi, \theta, \psi) = 1/2 [(\sin^2 2\theta + \sin^4 \theta \sin^2 2\varphi) \cos^4 \psi + \sin^4 \psi \sin^2 2\varphi - 1/2 (3 \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi - 2) \sin^2 2\psi - (\sin^2 \psi - \sin^2 \theta \cos^2 \psi) \sin \theta \sin 2\psi \sin 4\varphi]. \quad (19.21)$$

Явный вид членов $0(H^2)$ в (19.15) мы не приводим, так как в этом приближении ($\sim H^2$) они не входят в окончательные выражения для кинетических коэффициентов.

В подвижной системе тензор β_{ik} также имеет вид (19.15), но в этом случае следует заменить a_1, a_2, a_3 коэффициентами b_1, b_2, b_3 из (19.8), соответственно.

§ 20. Основные кинетические эффекты в кубических полупроводниках с анизотропным законом дисперсии

Результаты, полученные в предыдущих двух параграфах, позволяют найти явный вид основных кинетических коэффициентов в различных предельных случаях для полупроводников с анизотропным законом дисперсии.

1. **Отсутствие магнитного поля.** При отсутствии магнитного поля тензор электропроводности для кубических полупроводников (19.15) и соответствующий термомагнитный тензор β_{ik} , как следовало ожидать, превращаются в скаляр. В результате для электропроводности $\sigma(0)$ и термо-э. д. с. $\alpha(0)$ получим выражения

$$\sigma(0) = \sigma_0 = en\mu, \quad (20.1)$$

где

$$u = (e/3) (\tau_{0\perp}/m_{0\perp}) (2 + \gamma^{-1}) (\tau^*/m^*) \quad (20.2)$$

— подвижность, а

$$n = N_c n_0 \quad (20.3)$$

— полная концентрация носителей заряда, N_c — число эллипсоидов (для модели А $N_c = 4$; для модели В $N_c = 6$), n_0 — концентрация носителей в одной долине (18.20);

$$\alpha(0) = -\frac{k_0}{e} \left(\frac{\langle x\tau^*/m^* \rangle}{\langle \tau^*/m^* \rangle} - \eta \right), \quad (20.4)$$

где $\eta = \zeta/k_0T$ — приведенный химический потенциал, $x = \varepsilon/k_0T$ — энергия в единицах k_0T ; $\tau^*(x)$ и $m^*(x)$ — безразмерные величины, определяющие зависимости компонентов тензоров τ_i и m_i от энергии [см. (19.3)].

Для n -Ge и n -Si закон дисперсии, как известно, анизотропен, но параболический, и для них

$$B(\varepsilon) = \varepsilon, \quad m^* = \partial B/\partial \varepsilon = 1, \quad \tau^* = (\varepsilon/k_0T)^{r-1/2}, \quad (20.5)$$

где r — параметр рассеяния. Используя (20.5) при вычислении средних типа $\langle \tau^*/m^* \rangle$, согласно (18.19), легко убедиться в том, что подвижность и термо-э. д. с. выражаются однопараметрическими интегралами Ферми (4.33).

Для халькогенидов свинца (PbS, PbSe, PbTe) зона анизотропна и непараболическая. Согласно (3.39) и (14.15),

$$B(\varepsilon) = \varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right), \quad m^* = \frac{\partial B}{\partial \varepsilon} = 1 + \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_g}, \quad \tau^* = \frac{(x + \beta x^2)^{r-1/2}}{1 + 2\beta x}, \quad (20.6)$$

и поэтому в этом случае средние типа $\langle \tau^*/m^* \rangle$ выражаются через двухпараметрические интегралы Ферми (4.29).

2. **Поперечные слабые магнитные поля.** Поскольку нам уже известны компоненты тензоров проводимости σ_{ik} и β_{ik} в слабом магнитном поле в подвижной системе координат (19.15), то в этом случае мы можем определить явный вид изотермических кинетических коэффициентов.

В подвижной системе координат магнитное поле \mathbf{H} направлено по оси z . Пусть электрический ток течет по оси x . Если ограничиться первым исчезающим членом, то для коэффициента Холла R_0 получим выражение, которое справедливо как для модели А, так и для модели В:

$$R_0 = - (s_1/nec) a_r^*, \quad (20.7)$$

где n — полная концентрация электронов проводимости (20.3)

$$a_r^* = \langle (\tau^*/m^*)^2 \rangle / \langle \tau^*/m^* \rangle \quad (20.8)$$

— коэффициент, зависящий от закона дисперсии, механизма рассеяния и степени вырождения носителей заряда;

$$s_1 = 3\gamma(2 + \gamma)/(1 + 2\gamma)^2 \quad (20.9)$$

характеризует анизотропию спектра и рассеяния.

Если использовать (20.5) или (20.6), то (20.8) совпадает с (15.5) или (15.4).

Как и следовало ожидать, коэффициент Холла от направления магнитного поля и тока, т. е. от углов φ , θ , ψ , не зависит и отличается от R_0 для изотропных полупроводников (15.2) только множителем s_1 , который определяется коэффициентом анизотропии γ (19.7). Из (20.9) видно, что при $\gamma = 1$, $s_1 = 1$, а для всех остальных значений $\gamma \neq 1$ множитель $s_1 < 1$, т. е. любая анизотропия уменьшает холловское поле.

Теперь приведем выражение для изменения сопротивления в слабом поперечном магнитном поле:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_{\perp} = \frac{\rho(H) - \rho(0)}{\rho(0)} = \left(\frac{uH}{c}\right)^2 [s_2 b_r^* - (s_1 a_r^*)^2], \quad (20.10)$$

где u — подвижность (20.2), a_r^* и s_1 даются (20.8) и (20.9), а

$$b_r^* = \langle (\tau^*/m^*)^3 \rangle / \langle \tau^*/m^* \rangle^3; \quad (20.11)$$

значения s_2 зависят от структуры зоны проводимости, а именно: для модели А (n -Ge, PbTe, PbSe, PbS)

$$s_2 = \frac{3\gamma}{(1 + 2\gamma)^3} [(1 + 2\gamma)(2 + \gamma) + 2(1 - \gamma)^2 \sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi)]; \quad (20.12)$$

для модели В (n -Si)

$$s_2 = \frac{9\gamma}{(1 + 2\gamma)^3} [(1 + \gamma + \gamma^2) - (1 - \gamma)^2 \sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi)]. \quad (20.13)$$

При использовании (20.5) и (20.6) величина b_r^* (20.11) совпадает с (15.30) или (15.29).

Видно, что от направления магнитного поля или тока зависит только множитель s_2 . Выражения для s_2 (20.12) и (20.13) являются наиболее общими, из которых можно получить результаты для всех частных случаев. Для некоторых характерных направлений магнитного поля и тока значения $\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi)$ и s_2 приведены в табл. 7.

Интересно отметить, что в отличие от изотропного случая, при наличии анизотропии, т. е. $\gamma \neq 1$ магнитное сопротивление имеет место и тогда, когда носители тока полностью вырождены. Действительно, при полном вырождении ($a_r^* = 1$ и $b_r^* = 1$) из (20.10) следует, что $(\Delta\rho/\rho)_{\perp} \sim (s_2 - s_1^2) \neq 0$, если $\gamma \neq 1$.

Рассмотрим термомагнитные явления в слабом поперечном магнитном поле. Пусть в подвижной системе магнитное поле \mathbf{H} направлено по оси z , а по оси x имеется градиент температуры. Тогда известно, что в направлении y возникает поле Нернста — Эттингсгаузена $E_y = -Q_0 H \nabla_x T$. Расчет для Q_0 в случае модели А и модели В дает одинаковое выражение

$$Q_0 = \frac{k_0}{e} \frac{u}{c} s_1 \lambda_1^* a_r^*, \quad (20.14)$$

где u — подвижность (20.2), a_r^* и s_1 даны в (20.8) и (20.9), а

$$\lambda_1^* = \frac{\langle x(\tau^*/m^*)^2 \rangle}{\langle (\tau^*/m^*)^2 \rangle} - \frac{\langle x\tau^*/m^* \rangle}{\langle \tau^*/m^* \rangle}. \quad (20.15)$$

В случае параболической и непараболической зоны λ_1^* переходит в (15.52) и (15.54), соответственно. Также как и коэффициент Холла, Q_0 отличается от изотропного случая множителем s_1 , т. е. при любой анизотропии Q_0 уменьшается.

Таблица 7

Значения s_2 для различных направлений магнитного поля, тока (градиента температуры)

Направление магнитного поля	Направление тока или градиента температуры	φ	θ	ψ	$\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi)$	s_2	
						для модели А	для модели В
[001]	[100]	0	0	0	0	$\frac{3\gamma(2+\gamma)}{(1+2\gamma)^2}$	$\frac{9\gamma(1+\gamma+\gamma^2)}{(1+2\gamma)^3}$
[110]	[110]	$\pi/4$	0	$\pi/2$	1/2	$\frac{9\gamma(1+\gamma+\gamma^2)}{(1+2\gamma)^3}$	$\frac{9\gamma(1+4\gamma+\gamma^2)}{2(1+2\gamma)^3}$
[111]	[110]	$\pi/4$	0	$\cos \psi = \frac{1}{\sqrt{3}}$	1/3	$\frac{\gamma(8+11\gamma+8\gamma^2)}{(1+2\gamma)^3}$	$\frac{3\gamma(2+\gamma)}{(1+2\gamma)^2}$

Для изменения термо-э. д. с. в поперечном слабом магнитном поле в результате вычисления получим следующее выражение:

$$(\Delta\alpha)_\perp = \alpha(H) - \alpha(0) = \frac{k_0}{e} \left(\frac{uH}{c} \right)^2 [s_2 \lambda_2^* b_r^* - \lambda_1^* (s_1 a_r^*)^2], \quad (20.16)$$

где $\alpha(0)$ — термо-э. д. с. в отсутствие магнитного поля (20.4), s_1 , s_2 , a_r^* , b_r^* даны в (20.8), (20.9), (20.11) — (20.13), а

$$\lambda_2^* = \frac{\langle x(\tau^*/m^*)^3 \rangle}{\langle (\tau^*/m^*)^3 \rangle} - \frac{\langle x\tau^*/m^* \rangle}{\langle \tau^*/m^* \rangle}. \quad (20.17)$$

В параболическом и непараболическом случаях (20.17) переходит в (15.68) и (15.67), соответственно.

Отметим, что в отличие от магнитного сопротивления коэффициент Нернста — Эттингсгаузена Q_0 и изменение термо-э. д. с. равны нулю в случае полного вырождения и при учете анизотропии. На самом деле, при полном вырождении, как следует из (20.15) и (20.17), $\lambda_1^* = \lambda_2^* = 0$, следовательно, $Q_0 = 0$ и $(\Delta\alpha)_\perp = 0$.

Из приведенных выше формул следует, что анизотропия магнетосопротивления и магнетотермо-э. д. с. в поперечном магнитном поле определяется функцией $\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi)$, причем для модели А (*n*-Ge, PbTe, PbSe, PbS) максимумы $(\Delta\rho/\rho)_\perp$ и $(\Delta\alpha)_\perp$ совпадают с максимумами и минимумами $\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi)$, а для модели В (*n*-Si) они противоположны. Поэтому достаточно исследовать угловую зависимость функции $\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi)$.

Рассмотрим некоторые частные случаи.

1) Направление тока совпадает с направлениями [100] или [111]. Как видно из (19.19), в первом случае $\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi) = 0$, а во втором случае $\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi) = 1/3$, т. е. σ_{11} не зависит от углов. Следовательно, при вращении магнитного поля в плоскости, перпендикулярной указанным направлениям, $(\Delta\rho/\rho)_\perp$ и $(\Delta\alpha)_\perp$ не меняются.

2) Ток направлен по диагонали грани куба, например, по [110], а магнитное поле вращается на плоскости (110). В этом случае из (19.19) следует, что

$\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi) = \sigma_{11}(\psi) = 1/2 \sin^2 \psi$, т. е. максимумы этой функции совпадают с направлениями диагоналей грани куба (рис. 23, а).

3) Магнитное поле и ток, составляя друг с другом прямой угол, вращаются вокруг одной из осей куба, например, вокруг [010]. Как видно из (19.19), в этом случае $\sigma_{11}(\varphi, \theta, \psi) = \sigma_{11}(\theta) = 1/2 \sin^2 2\theta$, т. е. получаются четыре минимума и четыре максимума (рис. 23, б). Такая же картина получается, если вращение происходит вокруг осей типа [110].

Аналогичным образом можно рассмотреть анизотропию эффектов относительно любой кристаллографической плоскости.

3. Продольные слабые магнитные поля. Как известно, если изоэнергетическая поверхность является сферой, рассеяние изотропным, а магнитное поле некваंटующим, то продольные эффекты в продольном магнитном поле отсутствуют. Одна из особенностей анизотропного закона дисперсии заключается в том, что в этом случае в отличие от изотропной модели сопротивление и термо-э. д. с. изменяются и в продольном магнитном поле,

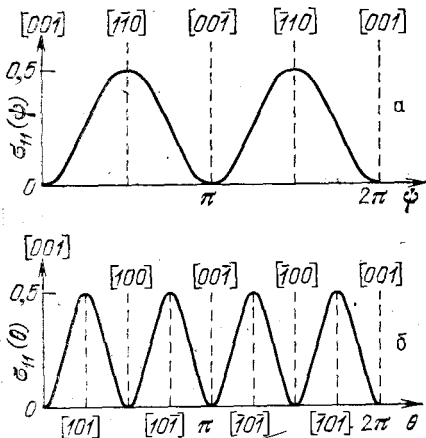


Рис. 23. Характер анизотропии поперечного магнетосопротивления и магнетотермо-э. д. с. для модели А (*n*-Ge, PbSe, PbS, PbTe)

т. е. когда направление магнитного поля и тока (в случае термо-э. д. с. магнитного поля и градиента температуры) совпадают.

Здесь рассмотрим изменение сопротивления и термо-э. д. с. в слабом продольном магнитном поле для моделей А и В. Предположим, что электрический ток и магнитное поле направлены по оси z ($j_x = j_y = 0, j_z \neq 0; H_x = H_y = 0, H_z = H$). Если ограничиться только квадратичными членами по H , то из (19.15) для изменения сопротивления в продольном магнитном поле получим

$$(\Delta\rho/\rho)_{\parallel} = (uH/c)^2 s_3 b_r^*, \quad (20.18)$$

где b_r^* дается (20.11), а s_3 есть функция параметра γ и углов φ, θ, ψ , причем для модели А

$$s_3 = [6\gamma(1-\gamma)^2/(1+2\gamma)^3][1 - \sigma_{33}(\varphi, \theta, \psi)], \quad (20.19)$$

для модели В

$$s_3 = [9\gamma(1-\gamma)^2/(1+2\gamma)^3]\sigma_{33}(\varphi, \theta, \psi), \quad (20.20)$$

где $\sigma_{33}(\varphi, \theta, \psi)$ дается формулой (19.21).

В случае анизотропного спектра в продольном магнитном поле изменяется как сопротивление, так и термо-э. д. с. Пусть магнитное поле и градиент температуры направлены по оси z подвижной системы ($\nabla_x T = \nabla_y T = 0, \nabla_z T \neq 0, H_x = H_y = 0, H_z = H$). Если ограничиться первым исчезающим членом по H , то из (19.15) для изменения термо-э. д. с. в продольном магнитном поле получим выражение

$$(\Delta\alpha)_{\parallel} = \alpha_{\parallel}(H) - \alpha(0) = (k_0/e)(uH/c)^2 s_3 \lambda_2^* b_r^*, \quad (20.21)$$

где $\alpha(0)$ — термо-э. д. с. при отсутствии магнитного поля (20.4), b_r^*, λ_2^* и s_3 даны в (20.11), (20.17), (20.19) и (20.20), соответственно.

Из (20.21) и (20.18) следует, что

$$(e/k_0)(\Delta\alpha)_{\parallel} [(\Delta\rho/\rho)_{\parallel}]^{-1} = \lambda_2^*. \quad (20.22)$$

Для невырожденных полупроводников с параболической зоной $\lambda_2^* = 2r - 1$ и отношение (20.22) дает возможность непосредственно определить параметр рассеяния r . В этом случае, легко показать, что имеет место следующее соотношение:

$$(\Delta\alpha)_{\parallel}/(\Delta\rho/\rho)_{\parallel} = 2Q_0/\sigma_0 |R_0|, \quad (20.23)$$

где Q_0 и R_0 — коэффициенты Нернста — Эттингсгаузена и Холла в слабом магнитном поле.

Отметим, что анизотропия продольного магнетосопротивления и термо-э. д. с. определяется величиной s_3 . Для некоторых характерных направлений значения s_3 приведены в табл. 8.

Из таблиц 7 и 8 вытекают следующие соотношения между s_2 и s_3 , которые определяют магнетосопротивление и термо-э. д. с. в поперечном и продольном слабых магнитных полях:

для модели А

$$(s_3)_{001}^{001} = 2(s_3)_{110}^{110} = 3(s_3)_{111}^{111}, \quad (s_2)_{110}^{\bar{1}\bar{1}0} = \frac{1}{2}(s_3)_{001}^{001} + (s_2)_{100}^{001}; \quad (20.24)$$

для модели В

$$(s_3)_{111}^{111} = \frac{4}{3}(s_3)_{110}^{110}, \quad (s_2)_{111}^{\bar{1}\bar{1}0} = (s_2)_{100}^{001} - (s_3)_{110}^{110}. \quad (20.25)$$

Здесь верхние индексы относятся к направлениям магнитного поля, а нижние — к направлениям магнитного тока (градиента температуры).

Таблица 8

Значения s_3 для различных направлений магнитного поля, тока (градиента температуры)

Направление магнитного поля	φ	θ	ψ	$\sigma_{33}(\varphi, \theta, \psi)$	s_3	
					для модели А	для модели В
[001]	0	0	0	0	$\frac{6\gamma(1-\gamma)^2}{(1+2\gamma)^3}$	0
[110]	$\pi/4$	0	$\pi/2$	1/2	$\frac{3\gamma(1-\gamma)^2}{(1+2\gamma)^3}$	$\frac{9\gamma(1-\gamma)^2}{2(1+2\gamma)^3}$
[111]	$\pi/4$	$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{3}}$	0	2/3	$\frac{2\gamma(1-\gamma)^2}{(1+2\gamma)^3}$	$\frac{6\gamma(1-\gamma)^3}{(1+2\gamma)^3}$

Из (20.18) — (20.20) видно, что анизотропия продольного магнитного сопротивления определяется функцией $\sigma_{33}(\varphi, \theta, \psi)$; для модели В максимумы и минимумы $(\Delta\rho/\rho)_{\parallel}$ совпадают с максимумами и минимумами σ_{33} , а для модели А они противоположны.

Рассмотрим анизотропию продольного магнетосопротивления на плоскостях (100) и (110).

В первом случае, когда направления поля и тока совпадают и находятся на плоскости (100), из (19.21) получим $\sigma_{33}(\psi) = 1/2 \sin^2 2\psi$, т. е. характер анизотропии такой же, как и на рис. 23, б.

Наиболее интересным является второй случай, когда направления тока и магнитного поля совпадают и находятся на плоскостях, проходящих через два диагонально противоположных ребра куба, например на плоскости $(\bar{1}\bar{1}0)$. Тогда ($\varphi = \pi/4, \theta = 0, \psi \neq 0$) из (19.21) следует

$$\sigma_{33}(\psi) = 1/2(1 + 3 \cos^2 \psi) \sin^2 \psi. \quad (20.26)$$

График этой угловой зависимости для модели А показан на рис. 24, из которого видно, что в этом случае для $(\Delta\rho/\rho)_{\parallel}$ получаются два типа максимумов и четыре одинаковых минимума.

Для модели В (n-Si) имеет место обратная картина — четыре одинаковых максимума и два типа минимумов. Очевидно, что

изменение термо-э. д. с. в продольном магнитном поле (20.21) обладает такой же анизотропией, как и продольное магнетосопротивление.

4. Сильные магнитные поля. До сих пор мы рассматривали

кинетические эффекты в многоэллипсоидальных полупроводниках в слабом магнитном поле. Аналогичным образом можно рассмотреть случай сильных магнитных полей. Для этого нужно разложить (18.16) по степеням $v_0^{-1} \ll 1$ и подставить в (18.21). Это дает нам тензор проводимости в главных осях одного эллипсоида. Суммирование по эллипсоидам производится также как в предыдущих пунктах. Поскольку выкладки и вид тензоров проводимости в этом случае громоздки, мы их здесь приводить не будем. Приведем только некоторые окончательные результаты, полученные в работе [13].

Коэффициент Холла в сильном магнитном поле, как обычно, определяется только концентрацией электронов проводимости $R_\infty = -1/nec$, а сопротивление в сильном поперечном магнитном поле $\rho_\perp(\infty)$ и коэффициент Нернста — Эттингсгаузена Q_∞ имеют вид

$$\rho_\perp(\infty) = \rho(0) s_\perp c_r^*, \quad (20.27)$$

$$Q_\infty = (k_0/e) H^{-1} (uH/c)^{-1} s_\perp \lambda_\infty^* c_r^*, \quad (20.28)$$

где $\rho(0) = 1/\sigma_0 = 1/en\mu$ — удельное сопротивление при отсутствии магнитного поля, u — подвижность (20.2), n — полная концентрация (20.3), а

$$c_r^* = \langle \tau^*/m^* \rangle \langle m^*/\tau^* \rangle, \quad (20.29)$$

$$\lambda_\infty^* = \langle x \rangle - \langle x m^*/\tau^* \rangle / \langle m^*/\tau^* \rangle, \quad (20.30)$$

s_\perp — параметр, зависящий от направлений магнитного поля, тока или градиента температуры. Значения параметра s_\perp для некоторых направлений H , j или ∇T указаны в табл. 9.

Отметим, что термо-э. д. с. в сильном поперечном магнитном поле от механизма рассеяния и параметра рассеяния не зависит и определяется формулой (15.71).

В сильном продольном магнитном поле в первом приближении термо-э. д. с. не изменяется, т. е. $\alpha_\parallel(\infty) = \alpha(0)$, где $\alpha(0)$ дается (20.4).

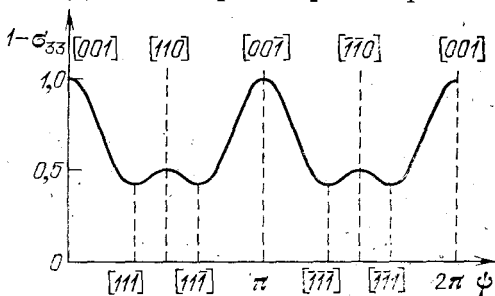


Рис. 24. Характер анизотропии продольного магнетосопротивления для модели А (n -Ge, PbSe, PbS, PbTe) в плоскости (110) при $H \parallel j$

Т а б л и ц а 9

Значения s_{\perp} для некоторых направлений магнитного поля, тока (градиента температуры)

Направление магнитного поля	Направление тока или градиента температуры	s_{\perp}	
		для модели А	для модели В
[001]	[100]	$\frac{(2\gamma + 1)^2}{3\gamma(\gamma + 2)}$	$\frac{(2\gamma + 1)(\gamma + 2)}{9\gamma}$
[110]	[110]	$\frac{(2\gamma + 1)(\gamma + 2)}{9\gamma}$	$\frac{(2\gamma + 1)(5\gamma + 1)}{9\gamma(\gamma + 1)}$
[110]	[111]	$\frac{5\gamma^2 + 17\gamma + 5}{27\gamma}$	$\frac{(2\gamma + 1)(\gamma^2 + 13\gamma + 4)}{27\gamma(\gamma + 1)}$
[111]	[110]	$\frac{(2\gamma + 1)(44\gamma^2 + 29\gamma + 8)}{27\gamma^2(\gamma + 8)}$	$\frac{(2\gamma + 1)^2}{3\gamma(\gamma + 2)}$

Т а б л и ц а 10

Значения s_{\parallel} для некоторых направлений магнитного поля, тока (градиента температуры)

Направление магнитного поля $H \parallel i, \nabla T$	s_{\parallel}	
	для модели А	для модели В
[100]	$\frac{(2\gamma + 1)(\gamma + 2)}{9\gamma}$	1
[110]	$\frac{(2\gamma + 1)^2}{3\gamma(\gamma + 2)}$	$\frac{(2\gamma + 1)(\gamma + 1)}{\gamma(\gamma + 5)}$
[111]	$\frac{(2\gamma + 1)(\gamma + 8)}{3(7\gamma + 2)}$	$\frac{(2\gamma + 1)(\gamma + 2)}{9\gamma}$

Сопротивление в сильном продольном магнитном поле дается выражением

$$\rho_{\parallel}(\infty) = s_{\parallel}\rho(0). \quad (20.31)$$

Значения параметра s_{\parallel} для основных направлений магнитного поля и тока указаны в табл. 10.

Из вышеприведенных результатов следует, что исследуя различные кинетические эффекты можно определить параметр анизотропии $\gamma = (m_{0\parallel}/m_{0\perp})(\tau_{0\perp}/\tau_{0\parallel}) = \gamma_m\gamma_r$. Следовательно, зная отношение $\gamma_m = m_{0\parallel}/m_{0\perp}$ из эксперимента по циклотронному резонансу, найдем степень анизотропии рассеяния $\gamma_r = \tau_{0\perp}/\tau_{0\parallel}$. Как следует из (20.31), для определения параметра рассеяния γ наиболее подходящим является изменение сопротивления ρ в сильном продольном магнитном поле, так как в этом случае отношение $\rho_{\parallel}(\infty)/\rho(0) = s_{\parallel}$ зависит только от параметра γ (см. табл. 10).

Таким образом, вышеприведенные результаты позволяют исследовать анизотропию рассеяния в электронном германии и в халькогенидах свинца, а также в электронном кремнии.

Глава 6

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В КВАНТУЮЩИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Мы изложили классическую теорию явлений переноса на основе решения кинетического уравнения. Как было показано в § 8, это уравнение, и следовательно, все результаты, вытекающие из его решения, справедливы только в том случае, когда длина де-бройлевской волны λ , соответствующей свободному движению носителей тока, намного меньше длины свободного пробега l и радиуса циклотронной орбиты r , т. е. когда $\lambda \ll l$ и $\lambda \ll r$. Отметим, что при этом отношение l/r может быть любое, т. е. $l/r = \Omega\tau = v$ может иметь произвольные значения.

Из сказанного следует, что изложенную в предыдущих главах теорию явлений переноса нужно развить в двух направлениях.

Во-первых, когда нарушается первое неравенство и длина свободного пробега становится одного порядка с длиной волны де Бройля $l \lesssim \lambda$, то многие классические представления о механизме проводимости теряют смысл, носители тока сильно взаимодействуют с кристаллической решеткой и природа проводимости носит чисто квантовый характер. Развитие теории кинетических эффектов в этом направлении привело к созданию теории малой подвижности. Это довольно большая самостоятельная область квантовой теории проводимости. Здесь на этих вопросах мы останавливаться не будем.

Во-вторых, когда нарушается второе условие и радиус циклотронной орбиты носителей тока $r \lesssim \lambda$, то орбитальное движение в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, квантуется и спектр носителей тока становится частично дискретным. В этом случае теория проводимости также носит квантовый характер. Теория в этом направлении интенсивно развивалась с начала шестидесятых годов и возникла квантовая теория явлений переноса в квантующих магнитных полях. В настоящей главе изложены основные положения и результаты теории, учитывающей квантование движения носителей тока в магнитном поле. В начале главы приведен энергетический спектр и функции плотности состояний. На основе этого спектра рассмотрена статистика носителей тока в квантующем магнитном поле и определены критерии вырождения в условиях квантования движения.

В двух последних параграфах изложена квантовая теория гальваномагнитных и термомагнитных явлений в полупроводниках. Рассмотрены как параболическая, так и непараболическая зоны.

§ 21. Энергетический спектр и статистика носителей заряда в квантующих магнитных полях

Задача о движении электрона в однородном магнитном поле на основе квантовой механики впервые была решена Ландау [1] в связи с определением диамагнитной восприимчивости свободных электронов в металлах. Им было показано, что спектр электрона в однородном магнитном поле становится дискретным, т. е. круговое движение электрона в плоскости, перпендикулярной полю, квантуется.

На магнитных свойствах электронного газа мы останавливаться здесь не будем. В этом параграфе вычислим только химический потенциал и определим критерии вырождения в квантующем магнитном поле. Для этого необходимо знать спектр энергии и функцию плотности состояний в магнитном поле.

1. Энергия электрона проводимости в магнитном поле. Рассмотрим движение электрона проводимости с эффективной массой m_n во внешнем постоянном однородном магнитном поле H . Пока не будем учитывать спин электрона. Тогда гамильтониан электрона в магнитном поле в приближении эффективной массы будет иметь вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m_n} \left(\widehat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2, \quad (21.1)$$

где $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ — оператор импульса, e — величина заряда электрона, \mathbf{A} — вектор-потенциал магнитного поля.

Координатную ось z направим по внешнему магнитному полю. Тогда $H_x = H_y = 0$, $H_z = H$. Такому магнитному полю соответствуют различные калибровки вектор-потенциала \mathbf{A} . Выберем следующую калибровку:

$$A_x = 0, \quad A_y = Hx, \quad A_z = 0, \quad (21.2)$$

тогда гамильтониан (21.1) примет вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = (1/2m_n) [\widehat{p}_x^2 + (\widehat{p}_y + m_n\Omega x)^2 + \widehat{p}_z^2], \quad (21.3)$$

где $\Omega = eH/m_n c$ — циклотронная частота.

Поскольку гамильтониан (21.3) коммутирует с операторами \widehat{p}_y и \widehat{p}_z , то сохраняются y -я и z -я компоненты импульса, которые имеют следующие собственные значения: $p_y = \hbar k_y$ и $p_z = \hbar k_z$, где k_y и k_z — соответствующие компоненты волнового вектора \mathbf{k} . Поэтому движение электрона по направлениям y и z описывается плоской волной и решение уравнения Шредингера

$$\widehat{\mathcal{H}}\psi = \varepsilon\psi \quad (21.4)$$

можно искать в виде [2]

$$\psi(r) = \varphi(x) \exp [i(k_y y + k_z z)]. \quad (21.5)$$

Подставляя это решение в (21.4), с учетом (21.3) получим уравнение для неизвестной функции $\varphi(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{1}{2} m_n \Omega^2 (x - x_0)^2 \varphi = \varepsilon_N \varphi, \quad (21.6)$$

где введены обозначения

$$x_0 = -\hbar k_y / \Omega m_n, \quad \varepsilon_N = \varepsilon - \hbar^2 k_z^2 / 2m_n. \quad (21.7)$$

Заметим, что (21.6) есть уравнение линейного гармонического осциллятора с частотой $\Omega = eH/m_n c$ с центром $x = x_0$, собственные функции и собственные значения которого есть

$$\varphi(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{R}} H_N \left(\frac{x - x_0}{R} \right) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - x_0}{R} \right)^2 \right], \quad (21.8)$$

$$\varepsilon_N = (N + 1/2) \hbar \Omega, \quad (21.9)$$

где $N = 0, 1, 2, 3, \dots$ — осцилляторное квантовое число, H_N — полином Эрмита N -го порядка,

$$R = (\hbar / \Omega m_n)^{1/2} = (\hbar c / eH)^{1/2} \quad (21.10)$$

— так называемая магнитная длина.

В результате, подставляя (21.9) в (21.7), для энергии, а также для волновой функции электрона в магнитном поле, направленном вдоль оси z , получим следующие выражения:

$$\varepsilon \equiv \varepsilon(N, k_z) = (N + 1/2) \hbar \Omega + \hbar^2 k_z^2 / 2m_n, \quad (21.11)$$

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \varphi_N(x - x_0) \exp [i(k_y y + k_z z)], \quad (21.12)$$

где $\alpha \equiv (N, k_y, k_z)$ — набор квантовых чисел, определяющих состояния электрона в магнитном поле, $\varphi_N(x - x_0)$ — нормированная волновая функция линейного гармонического осциллятора с квантовым числом N , колеблющегося около положения равновесия

$$x_0 = -\hbar k_y / \Omega m_n = -R^2 k_y. \quad (21.13)$$

Из (21.12) следует, что координаты x и y в $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ входят несимметрично, хотя задача сама симметрична и выделено только направление z , по которому имеется магнитное поле. Видно, что по направлению x положение электрона локализовано, а по y оно не локализовано. Это связано с тем, что операторы, соответствующие координатам центра окружности в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля $\hat{x}_0 = -\hat{p}_y / \Omega m_n$ и $\hat{y}_0 = (\hat{p}_x / \Omega m_n) + y$, не коммутируют друг с другом, т. е. координаты центра окружности x_0 и y_0 не могут иметь одновременно определенные значения [2]. Таким образом, локализация положения электрона в магнитном поле может иметь место только по одному направлению, а именно по-какому (x или y), зависит от выбора

калибровки вектор-потенциала. При нашем выборе калибровки (21.2) локализация имеет место по направлению x . Если бы мы выбрали другую калибровку, например, $A_x = -Hy$, $A_y = A_z = 0$, что также соответствует магнитному полю $\mathbf{H}(0, 0, H)$, локализация имела бы место по направлению y .

Спектр электрона в магнитном поле, как видно из (21.11), становится частично дискретным. Энергия (21.11) состоит из двух частей: одна — непрерывно зависящая от k_z , соответствующая движению электрона вдоль магнитного поля, и вторая — дискретная, соответствующая квантованию кругового движения в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

Используя принцип соответствия, можно наглядно представить квантование движения в квазиклассическом приближении. Согласно классической физике допустимы любые значения энергии ϵ_{\perp} , связанной с движением в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Поскольку ϵ_{\perp} связана с радиусом орбиты r простым соотношением $\epsilon_{\perp} = m_n v_{\perp}^2 / 2 = m_n \Omega^2 r^2 / 2$, то возможны любые круговые орбиты с радиусом r . С точки зрения квантовой механики, согласно (21.11), $\epsilon_{\perp} = (N + 1/2) \hbar \Omega$, т. е. энергия поперечного движения не может принимать любые значения. Если привести в соответствие эти два выражения для энергии, то получим, что возможны только орбиты с радиусами

$$r_N = (2N + 1)^{1/2} R, \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (21.14)$$

Отсюда видно, что магнитная длина (21.10) есть радиус первой возможной орбиты $R = r_0$. Таким образом, по квазиклассическим представлениям электрон может вращаться вокруг магнитного поля по дискретным орбитам с радиусами (21.14). Для перехода электрона с одной орбиты на соседнюю с большим радиусом необходимо затратить энергию $\hbar \Omega$.

Мы увидели, что в r -пространстве квантование соответствует наличию дискретных орбит, причем для данного магнитного поля имеется орбита с минимальным радиусом R . Интересно рассмотреть, как изменяется распределение состояний электрона в k -пространстве при квантовании движения. Известно, что в простом параболическом случае состояния электрона с энергиями меньше ϵ_0 в k -пространстве при отсутствии магнитного поля непрерывно заполняют сферу с радиусом $k = (1/\hbar)(2m_n \epsilon_0)^{1/2}$. В магнитном поле, направленном по оси z , часть энергии $\hbar^2 k_z^2 / 2m_n$ не меняется, а энергии $\hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m_n$ соответствует выражение $(N + 1/2) \hbar \Omega$. Из этого соответствия следует, что возможны только дискретные значения k_{\perp} , а именно

$$k_{\perp} \rightarrow k_{\perp N} = (2N + 1)^{1/2} R^{-1}, \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (21.15)$$

где R — магнитная длина (21.10).

Это означает, что все состояния, непрерывно заполняющие объем внутри сферы $\epsilon_0 = \text{const}$, при наличии магнитного поля находятся только на поверхностях коаксиальных дискретных цилиндров с осью, параллельной k_z , с радиусами (21.15) (см.

рис. 25, а). Высота возможного цилиндра с номером N для заданного значения энергии электрона ϵ_0 равна *)

$$k_{zN} = [2(2m_n)^{1/2}/\hbar] [\epsilon_0 - (N + 1/2)\hbar\Omega]^{1/2}. \quad (21.16)$$

Поскольку высота должна быть вещественной, то максимальное число возможных цилиндров, соответствующих энергиям, меньшим ϵ_0 , равно целой части дроби

$$\left[\frac{\epsilon_0 - (\hbar\Omega/2)}{\hbar\Omega} \right] = N_{\max}. \quad (21.17)$$

Отсюда видно, что число цилиндров внутри сферы $\epsilon_0 = \text{const}$ уменьшается с ростом магнитного поля.

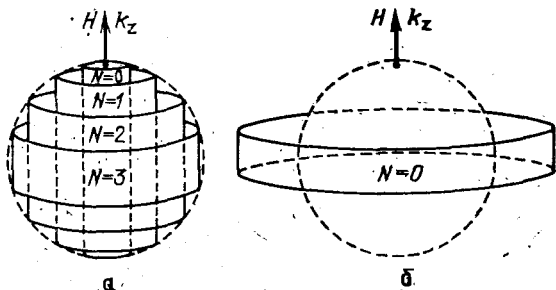


Рис. 25. Изменение распределения квантовых состояний в магнитном поле

Таким образом, согласно квазиклассике, при наличии квантующего магнитного поля все состояния электрона с энергиями, меньше чем ϵ , в k -пространстве находятся на поверхностях коаксиальных цилиндров с осью по k_z , с радиусами (21.15) и высотами (21.16) (см. рис. 25, а), число которых определяется (21.17).

Следует отметить, что такое квазиклассическое представление о распределении состояний в магнитном поле справедливо в том случае, когда внутри данной изоэнергетической поверхности $\epsilon_0 = \text{const}$ помещаются хотя бы несколько цилиндров, т. е. $N_{\max} > 1$. При сильных магнитных полях в указанной сфере помещается всего один цилиндр и в пределе $H \rightarrow \infty$ радиус этого цилиндра $k_{\perp 0} = R^{-1} \rightarrow \infty$ и станет больше радиуса сферы $k = (1/\hbar)(2m_n\epsilon_0)^{1/2}$, а высота его будет стремиться к нулю, т. е. все состояния в предельно сильном магнитном поле будут находиться на поверхности узкого кольца с большим радиусом $k_{\perp 0} = R^{-1} = (eH/\hbar c)^{1/2}$ (см. рис. 25, б).

Влияние квантования движения в магнитном поле на энергетический спектр электрона на основе (21.11) схематически показано на рис. 26. Видно, что в спектре появляются дискретные уровни, отделенные друг от друга расстоянием $\hbar\Omega$. Эти уровни

*) Множитель 2 учитывает положительное и отрицательное направления k_z .

носят название *уровней Ландау*. Для данного уровня энергия непрерывно зависит только от k_z , т. е. имеют место одномерные параболические энергетические зоны, которые соответствуют вышеуказанным цилиндрическим поверхностям (см. рис. 25, а). Причем, абсцисса точки пересечения N -й параболы с уровнем ϵ_0 соответствует высоте N -го цилиндра, а разность $\epsilon_0 - (N + 1/2)\hbar\Omega$ определяет радиус того же цилиндра. Дно зоны проводимости

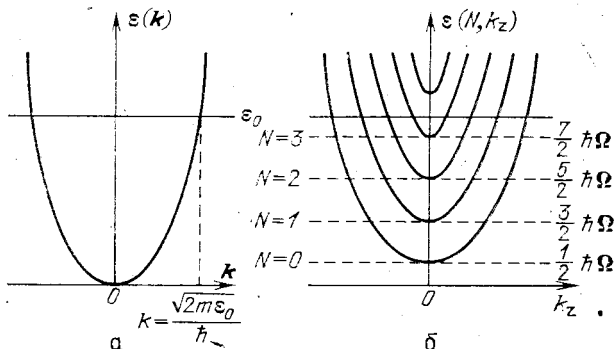


Рис. 26. Зависимость энергии от волнового вектора: а) в отсутствие магнитного поля и б) при наличии магнитного поля появляются дискретные уровни Ландау и одномерные зоны

поднялось на величину $\hbar\Omega/2$, и увеличилась ширина запрещенной зоны. Другими словами, в объеме \mathbf{k} -пространства внутри первого возможного цилиндра с радиусом $k_{\perp 0} = R^{-1}$ и высотой $k_{z0} = (2(2m_n)^{1/2}/\hbar)(\epsilon_0 - (\hbar\Omega/2))^{1/2}$ не имеется ни одного электронного состояния.

2. Спиновое расщепление. Эффективный g^* -фактор. Учет спина электрона приводит к дополнительному члену $\mu_z H$ в гамильтониане (21.3), где $\mu_z = -\mu_0(\sigma_z/\sigma)$ — проекция собственного магнитного момента по направлению магнитного поля, связанная со спином, σ_z — оператор спина с собственным значением $\sigma = \pm 1/2$, $\mu_0 = e\hbar/2m_0c$ — магнетон Бора, m_0 — масса свободного электрона. Поскольку оператор спина \hat{s}_z коммутирует с гамильтонианом (21.3) и оператор взаимодействия $\mu_z H$ не зависит от координат, то s_z сохраняется, и в уравнении Шредингера (21.4) спиновые и координатные переменные разделяются. Поэтому собственные функции электрона с учетом спина получаются из (21.5) умножением на спиновые волновые функции, соответствующие определенным значениям проекции спина $\sigma = \pm 1/2$. При этом к собственным значениям энергии (21.11) прибавляется дополнительный член, соответствующий энергии собственного магнитного момента в магнитном поле. Тогда энергия электрона в магнитном поле с учетом спина

$$\epsilon(N, k_z, \sigma) = (N + 1/2)\hbar\Omega + \hbar^2 k_z^2 / 2m_n + \sigma g_0 \mu_0 H, \quad (21.18)$$

где $g_0 = 2$ есть фактор спинового расщепления энергии свободного электрона. Видно, что каждый уровень Ландау расщепляется на два спиновых подуровня и число парабол $\varepsilon = \varepsilon_{N\sigma}(k_z)$ удваивается, причем величина расщепления N -го уровня

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon(N, 1/2) - \varepsilon(N, -1/2) = g_0\mu_0 H. \quad (21.19)$$

Закон дисперсии (2.18) перепишем в виде

$$k_z(\varepsilon, N, \sigma) = (\sqrt{2m_n/\hbar}) \sqrt{\varepsilon - (N + 1/2)\hbar\Omega - \sigma g_0\mu_0 H}. \quad (21.20)$$

Отметим, что именно эту функцию нужно знать для изучения термодинамических и кинетических свойств электронного газа.

Мы привели здесь спектр энергии электрона в отделенной зоне в приближении эффективной массы в магнитном поле. В этом случае, зависимость $\varepsilon(N, \sigma, k_z)$ от k_z параболична. Если рассмотреть задачу о спектре с учетом взаимосвязи некоторого числа зон, то эта зависимость становится непараболичной, а также изменяется величина спинового расщепления энергии.

Задача Кейна — отыскание спектра с учетом взаимодействия трех зон: зоны проводимости, зоны легких дырок и спин-орбитально расщепленной зоны — в магнитном поле была рассмотрена в работе Бауерса и Яфета [3], а при наличии и электрического поля в работе [4]. В результате, для определения энергии, вместо уравнения Кейна (3.10), было получено следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \varepsilon'(\varepsilon' + \varepsilon_g)(\varepsilon' + \Delta_0 + \varepsilon_g) - P^2\left(\varepsilon' + \varepsilon_g + \frac{2}{3}\Delta_0\right) \times \\ \times \left[\frac{2}{R^2}(N + 1/2) + k_z^2\right] + \sigma \frac{2\Delta_0}{3R^2} P^2 = 0; \end{aligned} \quad (21.21)$$

здесь энергия отсчитана от дна зоны проводимости при отсутствии магнитного поля, многие обозначения общепринятые, а

$$\varepsilon' = \varepsilon - \varepsilon_0 - \sigma g_0\mu_0 H; \quad \varepsilon_0 = (N + 1/2)\hbar\Omega_0 + \hbar^2 k_z^2 / 2m_0, \quad (21.22)$$

где $\Omega_0 = eH/m_0c$ — циклотронная частота свободного электрона с массой m_0 .

Матричный элемент P , определенный в (3.11), выражается через эффективную массу на дне зоны проводимости в отсутствие магнитного поля m_n и другие параметры зоны (ε_g и Δ_0) соотношением (3.18), т. е.

$$P^2 = \frac{\hbar^2}{2m_n} \frac{\varepsilon_g(\varepsilon_g + \Delta_0)}{\varepsilon_g + 2/3\Delta_0} \left(1 - \frac{m_n}{m_0}\right). \quad (21.23)$$

Одно из решений кубического уравнения (21.21) дает закон дисперсии зоны проводимости, а остальные два соответствуют зоне легких дырок и спин-орбитально расщепленной зоне. Аналитически найти все три корня уравнения (21.21) невозможно. Поэтому следует рассмотреть приближенные ситуации. В приближении

$$\varepsilon' \ll \varepsilon_g + 2/3\Delta_0 \quad (21.24)$$

(21.21) превращается в квадратное уравнение. Решение этого уравнения, описывающее зону проводимости, имеет вид

$$\varepsilon(N, k_z, \sigma) = \varepsilon_0 + \sigma g_0 \mu_0 H - \frac{\varepsilon_g}{2} + \frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 + \frac{4}{\varepsilon_g} \left(\varepsilon_n - \varepsilon_0 - \sigma \frac{2\Delta_0}{3\varepsilon_g + 2\Delta_0} \left(\frac{m_0}{m_n} - 1 \right) \mu_0 H \right) \right]^{1/2}, \quad (21.25)$$

где ε_0 дается (21.22), а

$$\varepsilon_n = (N + 1/2) \hbar \Omega + \hbar^2 k_z^2 / 2m_n, \quad \Omega = eH/m_n c, \quad \sigma = \pm 1/2. \quad (21.26)$$

В случае $\varepsilon_g \gg \varepsilon_n$ выражение (21.25) превращается в параболический закон дисперсии $\varepsilon(k_z)$, при заданном N и σ .

Из (21.25) можно определить спиновое расщепление уровня Ландау с номером N , характеризуя его эффективным g^* -фактором

$$\varepsilon(N, 1/2) - \varepsilon(N, -1/2) = g^* \mu_0 H. \quad (21.27)$$

Полагая $k_z = 0$ (дно зоны Ландау) из (21.25) и (21.27) для эффективного g^* -фактора получим выражение

$$g^* = g_0 + \frac{\varepsilon_g}{2\mu_0 H} \left\{ \left[1 + \frac{4\mu_0 H}{\varepsilon_g} \left(\frac{m_0}{m_n} - 1 \right) \left(2N + 1 - \frac{\Delta_0}{3\varepsilon_g + 2\Delta_0} \right) \right]^{1/2} - \left[1 + \frac{4\mu_0 H}{\varepsilon_g} \left(\frac{m_0}{m_n} - 1 \right) \left(2N + 1 + \frac{\Delta_0}{3\varepsilon_g + 2\Delta_0} \right) \right]^{1/2} \right\}. \quad (21.28)$$

Видно, что $g^* = g_0$ только в том случае, когда спин-орбитальное взаимодействие отсутствует, т. е. $\Delta_0 = 0$. В общем случае g^* от g_0 отличается существенно и зависит от номера уровня Ландау N , а также от магнитного поля H . Только при $\varepsilon_g \gg N \hbar \Omega$ из (21.28) следует, что g^* -фактор постоянен. В этом случае (21.28) дает

$$g^* = g_0 \pm (1 - m_0/m_n) (2\Delta_0 / (3\varepsilon_g + 2\Delta_0)). \quad (21.29)$$

Такое выражение для g^* -фактора было получено также в работе [5].

Поскольку почти во всех полупроводниках типа $A^{III}B^V$ эффективная масса на дне зоны проводимости мала, т. е. $m_n \ll m_0$, то для них, как видно из (21.29), g^* -фактор отрицателен. Используя табл. 2, из (21.29) можно оценить g^* -фактор для отдельных полупроводниковых соединений. Для InSb такая оценка дает, что $g^* \approx -50$.

Сильная зависимость g^* -фактора от номера уровня Ландау N и магнитного поля H из (21.28) получается для бесщелевых полупроводников ($\varepsilon_g \rightarrow 0$). Тогда в подкоренном выражении единиц можно пренебречь и (21.28) примет вид

$$g^* = g_0 + (\varepsilon_g / 2\mu_0 H)^{1/2} (m_0/m_n - 1)^{1/2} [(4N + 1)^{1/2} - (4N + 3)^{1/2}]. \quad (21.30)$$

Отсюда явно видно, что g^* от g_0 сильно отличается для малых N ; при больших N разность в квадратных скобках исчезает и $g^* \rightarrow g_0$. Из (21.30) также видно, что с ростом магнитного поля H по модулю g^* уменьшается.

Приближение (21.24), при котором справедливы (21.25) и (21.28), имеет место для любого отношения между величинами ε_g и Δ_0 , за исключением случая одновременного стремления их к нулю. Поэтому (21.25) и (21.28) применимы как при случаях $\Delta_0 \gg \varepsilon_g$ (InSb) и $\Delta_0 \ll \varepsilon_g$ (InP, GaAs), так и при $\Delta_0 \approx \varepsilon_g$ (InAs, GaSb) (см. табл. 2).

Отметим, что для построения теории термодинамических и кинетических свойств электронных полупроводников в квантующем магнитном поле нет надобности знать закон дисперсии $\varepsilon(N, k_z, \sigma)$ [см., например, (21.25)], а достаточно знать функции $k_z(\varepsilon, N, \sigma)$.

Уравнение (21.21) может быть приближенно решено относительно k_z , если предположить, что эффективная масса на дне зоны проводимости m_n много меньше массы свободного электрона m_0 . Тогда $\varepsilon' \approx \varepsilon$ и из (21.21) получим

$$k_z(\varepsilon, N, \sigma) = ((2m_n)^{1/2}/\hbar) \sqrt{B(\varepsilon) - (N + 1/2) \hbar\Omega - \sigma g^*(\varepsilon) \mu_0 H}; \quad (21.31)$$

здесь введено обозначение

$$B(\varepsilon) = \frac{\varepsilon(\varepsilon + \varepsilon_g)(\varepsilon + \varepsilon_g + \Delta_0)(\varepsilon_g + 2/3\Delta_0)}{\varepsilon_g(\varepsilon_g + \Delta_0)(\varepsilon + \varepsilon_g + 2/3\Delta_0)}, \quad (21.32)$$

а величина

$$g^*(\varepsilon) = 2[1 + (1 - m_0/m_n)\Delta_0/(3\varepsilon + 3\varepsilon_g + 2\Delta_0)] \quad (21.33)$$

соответствует g^* -фактору, если сравнить (21.31) с (21.20). В случае $\varepsilon_g \gg \varepsilon$ из (21.32) и (21.33) имеем $B(\varepsilon) = \varepsilon$ и $g^* = 2$, следовательно, (21.31) совпадает с законом дисперсии (21.20).

При получении (21.31) из (21.21) мы пренебрегли m_n/m_0 по сравнению с единицей везде, кроме члена спинового расщепления. Кроме того, в выражении (21.33) прибавили 2, чтобы для свободного электрона ($m_n = m_0$) g^* -фактор равнялся двум. Закон дисперсии (21.31) довольно хорошо описывает зону проводимости полупроводников типа $A^{III}B^V$.

Интересно отметить, что из осцилляций термодинамических величин (эффект де Гааза — ван Альфена) и кинетических коэффициентов (осцилляции Шубникова — де Гааза) определяется (см. § 22) именно величина (21.33), которая в непараболическом случае отличается от g^* -фактора, введенного с помощью (21.27). Поэтому g^* -фактор (21.27), найденный из экспериментов по циклотронному резонансу, а также из оптических экспериментов, в принципе может отличаться от g^* -фактора (21.31), определенного из осцилляций термодинамических и кинетических величин. Из сравнения (21.29) и (21.33) видно, что оба определения g^* -фактора (21.27) и (21.31) совпадают при $\varepsilon_g \gg \varepsilon \sim N\hbar\Omega$, т. е. для малых заполнений зоны проводимости.

3. Плотность состояний в магнитном поле. Теперь определим плотность квантовых состояний электрона в магнитном поле. Мы только что показали, что одно квантовое состояние в магнитном поле определяется двумя квазинепрерывными (k_y, k_z) и двумя дискретными квантовыми числами N и σ . Поэтому полное число квантовых состояний единицы объема в магнитном поле

$$Z = \frac{1}{V} \sum_{N\sigma k_y k_z} \rightarrow \frac{L_2 L_3}{V (2\pi)^2} \sum_{N\sigma} \int dk_y dk_z, \quad (21.34)$$

где L_2 и L_3 — соответствующие размеры объема $V = L_1 L_2 L_3$, где находится электронный газ.

Из (21.18) и (21.25) видно, что энергия электрона проводимости зависит только от трех (N, σ, k_z) квантовых чисел, т. е. по k_y имеется вырождение. В силу этого, интеграл по dk_y в (21.34) можно взять, если учесть (21.13):

$$\int dk_y = \frac{1}{R^2} \int_{-L_1/2}^{L_1/2} dx_0 = \frac{L_1}{R^2}. \quad (21.35)$$

Из последних двух формул, после перехода к интегралу по энергии, имеем

$$Z = \frac{2}{(2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} \int \frac{dk_z(\epsilon, N, \sigma)}{d\epsilon} d\epsilon = \int g_H(\epsilon) d\epsilon, \quad (21.36)$$

где

$$g_H(\epsilon) = \frac{2}{(2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} \frac{dk_z(\epsilon, N, \sigma)}{d\epsilon} \quad (21.37)$$

— плотность квантовых состояний в магнитном поле; множитель 2 в (21.36), а также в (21.37) учитывает тот факт, что ϵ является четной функцией k_z .

Для того чтобы найти явный вид $g_H(\epsilon)$, надо исходить из конкретного закона дисперсии $k_z(\epsilon, N, \sigma)$. В простейшем случае он дается формулой (21.11), где не учтено спиновое расщепление. Тогда суммирование по σ сводится к множителю 2 и в силу (21.11) плотность состояний (21.37) принимает вид

$$g_H(\epsilon) = \frac{2}{(2\pi R)^2} \frac{(2m_n)^{1/2}}{\hbar} \sum_N [\epsilon - (N + 1/2) \hbar\Omega]^{-1/2}. \quad (21.38)$$

Суммирование в (21.38) производится по всем целым значениям N , для которых подрадикальное выражение положительно.

Отметим, что, если в (21.38) от суммирования по N перейти к интегралу в пределах от 0 до $(\epsilon - 1/2 \hbar\Omega)/\hbar\Omega = N_{\max}$, то (21.38) дает известный результат (4.12) для плотности состояний без магнитного поля.

Из (21.38) видно, что плотность состояний имеет особенность каждый раз, когда энергия совпадает с одним из уровней Ландау. Поведение $g_H(\epsilon)$ схематически показано на рис. 27. Непрерывно распределенные квантовые состояния в k -пространстве при наличии магнитного поля в основном группируются на уровнях Ландау, но при этом общее число состояний сохраняется. То, что на один уровень Ландау приходится много квантовых состояний связано с тем, что каждый уровень в магнитном поле вырожден по квантовому числу k_y . Кратность вырождения, согласно (21.35), равна

$$\sum_{k_y} \rightarrow \frac{L_2}{2\pi} \int dk_y = \frac{L_1 L_2}{2\pi R^2} = \\ = \frac{L_1 L_2}{2\pi} \frac{eH}{\hbar c}. \quad (21.39)$$

Следует отметить, что именно таким сингулярным поведением плотности состояний (21.38) обусловлены осцилляции магнитной восприимчивости и других физических свойств проводящих кристаллов в сильном магнитном поле.

Функция плотности состояний $g_H(\epsilon)$ в магнитном поле (21.37), согласно (21.31), имеет особенности типа (21.38) и в случае непараболической зоны, так как $B(\epsilon)$ является гладкой функцией ϵ . Однако в этом случае, также как и в случае (21.18), где учитывается спиновое расщепление уровней Ландау, число особенностей типа (21.38) удваивается и, соответственно, вместо каждой ветви $g_H(\epsilon)$ на рис. 27 будем иметь две ветви.

4. Химический потенциал и критерий вырождения электронного газа. Для изучения статистических свойств лучше всего исходить из большого термодинамического потенциала электронного газа

$$\Omega_e(\zeta, H, V, T) = -k_0 T \sum_{N\sigma k_y k_z} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\zeta - \epsilon(N, \sigma, k_z)}{k_0 T} \right) \right], \quad (21.40)$$

где ζ — химический потенциал электронного газа. Поскольку дифференциал Ω_e определяется термодинамическим соотношением

$$d\Omega_e = -S dT - P dV - nV d\zeta - MV dH, \quad (21.41)$$

то, зная $\Omega_e(\zeta, H, V, T)$, можно определить энтропию S , давление

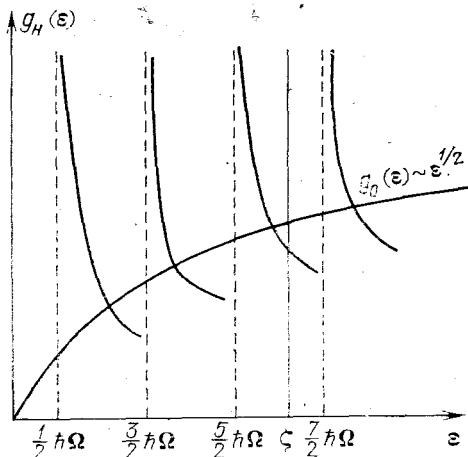


Рис. 27. Плотность квантовых состояний в магнитном поле $g_H(\epsilon)$. Здесь же для сравнения указана плотность состояний без магнитного поля $g_0(\epsilon)$

P , концентрацию n и намагниченность M электронного газа следующим образом [6]:

$$S = -(\partial\Omega_e/\partial T)_{\zeta, H, V}, \quad P = -(\partial\Omega_e/\partial V)_{\zeta, H, T}, \quad (21.42)$$

$$n = -V^{-1}(\partial\Omega_e/\partial\zeta)_{T, V, H}, \quad M = -V^{-1}(\partial\Omega_e/\partial H)_{T, V, \zeta}. \quad (21.43)$$

Используя (21.36), термодинамический потенциал (21.40) можем представить в виде

$$\Omega_e = -\frac{2k_0TV}{(2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} \int_{\varepsilon_0(N, \sigma)}^{\infty} \frac{dk_z(\varepsilon, N, \sigma)}{d\varepsilon} \ln \left[1 + \exp\left(\frac{\zeta - \varepsilon}{k_0T}\right) \right] d\varepsilon, \quad (21.44)$$

где нижняя граница интеграла $\varepsilon_0(N, \sigma)$ есть корень уравнения $k_z(\varepsilon_0, N, \sigma) = 0$.

Один раз (21.44) интегрируем по частям. Тогда получим

$$\Omega_e = -\frac{2V}{(2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} \int_{\varepsilon_0(N, \sigma)}^{\infty} k_z(\varepsilon, N, \sigma) f_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (21.45)$$

где $f_0(\varepsilon) = [1 + \exp((\varepsilon - \zeta)/(k_0T))]^{-1}$ — функция распределения Ферми.

Функция (21.45) совместно с (21.42) и (21.43) дает возможность найти теплоемкость $c_{V, H} = T(\partial S/\partial T)_{V, H}$, уравнение состояния $P = P(V, T, H)$, диамагнитную восприимчивость Ландау $\chi = M/H$. Однако мы здесь будем использовать (21.45) только для определения связи между концентрацией и химическим потенциалом и тем самым найдем явный вид критерия вырождения электронного газа в квантующем магнитном поле.

Учитывая, что $\partial f_0/\partial\zeta = -\partial f_0/\partial\varepsilon$, из (21.43) и (21.45) для концентрации электронов получим

$$n = \frac{2}{(2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} \int_{\varepsilon_0(N, \sigma)}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right) k_z(\varepsilon, N, \sigma) d\varepsilon. \quad (21.46)$$

Используя (21.31) для $k_z(\varepsilon, N, \sigma)$ на основе (21.46) можно найти связь между химическим потенциалом ζ и концентрацией электронов n в общем виде. Однако, чтобы продемонстрировать, как влияет квантование на уровень химического потенциала, рассмотрим простейший параболический закон дисперсии (21.11), где не учтено и спиновое расщепление. В этом случае (21.46) принимает вид

$$n = \frac{4}{(2\pi R)^2} \frac{(2m_n)^{1/2}}{\hbar} \sum_N \int_{\varepsilon_0(N)}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right) [\varepsilon - (2N + 1)\mu H]^{1/2} d\varepsilon, \quad (21.47)$$

где $\varepsilon_0(N) = (2N + 1)\mu H$, $\mu = e\hbar/2m_n c$ — эффективный магнетон Бора.

Рассмотрим невырожденный электронный газ с заданной концентрацией n . В этом случае $f_0 = \exp((\xi - \epsilon)/k_0T)$ и химический потенциал можно вычислить в любом квантующем магнитном поле, так как в (21.47) легко выполняется суммирование по осцилляторным квантовым числам N . На самом деле, если в (21.47) перейти к новой переменной $\epsilon' = \epsilon - (2N + 1)\mu H$, то легко интегрируется по $d\epsilon'$, и для концентрации имеем

$$n = \exp\left(\frac{\xi}{k_0T}\right) \cdot \frac{(2\pi m_n k_0T)^{1/2} m_n}{\pi^2 \hbar^3} \mu H \sum_{N=0}^{\infty} \exp\left[-(2N + 1) \frac{\mu H}{k_0T}\right]. \quad (21.48)$$

Если учтем, что

$$\sum_{N=0}^{\infty} \exp[-(2N + 1)(\mu H/k_0T)] = [2 \operatorname{sh}(\mu H/k_0T)]^{-1}, \quad (21.49)$$

то для химического потенциала получим

$$\exp\left(\frac{\xi}{k_0T}\right) = 4n \frac{\pi^{3/2} \hbar^3}{(2m_n k_0T)^{3/2}} \frac{\operatorname{sh}(\mu H/k_0T)}{\mu H/k_0T}. \quad (21.50)$$

Эта формула справедлива при любом магнитном поле для невырожденных полупроводников.

В квазиклассическом приближении, когда энергия теплового движения k_0T больше, чем разность между двумя соседними уровнями Ландау ($k_0T \gg \hbar\Omega = 2\mu H$), то из (21.50) следует известное выражение для химического потенциала (4.46).

В области сильных магнитных полей, когда $2\mu H \gg k_0T$, гиперболический синус в (21.50) можно заменить экспонентой. Тогда

$$\exp\left(\frac{\xi - \mu H}{k_0T}\right) = \frac{2\pi^{3/2} \hbar^3 n}{(2m_n k_0T)^{3/2}} \frac{k_0T}{\mu H}. \quad (21.51)$$

Заметим, что (21.51) можно получить непосредственно из (21.48), ограничиваясь первым членом суммирования $N = 0$. Такое состояние, когда электроны находятся на нулевом уровне Ландау, носит название *квантовый предел*. Таким образом, для невырожденного электронного газа квантовый предел реализуется при $2\mu H \gg k_0T$, а критерий отсутствия вырождения $\exp((\xi - \mu H)/k_0T) \ll 1$, согласно (21.51), имеет явный вид

$$[4\pi^{3/2} \hbar^3 n / (2m_n k_0T)^{3/2}] (k_0T / 2\mu H) \ll 1. \quad (21.52)$$

Видно, что в квантовом пределе увеличение магнитного поля способствует выполнению критерия отсутствия вырождения электронного газа. Это видно, также из (21.51), если переписать его в виде

$$\xi - \mu H = k_0T \ln \left[\frac{4n\pi^{3/2} \hbar^3}{(2m_n k_0T)^{3/2}} \right] - k_0T \ln \frac{2\mu H}{k_0T}. \quad (21.53)$$

Отсюда следует, что расстояние между уровнем химического потенциала и дном зоны проводимости в магнитном поле $(\xi - \mu H)$ за счет последнего члена растет с увеличением магнитного поля.

Для любой степени вырождения из (21.47) невозможно аналитически найти химический потенциал $\xi = \xi(n, H, T)$. Поэтому теперь рассмотрим другой предельный случай — *вырожденный электронный газ* с заданной концентрацией n . В этом случае $(-\partial f_0/\partial \epsilon)$ заменим $\delta(\epsilon - \xi)$ -функцией и из (21.47) будем иметь

$$n = \frac{(2m_n)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \mu H \sum_N [\xi(H) - (2N + 1)\mu H]^{1/2}. \quad (21.54)$$

При $H \rightarrow 0$ в (21.54) от суммы по N можно перейти к интегрированию и легко получить границу Ферми $\xi(0)$ в отсутствие магнитного поля (4.13).

Последняя формула дает возможность определить $\xi(n, H)$ для вырожденного электронного газа при любом значении магнитного поля. Простую аналитическую зависимость $\xi(n, H)$ можно получить только в области квантового предела, где электроны находятся на нижней параболе Ландау с номером $N = 0$. В случае квантового предела $\xi(H) < 3\mu H$, и в (21.54) нужно ограничиться только членом с $N = 0$. Тогда из (21.54) легко получим

$$\xi(H, n) = \mu H [1 + 3(\xi(0)/3\mu H)^3], \quad (21.55)$$

где $\xi(0) = (\hbar^2/2m_n)(3\pi^2 n)^{2/3}$ — граница Ферми при $H = 0$ [см. (4.13)].

Видно, что в области квантового предела ($\xi(H) < 3\mu H$) можно найти связь границы Ферми в магнитном поле $\xi(H)$ с границей Ферми $\xi(0)$ при $H = 0$. Из (21.55) легко показать, что в этой области $\xi(H, n)$ всегда больше $\xi(0)$ [рис. 28]. При $H \rightarrow \infty$ граница Ферми $\xi(H) \rightarrow \mu(H)$ и все электроны «конденсируются» на уровень Ландау с $N = 0$. Поскольку все уровни в магнитном поле, в том числе уровень с $N = 0$, вырождены с кратностью (21.39), то число квантовых состояний на уровне $N = 0$ достаточно для нахождения в нем всех электронов. Такое экстремальное распределение электронов соответствует картине на рис. 25, где радиус цилиндра, на поверхности которого расположены электроны, больше, чем радиус сферы Ферми при $H = 0$. В пределе $H \rightarrow \infty$ высота этого цилиндра стремится к нулю, а радиус $r_0 = R^{-1} \rightarrow \infty$. В таком состоянии движение электро-

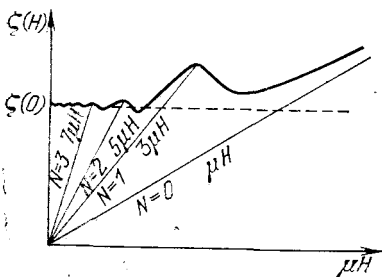


Рис. 28. Зависимость границы Ферми электронного газа с заданной концентрацией от магнитного поля

на рис. 25, где радиус цилиндра, на поверхности которого расположены электроны, больше, чем радиус сферы Ферми при $H = 0$. В пределе $H \rightarrow \infty$ высота этого цилиндра стремится к нулю, а радиус $r_0 = R^{-1} \rightarrow \infty$. В таком состоянии движение электро-

на вдоль магнитного поля полностью отсутствует, т. е. $k_z = 0$. Заметим, что описанная картина распределения имеет место при заданной концентрации электронного газа $n = \text{const}$.

Формула (21.55) справедлива в области магнитного поля, ограниченной снизу условием квантового предела $\zeta(H) < 3\mu H$, т. е.

$$3\mu H > (3/2)^{1/3} \zeta(0), \quad (21.56)$$

а сверху критерием сильного вырождения $[\zeta(H) - \mu(H)] \gg k_0 T$, т. е.

$$\zeta(0)/k_0 T (\zeta(0)/3\mu H)^2 \gg 1. \quad (21.57)$$

Из последнего неравенства видно, что в квантовом пределе увеличение магнитного поля приводит к нарушению критерия вырождения, т. е. способствует снятию вырождения. Это обстоятельство связано с тем, что плотность состояния пропорциональна H [см. (21.38)]. Поэтому с ростом магнитного поля у дна зоны проводимости помещается больше электронов и тем самым уменьшается граничная энергия Ферми.

Если объединить последние два условия, то получим неравенства, определяющие область магнитного поля, где электронный газ сильно вырожден и имеет место квантовый предел

$$(3/2)^{1/3} \zeta(0)/3\mu < H \ll (\zeta(0)/3\mu) (\zeta(0)/k_0 T)^{1/2}, \quad (21.58)$$

т. е. в этой области формула (21.55) верна.

Используя формулу (4.25) для вычисления температурного размытия границы Ферми, с точностью до $(k_0 T)^2$ получим

$$\zeta(H, T) = \zeta(H, 0) + (\pi^2/12) (k_0 T)^2 / (\zeta(H) - \mu H). \quad (21.59)$$

Заметим, что температурная поправка в (21.59) и (4.26) отличается знаком. Это связано с тем, что в квантовом пределе плотность состояний с ростом энергии уменьшается (правая ветвь на рис. 27), так как электронный газ ведет себя как одномерный. Поэтому электроны, находящиеся в энергетическом интервале $k_0 T$ ниже границы Ферми, возбуждаясь тепловым движением, занимают более широкий интервал энергии, чем $k_0 T$, и, следовательно, среднее положение уровня Ферми $\zeta(H, T)$ находится выше, чем при абсолютном нуле температуры. Поскольку в отсутствие магнитного поля плотность состояния $g_0(\epsilon)$ растет с энергией (см. рис. 27), то $\zeta(T)$ должен находиться ниже, чем $\zeta(0)$ [см. (4.26)].

Мы нашли связь (21.55) между границей Ферми в магнитном поле $\zeta(H)$ и без магнитного поля $\zeta(0)$ в квантовом пределе, когда ниже границы $\zeta(H)$ имеется всего один уровень Ландау с $N = 0$. В том случае, когда под границей Ферми находятся два и больше уровней Ландау, то из (21.54) трудно найти эту связь аналитически для всей области магнитного поля. Однако это можно сделать для дискретных значений H , при которых граница Ферми $\zeta(H)$ совпадает с каким-нибудь уровнем Ландау. Допустим номер этого уровня есть N . Тогда $\zeta(H_N) = (2N + 1)\mu H_N$.

Подставляя это значение в (21.54), получим

$$n = \frac{(2m_n)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \mu H_N \sum_{N'=0}^N [2(N - N') \mu H_N]^{1/2}, \quad (21.60)$$

что дает связь между границей Ферми $\zeta(0)$ при $H=0$ и границей Ферми для магнитных полей H_N , при которых она совпадает с уровнем Ландау с номером N :

$$\zeta(H_N) = \frac{N + 1/2}{\left(\frac{3}{2} \sum_{k=0}^N \sqrt{k}\right)^{2/3}} \zeta(0), \quad N \neq 0. \quad (21.61)$$

Отсюда можно оценить $\zeta(H_1) = (3/2)^{1/3} \zeta(0) \approx 1,146 \zeta(0)$, $\zeta(H_2) \approx 1,058 \zeta(0)$ и т. д. Легко показать, что для больших N соотношение (21.61) дает: $\zeta(H_N) \approx \zeta(0)$. Поведение функции $\zeta(H)$ с учетом (21.55) схематически показано на рис. 28. Видно, что граница Ферми является пульсирующей функцией магнитного поля: граница Ферми немного расширяется каждый раз, когда пересекает ее какой-нибудь уровень Ландау. После того как все уровни Ландау, кроме нулевого, выходят за границу Ферми, т. е. $\zeta(H) < 3\mu H$, при дальнейшем увеличении магнитного поля граница Ферми монотонно растет и асимптотически приближается к нулевому уровню Ландау с энергией $\epsilon_0 = \mu H$.

В общем случае, при любой степени вырождения электронов проводимости зависимость химического потенциала ζ от магнитного поля H и температуры для заданной концентрации n определяется уравнением (21.46). Для того чтобы написать это уравнение в явном виде необходимо исходить из конкретного закона дисперсии (21.11), (21.20) или (21.31). Ради простоты мы здесь используем простой параболический закон дисперсии без учета спинового расщепления (21.11). Тогда суммирование по σ в (21.46) дает множитель 2 и уравнение (21.46), в силу (21.11), принимает вид

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{1/2}}{\hbar (\pi R)^2} \sum_N \bar{F}_{1/2} \left(\eta - (2N + 1) \frac{\mu H}{k_0 T} \right), \quad (21.62)$$

где $F_{1/2}$ — однопараметрический интеграл Ферми (4.33) с индексом $r = 1/2$, а $\eta = \zeta(H, T)/k_0 T$ — приведенный химический потенциал электронов проводимости в магнитном поле.

Если использовать закон дисперсии (21.20) или (21.31) в уравнении (21.46), то можно исследовать влияние спинового расщепления на статистику электронов проводимости. Для параболической зоны (21.20) такое исследование проведено в работе [7]. В этом случае выражение для концентрации электронов проводимости (21.46) имеет вид

$$n = \frac{2(2m_n k_0 T)^{1/2}}{\hbar (2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} F_{1/2} \left(\eta - (2N + 1) \frac{\mu H}{k_0 T} - \sigma g_0 \frac{\mu_0 H}{k_0 T} \right). \quad (21.63)$$

Используя асимптотику интеграла Ферми (4.37) и (4.38), из (21.62) или (21.63) можно получить все частные результаты. В общем случае уравнения (21.62) и (21.63) можно решить численно и найти график зависимостей $\xi = \xi(H, T, n)$.

5. Магнитное вымораживание носителей. При определении критерия вырождения выше мы предполагали, что концентрация электронов проводимости не зависит от магнитного поля, и считали, что $n = \text{const}$. Однако в присутствии квантующего магнитного поля n может измениться: с ростом магнитного поля n уменьшается, т. е. число электронов, локализованных на примесных уровнях, с ростом магнитного поля увеличивается. Это явление носит название магнитного «вымораживания» носителей.

Одной из причин вымораживания носителей является то, что в магнитном поле изменяется энергетический спектр: дно зоны проводимости поднимается на величину $(\mu - \mu_0)H$, а донорный уровень расщепляется на два подуровня. Рассмотрим для примера примесь одновалентных доноров, электроны которых находятся в s -состоянии. Основной уровень электрона в локальном центре с энергией $(-\varepsilon_d)$ в магнитном поле расщепляется. Величину этого расщепления можно найти в рамках водородоподобной модели примесного атома. Однако для простоты предположим, что энергии расщепленных подуровней равны $-\varepsilon_d \pm \mu_0 H$ (см. рис. 29). Легко вычислить число ионизованных донорных атомов при температуре T , которое равно

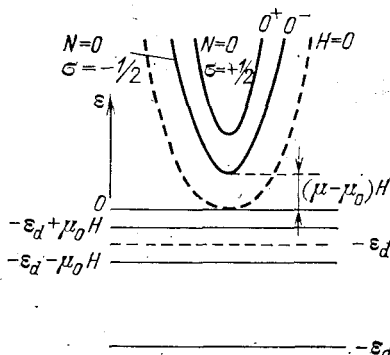


Рис. 29. Схема изменения спектра электронного полупроводника в магнитном поле

$$p_d = N_d \left[\left(A + \exp \left(\frac{2\mu_0 H}{k_0 T} \right) \right)^{-1/2} + \left(A + \exp \left(-\frac{2\mu_0 H}{k_0 T} \right) \right)^{-1/2} \right], \quad (21.64)$$

где N_d — концентрация донорных примесей, а

$$A = 1 + 2 \exp((\varepsilon_d + \xi)/k_0 T) \operatorname{ch}(\mu_0 H/k_0 T). \quad (21.65)$$

Допустим, что магнитное поле сильное и в зоне проводимости реализуется квантовый предел. Тогда в (21.63) достаточно оставить всего два члена: $N=0, \sigma = -1/2$ и $N=0, \sigma = +1/2$. В этом случае концентрация электронов проводимости

$$n = \frac{2(2m_n k_0 T)^{1/2}}{\hbar (2\pi R)^2} [F_{1/2}(\eta^+) + F_{1/2}(\eta^-)], \quad (21.66)$$

где $\eta^\pm = (1/k_0 T)[\xi(H) - (\mu \pm \mu_0)H]$.

Из уравнения нейтральности $n = p_d$, используя (21.64) и (21.66), можно численно найти химический потенциал ξ , а затем

из (21.66) определить концентрацию электронов проводимости для различных магнитных полей при заданной температуре и параметрах полупроводника ϵ_a и N_a . Такой расчет показывает, что действительно с ростом H концентрация электронов проводимости уменьшается [7].

Другой механизм вымораживания носителей связан с сжатием волновых функций валентного электрона примесных атомов в магнитном поле. В работе [8] рассмотрена водородоподобная модель примесных атомов и показано, что в сильном магнитном поле волновая функция основного состояния из сферической формы превращается в вытянутый эллипсоид с большой осью в направлении магнитного поля \mathbf{H} . Волновая функция сжата в плоскости, перпендикулярной к направлению \mathbf{H} , среднее расстояние электрона от ядра уменьшается и энергия ионизации возрастает. Вымораживание электронов проводимости было обнаружено в работе [9] при исследовании эффекта Холла в области низких температур на образцах n -InSb.

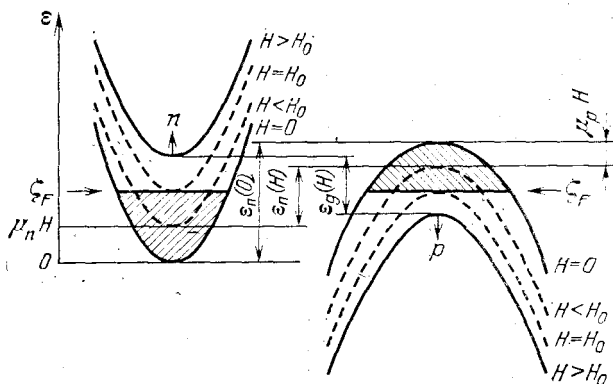


Рис. 30. Изменение края зоны в полуметаллах с ростом магнитного поля; переход полуметалл — полупроводник

Очевидно, при наличии магнитного вымораживания носителей сопротивление образца с магнитным полем может изменяться на порядок и больше. Это явление не следует смешивать с обычным магнетосопротивлением, при котором концентрация носителей тока считается постоянной и независимой от магнитного поля.

6. Переход полуметалл — полупроводник. Магнитное поле влияет также на концентрацию носителей в собственных полупроводниках, так как при квантовании дно зоны проводимости и потолок валентной зоны смещаются относительно друг друга, тем самым увеличивается ширина запрещенной зоны.

Большой интерес представляет поведение бесщелевых полупроводников и полуметаллов в условиях квантования. В последнем случае магнитное поле вызывает даже качественное изменение — с ростом магнитного поля полуметалл становится полупроводником.

Рассмотрим полуметалл с изотропным параболическим законом дисперсии в кваптующем магнитном поле. Для простоты спиновое расщепление не будем учитывать. Схема изменения края зон с ростом магнитного поля показана на рис. 30 (ср. с рис. 11). Если за начало отсчета взять дно зоны проводимости при $H = 0$, то энергия электрона проводимости и дырки, соответственно, имеют вид

$$\varepsilon_n(N, k_z) = (N + 1/2) \hbar\Omega_n + \hbar^2 k_z^2 / 2m_n, \quad (21.67)$$

$$\varepsilon_p(N', k_z') = \varepsilon_n(0) - (N' + 1/2) \hbar\Omega_p - \hbar^2 k_z'^2 / 2m_p, \quad (21.68)$$

где $\varepsilon_n(0)$ — перекрытие зон при $H = 0$, $\Omega_{n,p} = eH/m_{n,p}c$ — соответствующие циклотронные частоты, m_n и m_p — эффективные массы электрона и дырки.

Из рис. 30 видно, что в магнитном поле дно зоны проводимости поднимается на величину $\mu_n H = 1/2 \hbar\Omega_n = \hbar e H / 2m_n c$, а потолок валентной зоны опускается на величину $\mu_p H = 1/2 \hbar\Omega_p = \hbar e H / 2m_p c$. Поэтому перекрытие зон в магнитном поле уменьшается и равно

$$\varepsilon_n(H) = \varepsilon_n(0) - \hbar e H / 2cm^*, \quad (21.69)$$

где $m^* = (1/m_n + 1/m_p)^{-1}$ — приведенная эффективная масса электрона и дырки.

При некотором значении магнитного поля $H = H_0$ дно зоны проводимости и потолок валентной зоны будут на одном уровне и перекрытие обратится в нуль. Для этого поля из условия $\varepsilon_n(H_0) = 0$ и (21.69) получим

$$H_0 = (2cm^*/e\hbar) \varepsilon_n(0). \quad (21.70)$$

Подставляя (21.67) в (21.46), для концентрации электронов проводимости получим выражение

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{1/2}}{\hbar (\pi R)^2} \sum_N F_{1/2} \left(\eta_F - (2N + 1) \frac{\mu_n H}{k_0 T} \right), \quad (21.71)$$

где $\eta_F = \xi_F(H)/k_0 T$, а $F_{1/2}$ — интеграл Ферми (4.33).

На основе спектра (21.68) нетрудно вычислить также концентрацию дырок

$$p = \frac{(2m_p k_0 T)^{1/2}}{\hbar (\pi R)^2} \sum_{N'} F_{1/2} \left(\frac{\varepsilon_n(0)}{k_0 T} - (2N' + 1) \frac{\mu_p H}{k_0 T} - \eta_F \right). \quad (21.72)$$

Проанализируем изменение концентрации носителей с магнитным полем при абсолютном нуле температуры $T = 0$. При этом, в силу (4.37), из последних двух формул получим

$$n = \frac{(2m_n)^{1/2}}{\hbar (\pi R)^2} \sum_{N=0}^{N_{\max}} [\xi_F(H) - (2N + 1) \mu_n H]^{1/2}, \quad (21.73)$$

$$p = \frac{(2m_p)^{1/2}}{\hbar (\pi R)^2} \sum_{N'=0}^{N'_{\max}} [\varepsilon_n(0) - (2N' + 1) \mu_p H - \xi_F(H)]^{1/2}, \quad (21.74)$$

где

$$N_{\max} = \left[\frac{\zeta_F(H) - \mu_n H}{2\mu_n H} \right], \text{ а } N'_{\max} = \left[\frac{\varepsilon_{\Pi}(0) - \mu_p H - \zeta_F(H)}{2\mu_p H} \right]. \quad (21.75)$$

Теперь покажем, что при смещении края зон в магнитном поле уровень заполнения зон, т. е. граница Ферми, отсчитанная от дна зоны проводимости при $H=0$ остается на месте при любом значении магнитного поля. Действительно, из (21.73) и (21.74) видно, что условие нейтральности $n=p$ имеет простой вид

$$\sum_{N=0}^{N_{\max}} (N_{\max} - N)^{1/2} = \sum_{N'=0}^{N'_{\max}} (N'_{\max} - N')^{1/2}. \quad (21.76)$$

Отсюда следует, что в рассматриваемом случае изотропной зоны для выполнения $n=p$ должно иметь место $N_{\max} = N'_{\max}$. Тогда, используя (21.75), легко получим

$$\zeta_F(H) = (m_p / (m_n + m_p)) \varepsilon_{\Pi}(0) = (m^* / m_n) \varepsilon_{\Pi}(0). \quad (21.77)$$

Сравнение этого выражения с (5.29) показывает, что $\zeta_F(H) = \zeta_F(0)$.

Подставляя (21.77) в (21.73) или (21.74) для концентрации носителей в полуметалле при $T=0$ в области магнитных полей $H < H_0$ получим простое выражение

$$n(H) = p(H) = \frac{H}{\pi^2} \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^{3/2} \sum_{N=0}^{N_{\max}} [H_0 - (2N + 1)H]^{1/2}, \quad (21.78)$$

где $N_{\max} = [(H_0 - H)/2H]$.

Видно, что для нахождения концентрации носителей в полуметалле с изотропной зоной при заданном значении магнитного поля H достаточно знать единственный параметр полуметалла H_0 , определенный в (21.70).

При конечных температурах $T \neq 0$ нужно составить уравнение нейтральности $n=p$ из (21.71) и (21.72) и из него найти η_F . Затем, подставляя найденные значения η_F в (21.71) определить $n(T, H)$.

Таким образом, в магнитном поле смещаются края зон, но уровень их заполнения остается на месте, независимо от магнитного поля. Поэтому меняется расстояние от краев зон до границы Ферми, а также перекрытие зон с ростом магнитного поля уменьшается. Это приводит к перетеканию электронов из зоны проводимости в валентную зону и концентрация носителей уменьшается по формуле (21.78), исчезая полностью при $H = H_0$.

Дальнейшее увеличение магнитного поля ($H > H_0$) приводит к возникновению щели между зоной проводимости и валентной зоной. Величина этой щели — запрещенной зоны, как видно из рис. 30, равна

$$\varepsilon_g(H) = \hbar e H / 2cm^* - \varepsilon_{\Pi}(0), \quad H > H_0. \quad (21.79)$$

Следовательно, при полях $H > H_0$ полуметалл переходит в полупроводник. В этой области магнитных полей носители возникают только при конечных температурах $T \neq 0$ активационным путем.

Эти результаты нетрудно обобщить на случай наличия спинового расщепления и анизотропного спектра, а также на случай непараболической зоны.

В заключение отметим, что вышеизложенный непрерывный переход полуметалл — полупроводник имеет место только в том случае, если в процессе перехода из состояния с перекрытием $\epsilon_n(0)$ в состояние с запрещенной зоной (21.79) не происходит качественного изменения энергетического спектра электронов образца, при котором теряет смысл само понятие границ зон. Такое качественное изменение спектра вблизи перехода полуметалл — полупроводник связано с образованием нового состояния — фазы вещества, получившего название *экситонного диэлектрика* [10]. Экситонный диэлектрик представляет собой систему, в которой электроны и дырки при определенных условиях образуют связанные состояния — экситоны. Из-за нейтральности экситонов в этом состоянии вещество ведет себя как изолятор. Таким образом, при выполнении определенных условий [10] с изменением магнитного поля возможен переход полуметалл — экситонный диэлектрик — полупроводник.

§ 22. Гальваномагнитные явления в квантующем магнитном поле

В третьей главе было показано, что теорию явлений переноса как при наличии электрического поля, так и градиента температуры можно построить единым подходом*) на основе кинетического уравнения. Однако это уравнение имеет квазиклассическую природу и поэтому применимо в определенных условиях (см. § 8). Например, оно применимо для внешних магнитных полей, удовлетворяющих условиям (8.22) или (8.23). Когда эти условия не выполняются, т. е. когда

$$\hbar\Omega \geq \epsilon, \quad (22.1)$$

где $\bar{\epsilon}$ — характерная энергия носителей заряда; причем если носители не вырождены $\bar{\epsilon} = k_0T$, а если вырождены $\bar{\epsilon} = \zeta_F$ — граничная энергия Ферми, кинетическое уравнение неприменимо, и теорию явлений переноса надо построить на квантовой основе. Это утверждение становится очевидным, если условие (22.1) представить в виде

$$\lambda \geq R, \quad (22.2)$$

где $\lambda = \hbar / \sqrt{m\bar{\epsilon}}$ — длина де-бройлевской волны носителей, $R =$

*) Имеется в виду, что в рамках кинетического уравнения можно ввести обобщенную возмущающую силу (9.16), вызывающую отклонение от равновесного распределения носителей заряда.

$= (\hbar/m\Omega)^{1/2}$ — радиус первой возможной орбиты [см. (21.14)]. Действительно, если выполняется условие (22.2) и следовательно (22.1), то понятие траектории отсутствует и квазиклассические представления неприменимы.

Магнитные поля, удовлетворяющие условию (22.1), при которых расстояние между двумя соседними уровнями Ландау (см. § 21) сравнимо или больше, чем характерная энергия носителей, называются *квантующими*.

Отметим, что с ростом магнитного поля выполнению условия квантования (22.1) должно предшествовать выполнение условия $\Omega\tau \gg 1$ (9.55). На классическом языке это условие означает, что в таких магнитных полях за время свободного пробега на траектории носителей формируются круговые циклотронные орбиты, а на квантовом языке условие (9.55), написанное в виде $\hbar\Omega \gg \gg \hbar/\tau$ означает, что уширение уровней Ландау за счет столкновения намного меньше расстояния между ними. Таким образом, для проявления квантования движения носителей в магнитном поле в реальных кристаллах уширение уровней Ландау из-за столкновения \hbar/τ и тепловое размытие k_0T должны быть намного меньше расстояния между этими уровнями [см. (9.55) и (22.1)].

В данном и в следующем параграфах рассмотрим основы теории явлений переноса в поперечном (перпендикулярном электрическому полю и градиенту температуры) квантуемом магнитном поле. В этом случае кинетическое уравнение, как было показано выше, неприменимо и нет единого подхода к теории гальваномагнитных и термомагнитных эффектов. Дело в том, что в этом случае неизвестно, как ввести обобщенную силу типа (9.16), учитывающую электрическое поле и градиент температуры. В электрическом поле динамическую силу $-eE$ можно включить в гамильтониан, следовательно, в уравнение матрицы плотности, но «сила» $-(\epsilon - \xi)/k_0T)k_0\nabla T$ в (9.16) носит статистический характер и ее нельзя включить в исходный гамильтониан. Поэтому в квантовой области магнитных полей гальваномагнитные и термомагнитные явления необходимо рассмотреть в отдельности. В этом параграфе рассмотрим гальваномагнитные явления.

1. Тензор электрической проводимости в поперечном квантуемом магнитном поле. Впервые теория магнетосопротивления металлов с учетом квантования движения электронов проводимости в магнитном поле была построена Титейка [11]. Метод вычисления тензора электропроводности в квантуемом магнитном поле, предложенный автором [11], основан на том, что электрон, движущийся в однородных скрещенных магнитном и электрическом полях, обладает стационарными состояниями. Действительно, если постоянное однородное магнитное поле \mathbf{H} с калибровкой (21.2) направить по оси z , а постоянное однородное электрическое поле \mathbf{E} — по оси x , то гамильтониан в таких скрещенных полях имеет

$$\widehat{\mathcal{H}}_E = \widehat{\mathcal{H}} + eEx, \quad (22.3)$$

где $\widehat{\mathcal{H}}$ — гамильтониан электрона в магнитном поле (21.3).

Легко видеть, что и в этом случае сохраняются компоненты импульса p_y и p_z . Поэтому собственные функции (22.3) также имеют вид (21.12), а электрическое поле E только смещает положение равновесия магнитного осциллятора Ландау, которое вместо (21.13) будет определяться выражением

$$x_0 = -\hbar k_y / m_n \Omega - eE / m_n \Omega^2. \quad (22.4)$$

Тогда для собственных значений гамильтониана (22.3), т. е. для энергии электрона в скрещенных полях в квантовом состоянии $\alpha \equiv (N, k_y, k_z)$, получим

$$\varepsilon_\alpha^E = \varepsilon(N, k_z) + eEx_0, \quad (22.5)$$

где $\varepsilon(N, k_z) \equiv \varepsilon_\alpha$ — энергия электрона в магнитном поле (21.11), а x_0 дается формулой (22.4).

Для вычисления электропроводности Титейка полагает плотность тока вдоль направления электрического поля равной

$$j_x = -e \sum_{NN'} \sum_{k_z k_z'} \sum_{\substack{x_0 < 0 \\ x_0 > 0}} \{W_{\alpha\alpha'} f_\alpha (1 - f_{\alpha'}) - W_{\alpha'\alpha} f_{\alpha'} (1 - f_\alpha)\}, \quad (22.6)$$

где $W_{\alpha\alpha'}$ — вероятность перехода электрона из состояния α в состояние α' под действием рассеивающего потенциала, $f_\alpha = f(\varepsilon_\alpha^E)$ — равновесная функция распределения электронов.

Выражение для плотности тока (22.6) основано на квазиклассическом представлении, что электроны, переходящие из квантового состояния $\alpha (x_0 < 0)$ в состояние $\alpha' (x_0 > 0)$, пересекают плоскость $x = 0$ слева направо. Первое слагаемое в (22.6) дает число электронов, пересекающих плоскость $x = 0$ слева направо в единицу времени в результате рассеяния, а второе представляет собой поток электронов через эту же плоскость справа налево.

Разлагая (22.6) по электрическому полю E , в линейном приближении получим $j_x = \sigma_{11} E$. Таким способом Титейка удалось определить явный вид σ_{11} путем непосредственного вычисления плотности тока. Титейка рассмотрел вырожденный электронный газ (металл) с квадратичным изотропным законом дисперсии и вычислил магнетосопротивление в случае рассеяния электронов на акустических фонах только в квантовом пределе, т. е. когда все магнитные осцилляторы Ландау находятся в основном невозбужденном состоянии с $N = 0$; тем самым осцилляции магнетосопротивления, наблюдаемые впервые Шубниковым и де Гаазом [12], выпали из рассмотрения.

Давыдов и Померанчук [13] применили метод Титейка к полуметаллу — висмуту и в случае рассеяния на точечных дефек-

тах (короткодействующий потенциал) решетки рассмотрели осцилляции магнетосопротивления.

Поскольку метод Титейка, с помощью которого рассчитан эффект, чисто квантового характера, основывается на некоторых квазиклассических наглядных представлениях, следовало его обобщить, исходя из общих принципов квантовой механики и статистической физики. Это было сделано в работе Адамса и Гольдштейна [14] и несколько иным способом в работе Кубо, Хасегавы и Хашицуме [15].

Исходя из решения уравнения для матрицы плотности $\hat{\rho}$ Адамс и Гольдштейн [14] построили последовательную квантовую теорию поперечных гальваномагнитных явлений в полупроводниках. В первом исчезающем приближении по рассеянию они получили следующие выражения для недиагональной

$$\sigma_{12} = e\pi n/H \quad (22.7)$$

и диагональной компоненты тензора электропроводности [14]

$$\sigma_{11} = (e^2/2) \sum_{\alpha\alpha'} (-\partial f_{\alpha}/\partial \varepsilon_{\alpha}) (x_{\alpha'} - x_{\alpha})^2 W_{\alpha\alpha'}, \quad (22.8)$$

где

$$W_{\alpha\alpha'} = (2\pi/\hbar) \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{q}}|^2 |\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})_{\alpha\alpha'}|^2 \delta(\varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_{\alpha}) \quad (22.9)$$

— вероятность перехода электрона из состояния α в α' .

Формула (22.8) совпадает с выражением, предложенным Титейка [11, 13]. При полях $\hbar\Omega \ll \varepsilon$ (неквантующие магнитные поля) для заданного механизма рассеяния и закона дисперсии результат вычисления по формуле (22.31) совпадает с соответствующим результатом кинетического уравнения (13.23) при $\Omega\tau \gg 1$.

Отметим, что простые выражения для компонент тензора проводимости (22.7) и (22.8), как было показано в работе [4], справедливы и в случае непараболической зоны.

2. Рассеяние носителей заряда в квантующем магнитном поле. Как видно из (22.8), для вычисления явного вида диагональной компоненты σ_{11} надо знать вероятность перехода $\alpha \rightarrow \alpha'$ за счет рассеяния носителей на фононах или примесях. Теория рассеяния в борновском приближении при отсутствии магнитного поля, точнее, когда магнитное поле на процесс рассеяния не влияет, изложена в §§ 10 и 11. Здесь рассмотрим, как изменяются результаты этих параграфов в квантующем магнитном поле.

Рассеяние на фононах. Потенциал рассеяния носителей на акустических, пьезоакустических, неполярных и полярных оптических фононах приведены в (11.27), (11.97), (11.49) и (11.72), соответственно. Вычисление вероятности перехода такое же, как и в § 11, только надо учитывать, что в квантующем магнитном поле квантовые состояния характеризуются квантовыми числами $\alpha \equiv (N, k_y, k_z)$, а движение электрона проводимости описыва-

ется волновой функцией (21.12). Поэтому вместо матричного элемента (11.29) в квантующем магнитном поле имеем

$$\langle \alpha' | \exp(\pm i \mathbf{q} \mathbf{r}) | \alpha \rangle = J_{NN'} \delta_{k_y, k_y \pm q_y} \delta_{k_z, k_z \pm q_z}, \quad (22.10)$$

где учтено, что волновые функции (21.12) нормированы на единицу объема и введено обозначение

$$J_{NN'} = \int \varphi_{N'}(x - x_{\alpha'}) \exp(\pm i q_x x) \varphi_N(x - x_{\alpha}) dx. \quad (22.11)$$

Поступая также, как и в § 11 и учитывая (22.10), в результате для вероятности перехода $\alpha \rightarrow \alpha'$, благодаря рассеянию на фононах, в квантующем магнитном поле получим обобщенное выражение

$$W_{\alpha\alpha'} = \sum_{\mathbf{q}} w(\mathbf{q}) |J_{NN'}|^2 (A_{\alpha\alpha'}^+(\mathbf{q}) + A_{\alpha\alpha'}^-(\mathbf{q})), \quad (22.12)$$

где

$$A_{\alpha\alpha'}^{\pm}(\mathbf{q}) = \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_{\alpha} \mp \hbar \omega_{\mathbf{q}}) \delta_{k_y, k_y \pm q_y} \delta_{k_z, k_z \pm q_z}. \quad (22.13)$$

Формула (22.12) является общей для всех типов фононов, только множитель $w(\mathbf{q})$ различен для каждого типа фононов:

для акустических фононов

$$w(\mathbf{q}) = \pi E_1^2 q^2 / \rho \omega(\mathbf{q}); \quad (22.14)$$

для пьезоакустических фононов

$$w(\mathbf{q}) = \pi e^2 E_{pz}^2 / \kappa^2 \rho \omega(\mathbf{q}); \quad (22.15)$$

для неполярных оптических фононов

$$w(\mathbf{q}) = (\pi E_0^2 / \rho \omega_0) (\pi/a)^2; \quad (22.16)$$

для полярных оптических фононов

$$w(\mathbf{q}) = (4\pi^2 e^2 / \kappa^*) (\omega(\mathbf{q}) / q^2). \quad (22.17)$$

Здесь все обозначения такие же, как и в § 11, а объем образца считается равным единице, ρ — плотность кристалла.

Рассеяние на ионах примеси. Экранированный кулоновский потенциал иона одновалентного атома примеси (10.26), помещенного в точке \mathbf{r}_j , может быть представлен в виде фурье-разложения

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \pm \frac{4\pi e^2}{\kappa} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)]}{q^2 + r_H^{-2}}, \quad (22.18)$$

где r_H — радиус экранировки кулоновского поля иона в квантующем магнитном поле, который дается общим выражением [16]

$$r_H^{-2} = (4\pi e^2 / \kappa) \int (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) g_H(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (22.19)$$

$g_H(\varepsilon)$ — плотность состояний в магнитном поле (21.37) или (21.38).

Если концентрация ионов примеси N_i не слишком велика и они расположены хаотично, так что можно пренебречь интерференцией от отдельных примесных центров (см. § 10), то вероятность рассеяния $W_{\alpha\alpha'}$ в единице объема за единицу времени равна вероятности рассеяния $\alpha \rightarrow \alpha'$ на одном центре, умноженной на N_i . В результате, подставляя (22.18) в (22.9) и учитывая (22.10), получаем

$$W_{\alpha\alpha'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{4\pi e^2}{\kappa} \right)^2 N_i \times \sum_q \frac{|I_{NN'}|^2}{(q^2 + r_H^{-2})^2} \delta(\varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_\alpha) \delta_{k_y, k_y + q_y} \delta_{k_z, k_z + q_z}, \quad (22.20)$$

где $I_{NN'}$ дается формулой (22.11) и можно показать, что при $N' > N$ [17]

$$|I_{NN'}|^2 = \left(\frac{1}{N|N'|} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{z}{2}\right) z^{\frac{N'-N}{2}} \mathcal{L}_N^{N'-N}(z), \quad (22.21)$$

$\mathcal{L}_N^{N'-N}(z)$ — обобщенный полином Лагерра, а $z = q_\perp^2 R^2/2$, $q_\perp^2 = q_x^2 + q_y^2$.

Рассеяние на короткодействующем потенциале — точечные дефекты. Вероятности перехода при рассеянии на фононах (22.12) и на ионах примеси (22.20) были найдены в борновском приближении на основе формулы (22.9). Однако в случае короткодействующего потенциала задачу о рассеянии в кваптующем магнитном поле, как было показано в работе [18], можно решить в общем виде, не используя борновского приближения. В случае короткодействующего потенциала (точечные дефекты) для вероятности перехода в магнитном поле в работе [18] было получено следующее точное выражение

$$W_{\alpha\alpha'} = \frac{(2\pi\hbar)^3 N_i}{m^2} [\varphi_{N'}(x_{\alpha'}) \varphi_N(x_\alpha)]^2 \frac{f^2 \delta(\varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_\alpha)}{1 + (Lf)^2}; \quad (22.22)$$

здесь $\varphi_N(x_\alpha)$ — осцилляторные функции,

$$f = (m/2\pi\hbar^2) \int V(\mathbf{r}) \varphi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (22.23)$$

— амплитуда рассеяния, $V(\mathbf{r})$ — короткодействующий потенциал рассеивающего центра, N_i — концентрация этих центров, $\varphi_0(\mathbf{r})$ — волновая функция свободного электрона с нулевой энергией;

$$L(\varepsilon) = (\hbar/\sqrt{2m}R^2) \sum_N (\varepsilon - \varepsilon_N)^{-1/2}, \quad (22.24)$$

где сумма по N берется по всем положительным значениям подрадикального выражения, ε_N — дается (21.9).

Отметим, что выражения для вероятностей перехода, приведенные в этом пункте, были получены с использованием волновых функций свободного электрона в магнитном поле (21.12)

без учета блоховских множителей, появляющихся в кристалле. Множители Блоха могут быть учтены в теории рассеяния и в квантующем магнитном поле, как это было сделано в § 12, когда магнитное поле неквантующее. Однако на этом вопросе мы здесь останавливаться не будем.

3. Поперечное магнетосопротивление в квантовом пределе.

Выражения для компонент гальваномагнитных тензоров (22.7) и (22.8) на основе (13.14) и (13.15) дают возможность вычислить сопротивление и коэффициент Холла в сильных магнитных полях ($\nu = \Omega\tau \gg 1$), при этом безразмерный параметр $\nu_{\text{KB}} = \hbar\Omega/\bar{\epsilon}$ может иметь произвольные значения. Для заданного механизма рассеяния и закона дисперсии при $\nu_{\text{KB}} \ll 1$ (22.8) дает тот же результат, что и (13.23) при $\nu \gg 1$. Недиагональная компонента σ_{12} при полях $\nu \gg 1$, как видно из (13.23) и (22.7), независимо от механизма рассеяния и закона дисперсии, определяется только концентрацией носителей тока и величиной магнитного поля.

В сильных магнитных полях ($\nu \gg 1$) из (13.23) следует, что

$$\sigma_{11}/\sigma_{12} \ll 1, \quad (22.25)$$

следовательно, σ_{11} по сравнению с σ_{12} можно пренебречь. Тогда в сильных магнитных полях ($\nu \gg 1$) сопротивление (13.14) и коэффициент Холла (13.15), согласно (22.25), принимают простой вид

$$\rho(H) = \sigma_{11}/(\sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2) \approx \sigma_{11}/\sigma_{12}^2, \quad (22.26)$$

$$R = -H^{-1} \sigma_{12}/(\sigma_{11}^2 + \sigma_{12}^2) \approx -1/H\sigma_{12}. \quad (22.27)$$

Из (22.7) и (22.27) следует, что R в проводниках с одним типом носителей тока определяется только концентрацией: $R = -1/nec$.

Для расчета сопротивления $\rho(H)$, как видно из (22.26), необходимо вычислить σ_{11} на основе формулы (22.8) при заданном механизме рассеяния, законе дисперсии и степени вырождения носителей. Очевидно, что такую задачу в общем виде решить невозможно. Поэтому мы должны рассмотреть простые модели и различные частные случаи.

В этом пункте рассмотрим экстремальную ситуацию — квантовый предел, когда все носители находятся на первом уровне Ландау с $N=0$. В невырожденных полупроводниках критерием квантового предела является $\hbar\Omega \gg k_0T$, а для вырожденных полупроводников квантовый предел достигается, если $k_0T \ll \zeta(H) < 3/2\hbar\Omega$, где $\zeta(H)$ — уровень Ферми в магнитном поле (см. § 21).

Подставляя выражения вероятностей, приведенные в предыдущем пункте, в (22.8) и используя (22.26), получим зависимости сопротивления от магнитного поля и температуры в квантовом пределе при различных механизмах рассеяния. Эти зависимости показаны в табл. 11, из которой видно, что в квантовом пределе зависимости $\rho(H, T)$ существенно различны для разных

механизмов рассеяния и они сильно отличаются для невырожденных и сильно вырожденных полупроводников. Экспериментально, если установить указанные в табл. 11 зависимости в квантовом пределе, можно судить о доминирующем механизме рассеяния носителей. Отметим, что в классически сильном поперечном магнитном поле ($\Omega\tau \gg 1$, $\hbar\Omega \ll \epsilon$) для всех механизмов рассеяния и при любой степени вырождения носителей тока сопротивление от магнитного поля не зависит — оно насыщается (см. § 15).

При получении результатов табл. 11 был использован параболический закон дисперсии и предположено, что концентрация носителей тока задана и не зависит от магнитного поля. В случае сильного вырождения расчет $\rho(H, T)$ прост. Однако в случае

Таблица 11

Зависимость поперечного магнетосопротивления от магнитного поля и температуры в квантовом пределе для разных механизмов рассеяния

Механизмы рассеяния	$\rho(H, T)$		
	невырожденные полупроводники	сильно вырожденные полупроводники	
Акустические фононы	Низкие температуры, $N_q = 0$	$\sim H^{5/2} T^{-3/2}$	$\sim H^{11/2} T^0$
	Высокие температуры $N_q \approx \approx k_0 T / \hbar \omega_q$	$\sim H^2 T^{-1/2}$	$\sim H^5 T$
Пьезоакустические фононы	Низкие температуры $N_q = 0$	$\sim H^{3/2} T^{-3/2}$	$\sim H^{9/2} T^0$
	Высокие температуры $N_q \approx \approx k_0 T / \hbar \omega_q$	$\sim H T^{-1/2}$	$\sim H^4 T$
Полярные оптические фононы; высокие температуры $N_q \approx k_0 T / \hbar \omega_0$		$\sim H T^{-1/2}$	$\sim H^4 T$
Точечные дефекты		$\sim H^2 T^{-3/2}$	$\sim H^5 T^0$
Ионы примеси		$\sim H^0 T^{-3/2}$	$\sim H^3 T^0$

невырожденных полупроводников, если использовать борновское приближение для вероятности перехода, то интеграл по энергии в σ_{11} логарифмически расходится. Эта расходимость является следствием того, что плотность состояний $g_H(\epsilon)$, которая в квантовом пределе имеет сингулярность вида $g_H \sim (\epsilon - \hbar\Omega/2)^{-1/2}$, в σ_{11} входит дважды: один раз непосредственно при термодинамическом усреднении, а второй раз через вероятность рассеяния, если она вычислена в борновском приближении. Указанную расходимость можно устранить либо использованием некоторых механизмов обрезания энергии снизу [14], либо точным вычислением вероятности рассеяния [18]. Последовательная квантовая теория проводимости в случае рассеяния на короткодействующем потенциале (точечные дефекты) была развита Скобовым [18]. Использование точного выражения для вероятности перехода [18] автоматически устраняет вышеуказанную расходи-

мость и не нужно прибегать к искусственным методам обрезания. Скобов, исходя из общего выражения для диагональной компоненты тензора проводимости [19], вычислил проводимость электронного газа в квантовом пределе в случае, когда электроны упруго рассеиваются на хаотически расположенных центрах, радиус действия которых предполагается малым по сравнению с длиной волны электронов и по сравнению со средним расстоянием между рассеивателями [18]. Расчет магнетосопротивления в квантовом пределе для полупроводников с непараболической зоной произведен в работе [16].

4. Осцилляции Шубникова — де Гааза. Как было показано выше, в квантующем магнитном поле изменяется не только поведение плотности состояний, но и характер взаимодействия носителей тока с кристаллической решеткой. В квантовом пределе это приводит к различным зависимостям поперечного магнетосопротивления от магнитного поля и температуры (см. табл. 11). Кроме того, квантование обуславливает качественно новые кинетические свойства проводящих кристаллов.

Влияние квантования движения электронов проводимости в магнитном поле на проводимость металлов впервые наблюдалось Шубниковым и де Гаазом [12]. Ими была обнаружена осцилляционная зависимость магнетосопротивления висмута от напряженности магнитного поля при низких температурах, причем осцилляции были периодичными по величине $1/H$. Такое поведение сопротивления металлов в магнитном поле получило название эффекта или осцилляции Шубникова — де Гааза. Было показано, что их периоды хорошо согласуются со значениями, получаемыми из эффекта де Гааза — ван Альфена.

Теория осцилляций магнетосопротивления металлов впервые была рассмотрена в работе [13]. Эти осцилляции в вырожденных полупроводниках теоретически подробно исследовались в [4, 14, 20, 21]. Здесь рассмотрим осцилляции Шубникова — де Гааза в вырожденных полупроводниках, а также для основных моделей изотропной зоны, определим положение максимумов H_{\max} и период осцилляции $\Delta\left(\frac{1}{H}\right)$ сопротивления.

В сильных магнитных полях из (22.26) и (22.7) для сопротивления имеем

$$\rho(H) = (H/ecn)^2 \sigma_{11}(H). \quad (22.28)$$

Отсюда видно, что осцилляции $\rho(H)$ определяются поведением функции $\sigma_{11}(H)$, т. е. положения максимумов и периоды осцилляций $\rho(H)$ и диагональной компоненты $\sigma_{11}(H)$ совпадают [20]. Поэтому достаточно исследовать поведение $\sigma_{11}(H)$. Для этого нужно исходить из общего выражения (22.8) и подставить в него вероятности перехода (22.12), (22.20) и (22.22). После этого перейдем от интегрирования по dk_z и dk'_z к интегрированию по $d\varepsilon$ и $d\varepsilon'$ и учтем, что $dk_z/d\varepsilon \sim 1/k_z$. В полученном выражении, если пренебрежем неупругостью при рассеянии на фононах, то

легко проинтегрируем по $d\varepsilon'$ с помощью закона сохранения $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$. Поскольку рассматриваем сильно вырожденные полупроводники, то $(-\partial f_0/\partial \varepsilon)$ можно заменить $\delta(\varepsilon - \xi)$ -функцией. В результате для всех механизмов рассеяния и для произвольно-го изотропного закона дисперсии $\sigma_{11}(H)$ примет вид

$$\sigma_{11}(H) = \sum_{NN'\sigma} \frac{G_{NN'\sigma}(\zeta, H)}{k_z(\zeta, N, \sigma, H) k'_z(\zeta, N', \sigma, H)}, \quad (22.29)$$

где величина $G_{NN'\sigma}(\zeta, H)$ различна для разных механизмов рассеяния и содержит всевозможные константы и плавную функцию от магнитного поля H и границы Ферми ζ . При получении (22.29) мы учли, что рассеяние носителей происходит без пере-ворачивания спина, т. е. $\sigma' = \sigma$.

Видно, что $\sigma_{11}(H)$ имеет особенность, т. е. становится макси-мумом при выполнении условий *)

$$k_z(\zeta, N, \sigma, H) = 0 \text{ или } k'_z(\zeta, N', \sigma, H) = 0 \quad (22.30)$$

Для того чтобы найти явный вид этих условий экстремума, мы должны исходить из определенного закона дисперсии. Рас-смотрим известные нам законы дисперсии. В случае простого параболического закона дисперсии без учета спина (21.11) усло-вие максимума (22.30) имеет простой вид

$$\zeta(H_N) = (N + 1/2) \hbar \Omega_N, \quad N \neq 0, \quad (22.31)$$

т. е. при значениях магнитного поля H_N , когда граница Ферми совпадает с одним из уровней Ландау, $\sigma_{11}(H)$, и, следовательно, $\rho(H)$ достигает максимума; причем в формуле (22.31) $\Omega_N = eH_N/mc$.

Из (22.31) легко получим $(1/H_N)^{\max}$ — соответствующие N -му максимуму сопротивления:

$$(1/H_N)^{\max} = (N + 1/2) (e\hbar/mc\zeta(H_N)), \quad N \neq 0. \quad (22.32)$$

Отсюда следует, что если уровень Ферми от магнитного поля не зависит $\zeta(H) = \zeta(0)$, то (22.29) является периодической функ-цией $1/H$, а положения максимумов и период осцилляции $\Delta(1/H) = (1/H_{N+1})^{\max} - (1/H_N)^{\max}$ равны

$$(1/H_N)^{\max} = (N + 1/2) \hbar e/mc\zeta(0), \quad \Delta(1/H) = e\hbar/cm\zeta(0), \quad (22.33)$$

Следовательно, эти величины определяются только concentra-цией носителей тока n , так как $\zeta(0) = (\hbar^2/2m) (3\pi^2 n)^{2/3}$.

*) Следует заметить, что фактически $\sigma_{11}(H)$ при выполнении условий (22.30) не обращается в бесконечность, так как всегда существует тот или иной механизм, ограничивающий высоту осцилляционного пика. Например, тепловое размытие уровней или конечность времени жизни электрона в данном квантовом состоянии, обусловленная рассеянием, смазывает особен-ность плотности состояний. Поэтому можно считать, что в зависимости $\sigma_{11}(H)$ имеются пики, но всегда выполняется неравенство (22.25), и следо-вательно, в сильном поле, согласно (22.28), максимум $\sigma_{11}(H)$ и сопротивле-ния $\rho(H)$ совпадают.

Отметим, что измеряя период осцилляций $\Delta(1/H)$, как видно из (22.33), можно определить произведение $m\zeta(0)$, следовательно, найти площадь экстремального сечения Ферми-поверхности $S_{\text{ext}} = \pi r_F^2 = 2\pi m\zeta(0)$. Тогда из (22.33) для S_{ext} получим

$$S_{\text{ext}} = 2\pi e\hbar [c\Delta(1/H)]^{-1}. \quad (22.34)$$

Эта формула, полученная в частном случае для сферы Ферми, оказывается справедливой для любого закона дисперсии, если под S_{ext} понимать площадь экстремального сечения поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной направлению магнитного поля [10]. В общем виде она называется формулой Лифшица — Онзагера.

Из (22.32) видно, что если уровень Ферми зависит от магнитного поля, то осцилляции сопротивления, вообще говоря, не строго периодичны. Для того чтобы учесть влияние зависимости $\zeta(H)$ на положения максимумов и на период осцилляций, (21.61) подставим в (22.32). Тогда для положения N -го максимума получим

$$(1/H_N)^{\text{max}} = e\hbar/cm\zeta(0) a_N, \quad (22.35)$$

где

$$a_N = \left(\frac{3}{2} \sum_{k=0}^N V\bar{k} \right)^{2/3}, \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (22.36)$$

Используя $\zeta(0) = (\hbar^2/2m)(3\pi^2n)^{2/3}$, условие (22.35) можно переписать в виде

$$(1/H_N)^{\text{max}} = (2e/\hbar c)(3\pi^2n)^{-2/3} a_N, \quad N \neq 0. \quad (22.37)$$

Из (22.36) для последовательных значений числа a_N получим: $a_1 = 1,30$; $a_2 = 2,34$; $a_3 = 3,35$; $a_4 = 4,37$; ... Видно, что разность между двумя последовательными числами почти одинакова и $a_{N+1} - a_N \approx 1$. Это показывает, что и при учете зависимости $\zeta(H)$ периодичность осцилляций не нарушается, а период (22.33) также почти не меняется. Однако учет зависимости уровня Ферми от магнитного поля $\zeta(H)$ положения максимумов смещает в сторону больших значений магнитного поля. Это видно, если сравнить численные значения a_N в (22.35) с $(N + 1/2)$, входящий в (22.33).

Положения максимумов осцилляций Шубникова — де Гааза определяются (22.37) в том случае, когда электронный газ полностью вырожден и тепловое размытие границы Ферми не учитывается. Если же тепловое размытие ζ больше, чем ширина уровней Ландау, обусловленная рассеянием электронов, то при определении положений максимумов $\rho(H)$ следует учесть это размытие [20]. Для этого следует точнее вычислить последний член в сумме (21.47) $N' = N$, когда находим связь уровня Ферми $\zeta = (2N' + 1)\mu H$ с концентрацией n . При полном вырождении

этот член равняется нулю. Когда полное вырождение отсутствует, последний интеграл в сумме (21.47) следует вычислить в пределах от $\varepsilon_1(N)$ до ∞ , не заменяя $(-\partial f_0/\partial \varepsilon)$ δ -функцией. Легко видеть, что этот интеграл равен $\sqrt{k_0 T} F_{1/2}(0)$, где $F_{1/2}(0) \simeq 0,5$ — однопараметрический интеграл Ферми.

В результате из (21.47) имеем

$$n = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^{3/2} H_N^{3/2} \left[\sum_{k=0}^N \sqrt{k} + \sqrt{\frac{k_0 T}{4 \hbar \Omega_N}} \right]. \quad (22.38)$$

Поскольку $k_0 T \ll \hbar \Omega_N$, то в поправочном члене в (22.38) вместо H_N достаточно подставить его значение (22.37) в нулевом приближении. Тогда для положения N -го максимума сопротивления получим

$$H_N = \frac{\hbar c}{2e} (3\pi^2 n)^{2/3} \frac{1}{a_N} \left[1 - \frac{1}{a_N} \left(\frac{k_0 T m}{2 \hbar^2} \right)^{1/2} (3\pi^2 n)^{-1/3} \right]. \quad (22.39)$$

Видно, что учет теплового размытия границы Ферми смещает положения максимумов $\rho(H)$ в сторону слабых магнитных полей.

Теперь определим влияние спина электрона на осцилляционную картину поперечного магнетосопротивления [4, 21]. В общем случае для непараболической зоны Кейна (21.31), условие максимума сопротивления (22.30) имеет вид

$$B(\zeta) = (N + 1/2) \hbar \Omega + \sigma g^*(\zeta) \mu_0 H, \quad (22.40)$$

где $B(\zeta)$ и $g^*(\zeta)$ даются (21.32) и (21.33), соответственно.

Подставляя (21.31) в (21.46) и учитывая (22.40), в случае полного вырождения получим уравнение

$$n = \frac{2(2m_n)^{1/2}}{\hbar (2\pi R)^2} \sum_{N'\sigma'} \sqrt{(N - N') \hbar \Omega + (\sigma - \sigma') g^* \mu_0 H}. \quad (22.41)$$

Это есть уравнение для определения значений магнитного поля, при которых выполняется условие максимума сопротивления (22.30) для заданной концентрации n в полупроводниках с непараболическим законом дисперсии.

Из (22.41) легко определить положения максимумов $\rho(H)$:

$$H_N^{\pm} = \frac{\hbar c}{e} (\sqrt{2} \pi^2 n)^{2/3} \left[\sum_k^N \left(\sqrt{k} + \sqrt{k \pm \frac{1}{2} \frac{m_n}{m_0} g^*(\zeta)} \right) \right]^{-2/3}. \quad (22.42)$$

Для параболической зоны $g^* = 2$ и в (22.42) для знака «плюс» k меняется от 0 до $N = 0, 1, 2, \dots$, а для знака «минус» k меняется от 1 до $N = 1, 2, 3, \dots$

В полупроводниках с непараболической зоной эффективная масса на дне зоны $m_n \ll m_0$ и, как видно из (21.33), g^* -фактор

отрицателен:

$$g^*(\zeta) = -\frac{m_0}{m_n} \frac{2\Delta_0}{(3\zeta + 3e_g + 2\Delta_0)}. \quad (22.43)$$

Поэтому в (22.42) для знака «плюс» k меняется от 1 до $N = 1, 2, 3, \dots$, а для знака «минус» k меняется от 0 до $N = 0, 1, 2, \dots$, следовательно, из-за отрицательности g^* -фактора в полупроводниках типа $n = \text{InSb } O^+$ максимум не может появляться, а первым максимумом на кривой магнитного сопротивления со стороны сильных полей должен быть O^- , положение которого определяется из (22.42) выражением [22]

$$H_0^- = \frac{\hbar c}{e} \left[\frac{4\pi^4 n^2}{|g^*(\zeta)|} \frac{m_0}{m_n} \right]^{1/3}. \quad (22.44)$$

Из (22.42) видно, что учет спина приводит к тому, что каждый пик в магнитном сопротивлении расщепляется на два пика с положениями H_N^\pm .

Осцилляции Шубникова — де Гааза, которые были наблюдаемы впервые на висмуте, можно объяснить следующим образом. Вследствие малой эффективной массы электронов в висмуте в достаточно сильных магнитных полях и при низкой температуре расстояние между соседними уровнями Ландау $\hbar\Omega$ становится больше теплового размытия границы Ферми k_0T . С другой стороны, в проводимости участвуют электроны, находящиеся на границе Ферми. Поэтому при увеличении напряженности магнитного поля дискретные уровни Ландау, смещаясь кверху, пересекают уровень Ферми и получается резкое повышение продольного тока j_x и, следовательно, увеличение $\sigma_{11}(H)$, каждый раз, когда совпадает какой-нибудь уровень Ландау с границей Ферми, так как именно на уровнях Ландау плотность состояний очень велика (см. рис. 27). Рост $\sigma_{11}(H)$ при некоторых значениях магнитного поля (22.35) или (22.42), согласно (22.28), обуславливает осцилляционный характер сопротивления в сильном магнитном поле.

Из приведенного качественного объяснения следует, что для наблюдения осцилляций Шубникова — де Гааза необходимы два условия: вырожденный электронный газ и квантующие магнитные поля, т. е.

$$\zeta(H) \gg k_0T, \quad \hbar\Omega \gg k_0T, \quad (22.45)$$

при этом $\zeta(H)$ должен быть одного порядка или больше $\hbar\Omega$, чтобы наблюдать хотя бы первые максимумы $\rho(H)$ со стороны больших полей.

Благодаря малой эффективной массе электронов проводимости условия (22.45) выполняются для многих полупроводников при сравнительно малых концентрациях носителей тока и легко достижимых магнитных полях. Это позволило наблюдать эффект Шубникова — де Гааза не только в металлах, но и в вырожден-

ных полупроводниках: на антимониде индия [23—26], арсениде индия [27—32] и селениде ртути [33—35]. Влияние спина на осцилляции Шубникова — де Гааза было наблюдеено и исследовано в работах [25, 26, 32, 34].

Следует отметить, что экспериментальное исследование осцилляций магнетосопротивления с учетом теоретических результатов дают ценные сведения об исследуемых полупроводниках. Как уже было отмечено выше, определяя период осцилляций и зная уровень Ферми из (22.33), можно определить эффективную массу m или же сечение Ферми-поверхности (22.34). Определяя экспериментально положение H_0^- и зная эффективную массу электрона на дне зоны проводимости m_n и концентрацию n , по формуле (22.44) можно найти $g^*(\xi)$ -фактор. Этим методом на основе эксперимента [36] на антимониде индия был определен $g^*(\xi)$ -фактор [22] для различных концентраций и показано, что $g^*(\xi)$ -фактор слабо уменьшается с ростом концентраций.

Формулу (22.44) можно использовать также для определения m_n , зная значения g^* -фактора, H_0^- и n . По данным нулевого максимума можно непосредственно определить величину спин-орбитального расщепления валентных зон. Действительно, подставляя (22.43) в (22.44) и пренебрегая слабой зависимостью g^* от ξ , получим

$$\Delta_0 = \frac{3}{2} \varepsilon_g \left[\frac{1}{4\pi^4 n^2} \left(\frac{eH_0^-}{\hbar c} \right)^3 - 1 \right]^{-1}, \quad (22.46)$$

следовательно, если определить положение первого максимума H_0^- , то для заданного образца (ε_g и n известны) можно найти Δ_0 .

5. Магнетофононные осцилляции. Теория поперечного магнетосопротивления, изложенная в начале настоящего параграфа, предполагает, что рассеяние электронов проводимости носит упругий характер. Если рассеяние упруго и электронный газ не вырожден, то проводимость в сильном магнитном поле никакими особенностями не обладает. Магнетосопротивление полупроводника имеет осцилляционную зависимость от магнитного поля только в том случае, когда электронный газ сильно вырожден (22.45). Эти осцилляции Шубникова — де Гааза имеют место в сильно легированных полупроводниках, при достаточно низких температурах и сильных магнитных полях. Их период (22.33), как мы видели выше, определяется концентрацией электронов проводимости.

Учет неупругости рассеяния электронов проводимости на оптических фононах приводит к качественно новым эффектам — к новым типам осцилляций магнетосопротивления [37—42]. Эти осцилляции — по условиям проявления коренным образом отличаются от осцилляций Шубникова — де Гааза. Впервые В. Гуревич и Фирсов [37] на основе общей теории [15] рассмотрели проводимость невырожденных полупроводников при неупругом рассеянии на поляризационных оптических фононах в сильном

магнитном поле, когда выполняется неравенство (22.25) и поперечное сопротивление дается формулой (22.28). Для компоненты $\sigma_{11}(H)$ в [37] при $(\hbar\Omega/k_0T)\delta \ll 1$ получено следующее выражение:

$$\sigma_{11}(H) = \sigma_{11}^0 \left[1 + \frac{3}{4} \left(\frac{\Omega}{\omega_0} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar\Omega}{k_0T} \right)^{1/2} \ln \left(\frac{2k_0T}{\hbar\Omega} \frac{1}{\delta} \right) \right], \quad (22.47)$$

где $\sigma_{11}^0 \sim \alpha N_q \sim \alpha \exp(-\hbar\omega_0/k_0T)$ — монотонная часть σ_{11} , Ω — циклотронная частота, ω_0 — предельная частота продольных оптических фононов, N_q — число фононов, α — безразмерная константа, характеризующая связь электронов с поляризационными оптическими фононами (11.79), а δ в (22.47) обозначает

$$\delta = |M - \omega_0/\Omega|, \quad (22.48)$$

где $M = 1, 2, 3, \dots$ — целые числа.

Из (22.47) видно, что при $\delta \rightarrow 0$ σ_{11} и, следовательно, $\rho(H)$ (22.28) логарифмически расходятся. Таким образом, всякий раз, когда частота оптического фонона ω_0 становится кратной циклотронной частоте Ω , $\sigma_{11}(H)$ [также $\rho(H)$] имеет максимум. Это явление получило название *магнетофононная осцилляция* или *эффект Гуревича — Фирсова*. Для полупроводников с изотропным квадратичным законом дисперсии условие магнетофононной осцилляции ($\delta \rightarrow 0$) имеет вид

$$\omega_0 = M\Omega, \quad M = 1, 2, 3, \dots \quad (22.49)$$

Эфросом [39] было показано, что $\sigma_{11}(H)$ имеет такую же логарифмическую расходимость типа (22.47) и в полупроводниках с вырожденным электронным газом при $\zeta \gg \hbar\omega_0 \gg \hbar\Omega$.

Таким образом, в случае неупругого рассеяния на оптических фононах независимо от степени вырождения электронов проводимости сопротивление $\rho(H)$ имеет максимум при выполнении условий (22.49), т. е. при обратных значениях магнитного поля

$$1/H = eM/(m_n c \omega_0), \quad M = 1, 2, 3, \dots \quad (22.50)$$

Видно, что $\rho(H)$ является осциллирующей функцией, причем эти осцилляции периодичны в зависимости ρ от $1/H$, а период их равен

$$\Delta(1/H) = e/m_n c \omega_0. \quad (22.51)$$

В работе [41] обсуждены качественная природа и практические условия наблюдения магнетофононных осцилляций в полупроводниках. Прежде чем перейти к этим вопросам, приведем общее выражение $\sigma_{11}(H)$ при неупругом рассеянии. Как показано в [43], формула для $\sigma_{11}(H)$ в случае неупругого рассеяния отличается от формулы Адамса и Гольдштейна (22.8) тем, что в ней производная функции распределения по энергии заменяется выражением $f_\alpha(1 - f_\alpha)$ и неупругость рассеяния учитывается в законе сохранения энергии. Кроме того, в [4] доказано, что формула (22.8) справедлива и в случае нестандартной зоны. Поэтому в случае неупругого рассеяния и произвольной изотропной зоны

для $\sigma_{11}(H)$ можно написать выражение

$$\sigma_{11}(H) = (e^2/2) \sum_{\alpha\alpha'} f_{\alpha}(1 - f_{\alpha'}) (x_{\alpha'} - x_{\alpha})^2 W_{\alpha\alpha'}. \quad (22.52)$$

Подставляя в (22.52) выражение для вероятности перехода электрона (22.12) из состояния (N, k_y, k_z, σ) в состояние (N', k'_y, k'_z, σ) с поглощением оптического фотона с энергией $\hbar\omega_0$, переходя от интегралов по dk_z и dk'_z к интегралам по энергиям, учитывая, что $dk_z/d\varepsilon \sim 1/k_z$, а затем производя интегрирование по $d\varepsilon'$ с учетом закона сохранения $\varepsilon' = \varepsilon + \hbar\omega_0$, получим

$$\sigma_{11}(H) = \sum_{NN'\sigma} \int \frac{A_{NN'\sigma}(\varepsilon, H) f(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon + \hbar\omega_0)]}{k_z(\varepsilon, N, \sigma, H) k'_z(\varepsilon + \hbar\omega_0, N', \sigma, H)} d\varepsilon, \quad (22.53)$$

где $A_{NN'\sigma}(\varepsilon, H)$ — гладкая функция от ε , содержащая константу взаимодействия электрона с оптическими колебаниями решетки. Аналогичное выражение имеем для случая испускания фотона $\varepsilon' = \varepsilon - \hbar\omega_0$. Здесь предполагается, что при рассеянии электрона его спин не переворачивается.

Интегрирование по $d\varepsilon$ в (22.53) ведется от ε_1 — корня уравнения $k_z(\varepsilon_1, N, \sigma, H) = 0$. Если при $\varepsilon = \varepsilon_1$ в конечном состоянии $k'_z \neq 0$, то интеграл в (22.53) не обладает никакой особенностью. А если при $\varepsilon = \varepsilon_1$ импульс электрона $p_z = \hbar k_z$ в начальном и конечном состояниях равен нулю, то интеграл (22.53) логарифмически расходится, так как при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_1$ k_z стремится к нулю как $\sim \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_1}$. Поэтому при удовлетворении следующей системы уравнений

$$\begin{aligned} k_z(\varepsilon_1, N, \sigma, H) &= 0, \\ k'_z(\varepsilon_1 + \hbar\omega_0, N', \sigma, H) &= 0, \end{aligned} \quad (22.54)$$

$\sigma_{11}(H)$, и согласно (22.49), $\rho(H)$ становится максимумом.

Для простоты параболической зоны (21.20) из (22.54) сразу получим условие $\omega_0 = (N' - N)\Omega = M\Omega$, совпадающее с (22.49).

Таким образом, (22.54) есть в общем виде условие существования магнетофонных осцилляций. Физически магнетофонные осцилляции обусловлены своеобразным поведением плотности состояний в магнитном поле (рис. 27). При выполнении условий (22.54) плотность около начального $k_z = 0$ и конечного $k'_z = 0$ состояний становится очень большой и происходит своеобразное резонансное рассеяние электронов проводимости на оптических фотонах, что приводит к большому значению $\sigma_{11}(H)$ и, следовательно, $\rho(H)$.

Отметим характерные особенности магнетофонных осцилляций и основные различия между этими осцилляциями и осцилляциями Шубникова — де Гааза.

Из (22.53) и (22.54) видно, что магнетофонные осцилляции могут иметь место при любой степени вырождения электронов проводимости, т. е. как при статистике Больцмана [37], так и при

статистике Ферми [39], а осцилляции Шубникова — де Гааза возможны только при сильном вырождении. Последние возникают при упругом рассеянии электронов, тогда как магнетофононные осцилляции связаны с неупругостью рассеяния. Оба типа осцилляций сопротивления $\rho(H)$ в зависимости от $1/H$ периодичны. Однако период осцилляций Шубникова — де Гааза (22.33) определяется концентрацией электронов проводимости, а период магнетофононных осцилляций (22.51) не зависит от концентрации и определяется частотой продольных оптических фононов ω_0 .

Магнетофононные осцилляции имеют место и в квантовом пределе, когда удовлетворяются неравенства: для статистики Больцмана $k_0T \ll \hbar\Omega \leq \hbar\omega_0$ и для статистики Ферми $(\zeta - \hbar\Omega/2) < \hbar\Omega \leq \hbar\omega_0$, тогда как, согласно условию (22.31), осцилляции Шубникова — де Гааза в квантовом пределе ($N = 0$) невозможны.

При $k_0T < \hbar\omega_0$ амплитуда магнетофононных осцилляций [см. (22.47)] пропорциональна $\exp(-\hbar\omega_p/k_0T)$, т. е. экспоненциально растет с температурой. Вследствие этого эти осцилляции должны, как правило, наблюдаться при относительно высоких температурах, когда определенное количество оптических фононов возбуждено. Однако температура ограничена сверху условиями $\Omega\tau \gg 1$ и $k_0T \ll \hbar\Omega$. Поэтому для наблюдения магнетофононных осцилляций необходима оптимальная температура, тогда как осцилляции Шубникова — де Гааза проявляются только при низких температурах.

Первое краткое сообщение о наблюдении магнетофононных осцилляций в n -InSb было в работе [44]. Однако подробные исследования магнетофононных осцилляций в n -InSb впервые были приведены в работах [45—47]. В этих работах были подтверждены основные предсказания теории Гуревича — Фирсова [37]. В частности, было показано, что период этих осцилляций $\Delta(1/H) = (3,0 \pm 0,2) 10^{-5} \text{ Э}^{-1}$ от концентрации не зависит и эффект лучше проявляется при оптимальной температуре $T \approx 104 \text{ К}$, согласно выводу работы [37].

Экспериментальное изучение магнетофононных осцилляций позволяет исследовать взаимодействие электронов с оптическими фононами в различных полупроводниках, так как амплитуда осцилляций пропорциональна константе взаимодействия α [см. (22.47) и (22.53)]. Кроме того, по периоду этих осцилляций на основе формулы (22.51) можно определить либо частоту продольного оптического фонона ω_0 (если известно m_n), либо эффективную массу m_n (если известна ω_0). Частота продольного оптического фонона ω_0 для некоторых полупроводников типа $A^{III}B^V$ имеет следующие значения: для InSb $\omega_0 = 3,7 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, для InAs и GaSb $\omega_0 = 4,5 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, для GaAs $\omega_0 = 5,6 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$. Например, в работе [45] по положению первого максимума на кривой поперечного сопротивления $H_1 = 34 \text{ кЭ}$, согласно (22.50), для эффективной массы электрона проводимости в InSb найдено значение $m_n = 0,016m_0$, которое хорошо согласуется с данными других методов.

Условие магнетофононного резонанса имеет простой вид (22.49) только в полупроводниках с параболической зоной. Теперь определим явный вид условия магнетофононных осцилляций в кейновских полупроводниках. Для этого закон дисперсии Кейна (21.31) подставим в условие (22.54). Тогда вместо (22.54) имеем

$$\begin{aligned} B(\varepsilon_1) - (N + 1/2) \hbar\Omega - \sigma g^*(\varepsilon) \mu_0 H &= 0, \\ B(\varepsilon_1 + \hbar\omega_0) - (N' + 1/2) \hbar\Omega - \sigma g^*(\varepsilon) \mu_0 H &= 0. \end{aligned} \quad (22.55)$$

Исключая из этих уравнений ε_1 , получим условия магнетофононного резонанса. Аналитически это можно сделать в двухзонном приближении, т. е. когда $\varepsilon \ll \varepsilon_0 + (2/3)\Delta_0$. В этом приближении (21.32) имеет простой вид $B(\varepsilon) = \varepsilon(1 + (\varepsilon/\varepsilon_g))$ и из системы уравнений (22.55) получим [4] условие, которому должна удовлетворять циклотронная частота $\Omega = eH/m_n c$, чтобы при переходах $(N, \sigma) \rightarrow (N', \sigma)$ поперечное сопротивление имело максимум

$$\begin{aligned} \Omega = \frac{\omega_0}{(N' - N)} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\varepsilon_g} \right) &\left[\frac{N + N' + 1 + \sigma^*}{(N' - N)} + \right. \\ &+ \left. \sqrt{\frac{(2N + 1 + \sigma^*)(2N' + 1 + \sigma^*)}{(N' - N)^2} + \left(\frac{\varepsilon_g}{\hbar\omega_0} \right)^2} \right], \end{aligned} \quad (22.56)$$

где

$$\sigma^* = -\sigma[2\Delta_0/(3\varepsilon_g + 2\Delta_0)]. \quad (22.57)$$

При $\varepsilon_g \gg \hbar\omega_0$ из (22.56) легко получаем известное условие (22.49) для параболической зоны. Для InSb, если использовать значения $\omega_0 = 3,7 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ и $\varepsilon_g \approx 0,2 \text{ эВ}$ (см. табл. 2), то $\varepsilon_g/\hbar\omega_0 \approx 10$. Поэтому в (22.56) под корнем первым членом можно пренебречь и тогда условие магнетофононных осцилляций имеет простой вид [ср. (22.49)]

$$\Omega = \frac{\omega_0}{(N' - N)} \left[1 + \frac{(N' + N + 1 + \sigma^*)}{(N' - N)} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\varepsilon_g} \right) \right]. \quad (22.58)$$

Здесь второй член есть поправка, связанная с учетом непараболичности зоны проводимости.

Первый максимум $\rho(H)$ соответствует переходу $0 \rightarrow 1$, при этом нулевой уровень Ландау должен находиться внутри интервала $k_0 T$, а первый уровень намного выше. Следовательно, вклад от перехода $1 \rightarrow 2$ к первому максимуму со стороны сильных полей экспоненциально мал. При уменьшении магнитного поля первый уровень Ландау также входит в интервал $k_0 T$ и становятся возможными переходы $0 \rightarrow 2$ и $1 \rightarrow 3$, соответствующие второму максимуму. Очевидно, в таких полях переходы $0 \rightarrow 1$ и $1 \rightarrow 2$ невозможны, так как ω_0 задана. Аналогично можно рассмотреть и структуру других механизмов. Из-за неэквидистантности уровней Ландау в полупроводниках с непараболической зоной все максимумы, кроме первого, должны иметь естествен-

ную ширину, так как в этом случае для второго максимума переходам $0 \rightarrow 2$, $1 \rightarrow 3$, для третьего максимума переходам $0 \rightarrow 3$, $1 \rightarrow 4$, $2 \rightarrow 5$ и т. д. будут соответствовать различные близкие значения магнитных полей.

Таким образом, в отличие от параболической зоны, для которой каждому целому числу $M = (N' - N)$ соответствует только один максимум (одно значение H , независимо от N и N'); для нестандартной зоны имеется серия максимумов, близко расположенных к максимумам, соответствующим переходам $0 \rightarrow N'$. Отметим, что в случае непараболической зоны магнетофонные осцилляции в зависимости от $1/H$ не строго периодичны, как это имеет место для простой зоны с периодом (22.51). Поэтому для определения параметров полупроводника (ω_0 или m_n) из магнетофонных осцилляций лучше использовать не период осцилляций, а положение первого максимума со стороны сильных магнитных полей, так как этому максимуму соответствует единственный переход $0 \rightarrow 1$ и его положение однозначно. Для первого максимума ($N=0$, $N'=1$) условие (22.58) принимает вид*)

$$1/m_n = (c\omega_0/eH_1) [1 + (2 + \sigma^*) (\hbar\omega_0/\varepsilon_g)], \quad (22.59)$$

где H_1 — положение первого максимума.

Сравнение (22.59) с формулой (22.50) при $M=1$ показывает, что учет непараболическости зоны примерно на 20% поправляет значение эффективной массы, найденное из эксперимента по магнетофонным осцилляциям. Если удастся фиксировать спиновое расщепление первого максимума, то в формуле (22.59) надо использовать H_1^\pm и соответственно $\sigma = \pm 1/2$ в (22.57).

До сих пор мы говорили о неупругом рассеянии электронов на оптических фононах, при котором направление спина не меняется. Взаимодействие электронов с оптическими фононами, приводящее к переходам с переворачиванием спина, было рассмотрено в работе Павлова и Фирсова [48]. На основе этой работы авторы [49] построили теорию поперечного и продольного магнитного сопротивления в невырожденных полупроводниках с учетом переворачивания спина электрона при рассеянии.

Условие максимума поперечного сопротивления $\rho(H)$ в условиях переворачивания также имеет вид (22.56), только во втором уравнении в этой системе спиновое число σ надо заменить на σ' . Для простоты рассмотрим параболическую зону $B(\varepsilon) = \varepsilon$. С учетом выше сказанного система (22.55) дает следующее условие максимума магнетофонных осцилляций:

$$\hbar\omega_0 = (N' - N) \hbar\Omega + (\sigma' - \sigma) g^* \mu_0 H. \quad (22.60)$$

Если при рассеянии спин не переворачивается $\sigma' = \sigma$, то из (22.60) следует известный результат (22.49).

*) Если отношение $\varepsilon_g/\hbar\omega_0$ порядка единицы, то следует использовать формулу (22.56).

Когда имеет место переворачивание спина ($\sigma' \neq \sigma$), условие (22.60) можно представить в виде

$$\hbar\omega_0 = M\hbar\Omega \pm |g^*| \mu_0 H, \quad (22.61)$$

где для знака $+$ $M = 0, 1, 2, \dots$, а для знака $-$ $M = 1, 2, 3, \dots$

Осцилляции, связанные с переходами электронов между спиновыми подуровнями либо одной и той же ($M = N' - N = 0$), либо различных ($M = N' - N \neq 0$) систем уровней Ландау с переворотом спина благодаря поглощению оптического фотона с энергией $\hbar\omega_0$, носят название *спин-магнетофононных осцилляций*.

Естественно, осцилляционная картина с учетом переворачивания спина довольно усложняется. Однако, если найти положение первого максимума спин-магнетофононных осцилляций H_1 , соответствующего переходу между спиновыми подуровнями нулевого уровня Ландау ($N' = N = 0$), непосредственно можно найти g^* -фактор; из (22.61) при $M = 0$ имеем

$$|g^*| = \hbar\omega_0 / \mu_0 H_1. \quad (22.62)$$

Такой метод определения g^* -фактора точнее метода, основанного на использовании спинового расщепления осцилляций Шубникова — де Гааза [50].

Спин-магнетофононные осцилляции были наблюдаемы в работах [51, 52]. Теория спин-магнетофононных осцилляций продольного магнетосопротивления в вырожденных полупроводниках построена в работе [53]. В этой же работе эти осцилляции были наблюдаемы и исследованы на образцах HgTe и GaSb . Магнетофононные осцилляции могут иметь место и в многодолинных полупроводниках [54—57].

§ 23. Термомагнитные явления в поперечном квантуемом магнитном поле

Основная задача теории термомагнитных явлений сводится к нахождению явного вида термомагнитных тензоров β_{ik} и κ_{ik} , связывающих компоненты плотности тока и потока энергии с градиентом температуры [см. (7.1)]. В том случае, когда магнитное поле направлено вдоль градиента температуры, эти тензоры диагональны и их можно найти на основе решения кинетического уравнения, если даже магнитное поле квантуемое.

Более интересной является ситуация, когда квантуемое магнитное поле, удовлетворяющее условию (22.1), перпендикулярно градиенту температуры — поперечное квантуемое магнитное поле. В этом случае в построении теории термомагнитных явлений возникает принципиальная трудность. Дело в том, что в поперечном квантуемом магнитном поле кинетическое уравнение неприменимо (см. § 8), а использовать метод матрицы плотности Адамса — Гольдштейна [14], для вычисления термомагнитных тензоров β_{ik} и κ_{ik} нельзя. Это связано с тем, что термомагнитный ток обусловлен действием на систему носителей заряда стати-

стической силы, пропорциональной градиенту температуры, и эту статистическую силу (см. § 9) невозможно включить в гамильтониан, следовательно, нельзя найти часть матрицы плотности, связанную с градиентом температуры. Поэтому такой прямой путь вычисления термомагнитного тока отпадает.

В принципе существует еще один способ нахождения тензора β_{ik} . Можно вычислить плотность потока энергии в электрическом и магнитном полях на основе метода Адамса — Гольдштейна [14], определить явный вид тензора γ_{ik} [см. (7.1)], а затем, применяя соотношение Онсагера (7.4), найти тензор β_{ki} . Такие попытки [58] не дали результата, так как полученное выражение для потока энергии не удовлетворяло теореме Нернста — поток энергии при абсолютном нуле оставался конечным. По-видимому, это связано с тем, что в квантующем магнитном поле однозначное выражение для оператора потока энергии записать трудно.

Таким образом, необходимо было искать обходные пути в квантовой теории термомагнитных явлений. В этом параграфе остановимся на двух таких методах.

1. Вычисление термомагнитных токов. Первая попытка непосредственно вычислить термомагнитный ток в квантующем поперечном магнитном поле была сделана в работе [58]. В этой работе предполагалось, что при слабых пространственных неоднородностях, когда T и ζ остаются почти постоянными на протяжении магнитной длины R , $x_0 \equiv x_\alpha = -R^2 k_y$, около которого локализован электрон в квантовом состоянии $\alpha \equiv (N, k_y, k_z)$, можно отождествлять с координатой x , т. е. считалось, что T и химический потенциал ζ , входящие в распределение Ферми, являются функциями $T(x_\alpha)$ и $\zeta(x_\alpha)$: $f((\epsilon_\alpha - \zeta(x_\alpha))/k_0 T(x_\alpha))$. Эту функцию можно представить в виде разложения около точки x :

$$f\left(\frac{\epsilon_\alpha - \zeta(x_\alpha)}{k_0 T(x_\alpha)}\right) = f_\alpha - \frac{\partial f_\alpha}{\partial \epsilon_\alpha} \left(\frac{\epsilon_\alpha - \zeta}{T} \nabla_x T + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right) (x_\alpha - x) + \dots, \quad (2.31)$$

где $T = T(x)$, $\zeta = \zeta(x)$, $f_\alpha = f((\epsilon_\alpha - \zeta)/k_0 T)$.

Подставляя это выражение в (22.6) и приняв рассеяние упругим ($\epsilon_{\alpha'} = \epsilon_\alpha$), для плотности тока вдоль градиента температуры, получим

$$j_x = -\beta_{11} \nabla_x T = \\ = - (e/2T) \sum_{\alpha\alpha'} W_{\alpha\alpha'} (\partial f_\alpha / \partial \epsilon_\alpha) (\epsilon_\alpha - \zeta) (x_{\alpha'} - x_\alpha)^2 \nabla_x T, \quad (2.32)$$

что сразу дает выражение для диагональной компоненты β_{11} .

Множитель 2 в знаменателе обусловлен тем, что суммы по α и α' вычисляются как по положительным, так и по отрицательным значениям x_α и $x_{\alpha'}$.

Выражение для тока j_x (23.2), представляющее собой обобщение формулы Титейки [11] на случай, когда в образце имеется градиент температуры, было получено из некоторых наглядных соображений на основе принципа локального термодинами-

ческого равновесия. В работе [59] авторы пытались более строго обосновать формулу (23.2).

Для определения плотности поперечного (перпендикулярного градиенту температуры и магнитному полю) недиссипативного тока можно использовать его квантовомеханическое выражение

$$\mathbf{j} = - (e\hbar/2m) i (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) - (e^2/mc) \mathbf{A} \psi \psi^*, \quad (23.3)$$

которое, согласно (21.2) и (21.5), для поперечной компоненты дает

$$j_y^{(\alpha)} = - e\Omega (x - x_\alpha) \varphi_N^2 (x - x_\alpha). \quad (23.4)$$

Для того чтобы получить среднее значение плотности недиссипативного поперечного тока, необходимо производить статистическое усреднение (23.4) с функцией распределения (23.2). В результате получим [58]

$$j_y = - e\Omega R^2 \sum_{Nk_z} (N + 1/2) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} \left(\frac{\varepsilon_\alpha - \xi}{T} \nabla_x T^* + \frac{\partial \xi}{\partial x} \right). \quad (23.5)$$

Здесь произведено интегрирование по x_α в пределах от $-\infty$ до $+\infty$, причем результат оказался не зависящим от x ; $R = (\hbar c/eH)^{1/2}$ — магнитная длина.

Однако следует отметить, что выражение для плотности тока (23.5) не удовлетворяет известному соотношению Эйнштейна. Действительно, как видно из (22.23) и (23.5), коэффициенты при E_x и $((-1/e)(\partial \xi / \partial x))$ не совпадают.

Правильное выражение для поперечного недиссипативного термомагнитного тока было получено Образцовым [60]. Было показано, что необходимо учесть вклад в ток, вносимый электронами, движущимися по незамкнутым орбитам, вблизи границы образца. В результате было получено следующее правильное выражение для плотности поперечного тока j_y , связанное с градиентом температуры [60]:

$$j_y = -\beta_{12} \nabla_x T = (cS/H) \nabla_x T, \quad (23.6)$$

где S — энтропия электронного газа (21.42).

Формула (23.6), связывающая кинетический коэффициент β_{12} с термодинамической функцией S полупроводника, была выведена Образцовым [60] для квадратичного закона дисперсии. Впоследствии было показано, что формула (23.6) справедлива и для полупроводников с непараболической зоной [61], а также и для многоэллипсоидальных полупроводников [62].

Квантовой теории поперечных термомагнитных явлений в полупроводниках, кроме упомянутых выше, посвящено довольно много работ [63—70].

Отметим, что для вычисления недиссипативных термомагнитных коэффициентов в поперечном квантующем магнитном поле можно предположить другой подход [71, 72].

2. Недиагональные компоненты термомагнитного тензора в поперечном квантующем магнитном поле. Построение квантовой теории термомагнитных явлений — вычисление плотностей тока и потока энергии, связанных с градиентом температуры, в квантующем поперечном, перпендикулярном градиенту температуры магнитном поле, как было указано выше, встречает принципиальные трудности. В этом случае кинетическое уравнение неприменимо и неизвестно, исходя из первых принципов, как ввести в теорию градиент температуры, который создает возмущающую статистическую силу в системе носителей заряда. Поэтому для вычисления плотности термомагнитного тока используются некоторые наглядные соображения и разложение равновесной функции распределения (23.1) для электронов проводимости, считая, что температура, входящая в эту функцию, зависит от координат [58]. Кроме того, чтобы выполнялось соотношение Эйнштейна при вычислении поперечного недиссипативного тока, перпендикулярного градиенту температуры и квантующему магнитному полю, учитывается поверхностный ток [60] или используются граничные условия для вектора диамагнитной намагниченности электронов проводимости [70].

Для определения явного вида недиссипативных компонент термомагнитного тензора в поперечном квантующем магнитном поле, можно предложить другой подход [71, 72]. Показано, что основываясь на результатах кинетического уравнения в классически сильном магнитном поле и, используя статистический принцип соответствия, сформулированный ниже, непосредственно можно найти недиссипативные компоненты термомагнитного тензора в поперечном квантующем магнитном поле. При таком подходе отпадает вопрос о законности разложения (23.1) равновесной функции распределения [58] и привлечении границ [60, 63] для получения правильных выражений недиссипативных термомагнитных явлений в квантовой области, которые в сущности описывают объемные свойства проводника. Закон дисперсии носителей тока предполагается изотропным.

Конечная цель теории явлений переноса заключается в нахождении компонент тензоров проводимости σ_{ik} , β_{ik} и κ_{ik} , которые связывают возмущающие силы (электрическое поле и градиент температуры) с плотностью тока (13.10) и потока энергии (13.11). Обычно эта задача решается на основе кинетического уравнения. В произвольном поперечном неквантующем магнитном поле для электронного проводника с произвольным изотропным законом дисперсии компоненты этих тензоров при квазиупругих механизмах рассеяния (τ -приближение) даются формулами (13.23) — (13.25), которые можно представить в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &= ne^2 \langle \varphi_{ik} \rangle_{кп}, & \beta_{ik} &= -(ne/T) \langle (\varepsilon - \xi) \varphi_{ik} \rangle_{кп}, \\ \kappa_{ik} &= (n/T) \langle (\varepsilon - \xi)^2 \varphi_{ik} \rangle_{кп}, \end{aligned} \quad (23.7)$$

где

$$\varphi_{ik} = (\tau/m) v^{k-1} / (1 + v^2), \quad i \leq k, \quad k = 1, 2, \quad (23.8)$$

а знак усреднение $\langle \dots \rangle_{\text{кл}}$ означает

$$\langle A(\varepsilon) \rangle_{\text{кл}} = (1/3\pi^2 n) \int_0^{\infty} (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) k^3(\varepsilon) A(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (23.9)$$

где n — концентрация электронов проводимости.

Из (23.7) видно, что магнитное поле в тензоры проводимости входит только через безразмерный параметр $\nu = \Omega\tau$, где $\Omega = eH/mc$ — циклотронная частота, τ — время релаксации. Однако в магнитном поле существует еще один безразмерный параметр

$$\nu_{\text{кв}} = \hbar\Omega/\bar{\varepsilon}, \quad (23.10)$$

где $\bar{\varepsilon}$ — характерная энергия электронов проводимости: если электронный газ невырожден $\bar{\varepsilon} = k_0 T$, а если сильно вырожден — $\bar{\varepsilon}$ есть граничная энергия Ферми ξ .

Выражения тензоров проводимости (23.7) справедливы в области магнитных полей $\nu_{\text{кв}} \ll 1$, но ν произвольно. В частности, они остаются в силе, когда $\nu \gg 1$, но $\nu_{\text{кв}} \ll 1$. В этом случае из (23.7) в первом исчезающем приближении по параметру $\nu^{-1} \ll 1$ имеем

$$\sigma_{11} = \frac{nc^2}{H^2} \left\langle \frac{m}{\tau} \right\rangle_{\text{кл}}, \quad \sigma_{12} = \frac{ecn}{H} \langle 1 \rangle, \quad (23.11)$$

$$\beta_{11} = -\frac{n}{T} \frac{c^2}{eH^2} \left\langle (\varepsilon - \xi) \frac{m}{\tau} \right\rangle_{\text{кл}}, \quad \beta_{12} = -\frac{n}{T} \frac{c}{H} \langle \varepsilon - \xi \rangle_{\text{кл}}, \quad (23.12)$$

$$\chi_{11} = \frac{n}{T} \left(\frac{c}{eH} \right)^2 \left\langle (\varepsilon - \xi)^2 \frac{m}{\tau} \right\rangle_{\text{кл}}, \quad \chi_{12} = \frac{n}{T} \left(\frac{c}{eH} \right) \langle (\varepsilon - \xi)^2 \rangle_{\text{кл}}. \quad (23.13)$$

Если на основе первых принципов квантовой теории можно было бы найти выражения этих тензоров в квантовой области, т. е. для произвольного значения параметра $\nu_{\text{кв}}$, то при $\nu_{\text{кв}} \ll 1$ они должны были бы перейти в (23.11) — (23.13). Но это можно сделать только в электрическом поле и найти явный вид σ_{11} и σ_{12} в произвольном квантующем магнитном поле на основе решения для матрицы плотности [14] (см. § 22).

Однако заметим, что для определения явного вида недиагональных компонент тензоров, как видно из (23.12) и (23.13), достаточно найти соответствующую формулу усреднения по энергиям в квантовой области, которая при $\nu_{\text{кв}} \rightarrow 0$ переходит в (23.9).

Формулу усреднения по энергиям, соответствующую (23.9), в квантующем магнитном поле можно найти из сопоставления непосредственно, согласно (21.42), вычисленных выражений для энтропии электронного газа единицы объема в квазиклассическом и квантовом случаях:

$$S(0) = (n/T) \langle \varepsilon - \xi \rangle_{\text{кл}}, \quad S(H) = (n/T) \langle \varepsilon - \xi \rangle_{\text{кв}}, \quad (23.14)$$

соответственно, причем символ усреднения $\langle \dots \rangle_{\text{кв}}$ обозначает

$$\langle A(\epsilon) \rangle_{\text{кв}} = \frac{1}{\pi n L_1 L_2} \sum_{N \sigma k_y} \int_{\epsilon_0}^{\infty} \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) k_z(\epsilon, N, \sigma, H) A(\epsilon) d\epsilon, \quad (23.15)$$

где $\epsilon_0 = \epsilon_0(N, \sigma, H)$ есть корень уравнения $k_z(\epsilon_0, N, H) = 0$, L_i — соответствующие линейные размеры образца.

При получении (23.15) из (21.40) и (21.42) было предположено, что магнитное поле \mathbf{H} направлено вдоль оси z , и состояния электронов определяются квантовыми числами (k_0, k_z, N, σ) , где $N = 0, 1, 2, \dots$ — осцилляторное, а $\sigma = \pm 1/2$ — спиновое квантовые числа. Кроме того учтено, что для сферически-симметричной зоны ϵ является четной функцией k_z . Это приводит к появлению множителя 2 во всех случаях, когда интегрирование по dk_z заменяется интегрированием по $d\epsilon$.

Отметим, что формулы усреднения (23.9) и (23.15) нормированы на концентрацию n и поэтому среднее значение постоянной величины равно самой себе.

В пределе $v_{\text{кв}} \rightarrow 0$ спиновым расщеплением можно пренебречь и сумму по N заменить интегрированием. Тогда формула усреднения (23.15) для заданного закона дисперсии сразу переходит в (23.9), следовательно, второе выражение в (23.14) совпадает с первым. Очевидно, такой подход имеет место и тогда, когда усредняется не только энергия ϵ , а любая явная функция от ϵ .

Таким образом, можно сформулировать следующий *статистический принцип соответствия*: если некоторая термодинамическая или кинетическая величина в квазиклассическом случае выражается через явную функцию от энергии, усредненную по формуле (23.9), то в квантовой области магнитного поля данной величины соответствует такая же функция, только усредненная по формуле (23.15), т. е. достаточна замена

$$\langle A(\epsilon) \rangle_{\text{кл}} \Rightarrow \langle A(\epsilon) \rangle_{\text{кв}}, \quad (23.16)$$

здесь $A(\epsilon)$ — некоторая явная функция от энергии ϵ .

Чтобы выяснить смысл соответствия (23.16) заметим, что формулы усреднения (23.9) и (23.15) могут быть объединены в виде

$$\langle A(\epsilon) \rangle = n^{-1} \int (-\partial f_0 / \partial \epsilon) Z(\epsilon) A(\epsilon) d\epsilon, \quad (23.17)$$

где

$$Z(\epsilon) = \int_0^{\epsilon} g(\epsilon') d\epsilon' \quad (23.18)$$

— полное число квантовых состояний единицы объема с энергиями $\epsilon' \leq \epsilon$, одинаковое как в квазиклассическом, так и в квантовом случаях; $g(\epsilon)$ — функция плотности состояний единицы

объема, причем в квазиклассическом случае

$$g(\varepsilon) \equiv g_0(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2} k^2(\varepsilon) \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{1}{3\pi^2} \frac{dk^3(\varepsilon)}{d\varepsilon}, \quad (23.19)$$

а в квантующем магнитном поле

$$g(\varepsilon) \equiv g_H(\varepsilon) = \frac{1}{\pi L_1 L_2} \sum_{N\sigma k_y} \frac{dk_z(\varepsilon, N, \sigma, H)}{d\varepsilon}. \quad (23.20)$$

Отсюда следует, что существует единая формула усреднения (23.17), справедливая как в квазиклассическом, так и в квантовом случаях. Только для перехода от квазиклассической области к квантовой следует $g_0(\varepsilon)$ заменить на $g_H(\varepsilon)$ при вычислении полного числа квантовых состояний $Z(\varepsilon)$, т. е. принцип соответствия в виде (23.16) или в виде

$$g_0(\varepsilon) \Rightarrow g_H(\varepsilon) \quad (23.21)$$

эквивалентны.

Естественно, выражения типа $\langle A(\varepsilon) \rangle_{\text{кв}}$ содержат безразмерный параметр $\nu_{\text{кв}}$ и при $\nu_{\text{кв}} \ll 1$ они должны переходить в соответствующие формулы квазиклассического случая. Заметим, что квазиклассика для термодинамических и кинетических величин имеет различный смысл. Действительно, для равновесных (термодинамических) свойств в магнитном поле есть всего один параметр $\nu_{\text{кв}}$, а параметр ν не возникает, так как понятие времени релаксации в этом случае отсутствует. Поэтому все квантовые выражения для термодинамических величин при $\nu_{\text{кв}} \ll 1$ должны совпадать с результатами, соответствующими $H=0$. Однако для неравновесных (кинетических) свойств возникает параметр ν и квантовые результаты при $\nu_{\text{кв}} \ll 1$ должны перейти в квазиклассические, соответствующие $\nu \gg 1$, т. е. к результатам (23.11) — (23.13).

Согласно (23.16) из (23.11) следует, что $\sigma_{12} = ecn/H$ имеет один и тот же вид как в квазиклассической, так и в квантовой областях магнитного поля для любой сферической зоны, так как $\langle 1 \rangle_{\text{кв}} = \langle 1 \rangle_{\text{кв}} = 1$. Этот вывод непосредственно получен и в квантовой теории гальваномагнитных явлений [4, 14].

Применяя принцип соответствия (23.16) к недиагональным компонентам термомагнитных тензоров в (23.12) и (23.13) для β_{12} и χ_{12} , сразу имеем

$$\beta_{12} = -\frac{k_0}{e} \sigma_{12} \left\langle \frac{\varepsilon - \xi}{k_0 T} \right\rangle_{\text{кв}}, \quad \chi_{12} = T \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 \sigma_{12} \left\langle \left(\frac{\varepsilon - \xi}{k_0 T} \right)^2 \right\rangle_{\text{кв}}. \quad (23.22)$$

Используя (23.15), получим следующие явные выражения для этих компонент:

$$\beta_{12} = -\frac{e}{2\pi^2 \hbar T} \sum_{N\sigma} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \xi) k_z(\varepsilon, N, \sigma, H) d\varepsilon, \quad (23.23)$$

$$\kappa_{12} = \frac{1}{2\pi^2 \hbar T} \sum_{N\sigma} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \zeta)^2 k_z(\varepsilon, N, \sigma, H) d\varepsilon. \quad (23.24)$$

При получении этих формул из (23.22) и (23.15) было учтено, что подинтегральное выражение от k_y не зависит и поэтому можно использовать (21.39).

Из (23.6) и (23.14) следует, что формула (23.23) совпадает с формулой β_{12} , полученной Образцовым.

Приведенные выше результаты дают возможность исследовать термомагнитные эффекты в квантующем магнитном поле.

3. Эффект Нернста — Эттингсгаузена в квантовом пределе.

В сильном магнитном поле ($\nu \gg 1$) имеет место неравенство (22.25) и поэтому коэффициент Нернста — Эттингсгаузена (13.16) принимает вид

$$Q = H^{-1} \sigma_{12}^{-2} (\sigma_{12} \beta_{11} - \sigma_{11} \beta_{12}). \quad (23.25)$$

Для различных механизмов рассеяния, изложенных в § 22, этот коэффициент в квантующем магнитном поле вычислен в работах [72—76]. Влияние непараболичности зоны на эффект Нернста — Эттингсгаузена исследовано в [77] при рассеянии на акустических фононах, где показано, что непараболичность зоны в полупроводниках типа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ существенно влияет на величину эффекта и его зависимость от магнитного поля.

Здесь мы отметим только два результата работ [72—76], полученных для полупроводников с параболической зоной.

1) Получены зависимости Q от напряженности магнитного поля и температуры в квантовом пределе для различных механизмов рассеяния, указанных в § 22. Эти зависимости для параболической зоны приведены в табл. 12. Квантовый предел — такое состояние электронного газа, когда все электроны находятся на нулевом уровне Ландау с $N=0$. Условия осуществления этого состояния обсуждены в § 21. Из табл. 12 видно, что зависимость $Q(H, T)$ определяется как природой рассеяния, так и степенью вырождения электронного газа. Исследуя эти зависимости на эксперименте и сравнивая их с результатами табл. 12, можно судить о преобладающем механизме рассеяния.

2) В квантовом пределе Q имеет одинаковый — положительный знак для всех механизмов рассеяния, тогда как в классической области магнитных полей, когда квантование энергии электрона незначительно, знак Q зависит от механизма рассеяния. Например, в случае параболической зоны Q имеет отрицательный знак, если рассеяние происходит на акустических фононах [см. (15.49), (15.53), (15.54)], и имеет положительный знак, если доминирующим механизмом является рассеяние на ионах примеси.

Отметим, что положительность знака Q для всех механизмов рассеяния связана с поведением плотности состояний $g_H(\varepsilon)$

в квантовом пределе $g_H(\epsilon) \sim (\epsilon - \hbar\Omega/2)^{-1/2}$. Действительно, в квантовой области плотность состояний $g_H(\epsilon)$ в тензоры σ_{11} и β_{11} входит два раза: один раз непосредственно при усреднении, а второй — через вероятность рассеяния. Поэтому в квантовом

Т а б л и ц а 12

Зависимость коэффициента Нернста — Эттингсгаузена от магнитного поля и температуры в квантовом пределе для разных механизмов рассеяния

Механизмы рассеяния	Q(H, T)		
	Невырожденные полупроводники	Сильно вырожденные полупроводники	
Акустические фононы	Низкие температуры $N_q = 0$	$\sim H^{1/2} T^{-3/2}$	$\sim H^{11/2}$
	Высокие температуры $N_q \approx \approx k_0 T / \hbar \omega_q$	$\sim H^0 T^{-1/2}$	$\sim H^5 T^2$
Пьезоакустические фононы	Низкие температуры $N_q = 0$	$\sim H^{-1/2} T^{-3/2}$	$\sim H^{9/2} T$
	Высокие температуры $N_q \approx \approx k_0 T / \hbar \omega_q$	$\sim H^{-1} T^{-1/2}$	$\sim H^4 T^2$
Полярные оптические фононы; высокие температуры $N_q \approx k_0 T / \hbar \omega_0$		$\sim H^{-1} T^{-1/2}$	$\sim H^4 T^2$
Точечные дефекты		$\sim H^0 T^{-3/2}$	$\sim H^5 T$
Ионы примесей		$\sim H^2 T^{-3/2}$	$\sim H^3 T$

пределе для вырожденного электронного газа в первом неисчезающем приближении по вырождению

$$\beta_{11} \sim \int g_H(\epsilon) (\epsilon - \zeta_F) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon \sim \left[-g_H(\epsilon) \frac{\partial g_H(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon=\zeta_F}. \quad (23.26)$$

Поскольку в квантовом пределе $g_H(\epsilon)$ уменьшается с ростом энергии ($\partial g_H / \partial \epsilon < 0$), то $\beta_{11} > 0$, что и обеспечивает положительность знака Q, так как в формуле (23.25) $(-\sigma_{11} \beta_{12}) > 0$.

В случае невырожденных полупроводников из-за того, что в квантовом пределе $g_H(\epsilon) \sim (\epsilon - \hbar\Omega/2)^{-1/2}$ диагональная компонента тензора электропроводности

$$\sigma_{11} \sim \int_{\hbar\Omega/2}^{\infty} g_H^2(\epsilon) \exp(-\epsilon/k_0 T) d\epsilon \quad (23.27)$$

имеет расходимость, которая устраняется различными способами [14]. Поэтому знак Q определяется знаком второго слагаемого в (23.25), который получается положительным, после того как члены, содержащие химический потенциал ζ в формуле (23.25), взаимно сокращаются.

Таким образом, если имеет место рассеяние на акустических фононах, с увеличением магнитного поля, т. е. при переходе от

классической к квантовой области (квантовому пределу) знак Q должен меняться от отрицательного к положительному.

Такое изменение знака Q непосредственно было показано в работе [75], где для невырожденных полупроводников в случае рассеяния на акустических фононах получено следующее выражение для Q во всей области сильных магнитных полей, т. е. при произвольном значении параметра $v_0 = v_{KB}/2 = \hbar eH/2m_n c k_0 T$:

$$Q = A(T) \varphi(v_0), \quad (23.28)$$

где $A(T)$ — положительная величина, содержащая различные константы, в том числе, константы деформационного потенциала, и зависящая от температуры, а функция $\varphi(v_0)$ имеет вид

$$\varphi(v_0) = (1 + \operatorname{cth} v_0/4) [3/4 (3 \operatorname{cth} v_0 - 1) - v_0 (3 \operatorname{cth} v_0 + 1) (\operatorname{cth} v_0 - 1)]. \quad (23.29)$$

В квазиклассическом приближении ($v_0 \ll 1$)

$$\varphi(v_0) \approx - (3/16 v_0^2) (1 - 2/3 v_0) < 0. \quad (23.30)$$

В квантовом пределе ($v_0 \gg 1$)

$$\varphi(v_0) \approx 3/4 > 0. \quad (23.31)$$

Как видно, при переходе от классической области магнитных полей ($v_0 \ll 1$) к квантовому пределу ($v_0 \gg 1$), согласно (23.30) и (23.31), Q меняет знак от отрицательного к положительному. Значение магнитного поля H_0 , при котором происходит изменение знака Q , определяется из уравнения $\varphi(v_0) = 0$, т. е.

$$\frac{3}{4} (3 \operatorname{cth} v_0 - 1) - v_0 (3 \operatorname{cth} v_0 + 1) (\operatorname{cth} v_0 - 1) = 0. \quad (23.32)$$

Легко проверить, что корень этого уравнения находится в интервале

$$0,5 < v_0 < 1; \quad 0,5 < (\hbar e H_0 / 2 m_n c k_0 T) < 1. \quad (23.33)$$

Это положение теории можно экспериментально проверить, если исследовать зависимость Q от H в области $v_0 \sim 1$ для чистых и однородных образцов полупроводника, в которых основную роль играет рассеяние на акустических фононах.

4. Термо-э. д. с. в поперечном квантующем магнитном поле.
В общем случае термо-э. д. с. α в поперечном магнитном поле через компоненты тензоров σ_{ik} и β_{ik} выражается по формуле (13.17). В сильных магнитных полях ($v \gg 1$), как видно из (23.11) и (23.12), недиагональные компоненты (σ_{12} и β_{12}) отличны от нуля в нулевом приближении по рассеянию, в то время как диагональные компоненты (σ_{11} и β_{11}) отличны от нуля только в первом приближении по рассеянию. Следовательно, в сильном магнитном поле ($v = (eH/mc)\tau \gg 1$) имеют место неравенства

$$\sigma_{12} \gg \sigma_{11}, \quad \beta_{12} \gg \beta_{11}. \quad (23.34)$$

Тогда для термо-э. д. с. $\alpha(H)$ в нулевом приближении по рассеянию из (13.17), в силу (23.41), получим

$$\alpha(H) = \beta_{12}/\sigma_{12}. \quad (23.35)$$

Используя (22.7) и (23.6), имеем

$$\alpha(H) = -S/en. \quad (23.36)$$

Эта формула, связывающая энтропию электронного газа S с термо-э. д. с., для параболической зоны впервые была получена Образцовым [60], а в общем случае закона дисперсии Кейна она выведена в работе [78].

Если для β_{12} использовать (23.23) и учитывать (23.24), то из (23.35) получим, что термо-э. д. с. $\alpha(H)$ в поперечном квантующем магнитном поле в полупроводниках с произвольной изотропной зоной определяется выражением

$$\alpha(H) = -\frac{k_0}{e} (2\pi^2 R^2 n k_0 T)^{-1} \sum_{N\sigma} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \zeta) k_z(\varepsilon, N, \sigma) d\varepsilon, \quad (23.37)$$

где $R = (\hbar c/eH)^{1/2}$ — магнитная длина, а все обозначения такие же как и в (23.23).

Видно, что в сильном поперечном магнитном поле термо-э. д. с. определяется только законом дисперсии, т. е. функцией $k_z(\varepsilon, N, \sigma)$. Для закона дисперсии Кейна (21.31) термо-э. д. с. была рассмотрена в работе [79]. Будем исходить из закона дисперсии (23.31):

$$k_z(\varepsilon, N, \sigma) = \left(\sqrt{2m_n/\hbar} \right) \sqrt{B(\varepsilon) - \varepsilon_{N,\sigma}}, \quad (23.38)$$

где $\varepsilon_{N,\sigma} = (N + 1/2) \hbar \Omega + \sigma g^* \mu_0 H$, а в двухзонном приближении Кейна и при $m_n \ll m_0$

$$B(\varepsilon) = \varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right), \quad g^* = -\frac{m_0}{m_n} \frac{2\Delta_0}{3\varepsilon_g + 2\Delta_0}. \quad (23.39)$$

Нижний предел ε_0 в интеграле (23.37) есть корень уравнения $k_z(\varepsilon, N, \sigma) = 0$, т. е.

$$\varepsilon_0 (1 + \varepsilon_0/\varepsilon_g) - (N + 1/2) \hbar \Omega - \sigma g^* \mu_0 H = 0. \quad (23.40)$$

Формула (23.37) позволяет рассмотреть случаи слабой и сильной непараболичности для сильно вырожденного и невырожденного электронного газа.

Невырожденные полупроводники. Здесь рассмотрим только случаи слабой непараболичности ($\varepsilon/\varepsilon_g = k_0 T/\varepsilon_g \ll 1$), так как при сильной непараболичности ($k_0 T/\varepsilon_g > 1$) возникла бы необходимость учета второй, дырочной зоны.

В случае слабой непараболичности функцию (23.38) можно разложить и ограничиться первым приближением по параметру непараболичности $\varepsilon/\varepsilon_g$. Тогда для невырожденных полупроводни-

ков можно выполнить интегрирование по ϵ и суммирование по N и σ . В результате получим выражение для всей области сильных магнитных полей

$$\alpha(H) = \alpha^{\text{п}}(H) - (k_0/e)(k_0T/\epsilon_g) \left[\frac{3}{2} + v_0 \text{cth } v_0 - v_1 \text{th } v_1 + \right. \\ \left. + (v_0^2/\text{sh}^2 v_0)(1 + 4v_0 \text{cth } v_0 - 2v_1 \text{th } v_1) + \right. \\ \left. + (v_1^2/\text{ch}^2 v_1)(1 + 2v_0 \text{cth } v_0) \right], \quad (23.41)$$

где

$$v_0 = \hbar\Omega/2k_0T, \quad v_1 = 1/2 |g^*| (m_n/m_0) v_0, \quad (23.42)$$

$$\alpha^{\text{п}}(H) = -\frac{k_0}{e} \left(\frac{3}{2} + v_0 \text{cth } v_0 - v_1 \text{th } v_1 - \ln \left[\frac{4n\pi^{3/2}\hbar^3}{(2m_n k_0 T)^{3/2}} \frac{\text{sh } v_0}{v_0 \text{ch } v_1} \right] \right) \quad (23.43)$$

— термо-э. д. с. для параболической зоны ($\epsilon_g \rightarrow \infty$).

При получении (23.41) была использована формула (21.46) со спектром (23.38) для получения связи химического потенциала с концентрацией.

Для некваंटующих магнитных полей ($v_0 \ll 1$) из (23.43) следует известный результат кинетического уравнения (15.74).

В квазиклассическом приближении ($v_0 \ll 1$) и в квантовом пределе ($v_0 \gg 1$) из (23.41) получаются соответствующие результаты работы [80], в которой рассмотрен случай слабой непараболичности, когда энергию электрона проводимости можно представить в виде разложения по квадрату импульса.

Если возьмем разность (23.50) и (15.74), то получим изменение термо-э. д. с. для параболической зоны за счет квантования в магнитном поле:

$$\delta\alpha = \alpha^{\text{п}}(H) - \alpha_{\text{кл}} = \\ = -\frac{k_0}{e} \left[v_0 \text{cth } v_0 - v_1 \text{th } v_1 - 1 - \ln \left(\frac{\text{sh } v_0}{v_0} \frac{1}{\text{ch } v_1} \right) \right], \quad (23.44)$$

где $\alpha_{\text{кл}}$ — термо-э. д. с. в области классически сильных магнитных полей, которая дается формулой (15.74).

Без учета спинового расщепления уровней Ландау ($v_1 \rightarrow 0$) (23.44) принимает простой вид

$$\delta\alpha = -\frac{k_0}{e} \left[v_0 \text{cth } v_0 - 1 - \ln \left(\frac{\text{sh } v_0}{v_0} \right) \right]. \quad (23.45)$$

Эксперименты [81, 82] по исследованию термо-э. д. с. в кваंटующих магнитных полях, проведенные на невырожденных образцах n -InSb, показали хорошее согласие именно с формулой (23.45), а не с (23.41). Следует отметить, однако, что учет спинового расщепления и непараболичности зоны [см. формулу (23.41)] по еще не вполне выясненной причине ухудшает совпадение теории с экспериментальными результатами [80, 82].

Вырожденные полупроводники. В этом случае, согласно (4.25), в первом приближении по вырождению из (23.37) получим

$$\alpha(H) = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_0}{e} \frac{k_0 T}{n} \frac{2}{(2\pi R)^2} \sum_{N\sigma} \frac{dk_z(\zeta_F, N, \sigma)}{d\zeta_F} = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_0}{e} \frac{k_0 T}{n} g_H(\zeta_F), \quad (23.46)$$

где $g_H(\zeta_F)$ — плотность состояний (21.37) на границе Ферми ζ_F .

Видно, что при заданной концентрации n термо-э. д. с. $\alpha(H)$ вырожденных полупроводников в магнитном поле осциллирует, повторяя поведение плотности состояний на границе Ферми при изменении магнитного поля. Эти осцилляции были наблюдаемы в работах [83, 84].

Осцилляции термо-э. д. с. для полупроводников с параболической зоной теоретически были исследованы Образцовым [85]. Мы здесь, следуя [79], рассмотрим более общий случай — закон дисперсии (23.38). Учитывая (23.38) из (23.46) для термо-э. д. с., получим

$$\alpha(H) = -\frac{k_0}{e} \frac{k_0 T}{12R^2 \hbar n} \frac{(2m_n)^{1/2}}{\left(\frac{\partial B}{\partial \zeta_F}\right)} \sum_{N\sigma} [B(\zeta_F) - \varepsilon_{N,\sigma}]^{-1/2}. \quad (23.47)$$

Граница Ферми ζ_F , входящая в это выражение, определяется уравнением (21.46), которое в вырожденном случае для закона дисперсии (23.38) принимает вид

$$n = \frac{2(2m_n)^{1/2}}{(2\pi R)^2 \hbar} \sum_{N\sigma} [B(\zeta_F) - \varepsilon_{N,\sigma}]^{1/2}. \quad (23.48)$$

Из (23.47) видно, что термо-э. д. с. имеет особенность при $\zeta_F = \varepsilon_0(N, \sigma)$, т. е. она является максимумом, когда $B(\zeta_F) - \varepsilon_{N,\sigma} = 0$. Учитывая это, из (23.48) легко найти значения магнитного поля, при которых термо-э. д. с. достигает максимального значения для заданной концентрации n :

$$H_{N,\sigma}^{\max} = \frac{\hbar c}{e} (V\sqrt{2} \pi^2 n)^{2/3} \left[\sum_k^N \left(V\bar{k} + \sqrt{k + \sigma g^* \frac{m_n}{m_0}} \right) \right]^{-2/3}, \quad (23.49)$$

где суммирование по k ведется от 0 до N для $\sigma = -1/2$, от 1 до N для $\sigma = +1/2$, так как g^* -фактор в (23.39) отрицателен. Отсюда видно, что $H_{0,+1/2}$ -максимум невозможен и первый максимум на кривой термо-э. д. с. $\alpha(H)$ со стороны сильных магнитных полей есть $H_{0,-1/2}$ -максимум.

Отметим, что положения максимумов термо-э. д. с. (23.49) совпадают с положениями максимумов поперечного магнетосопротивления (22.65). Кроме того, следует подчеркнуть, что при получении условий максимумов (23.49), а также (22.65), не был использован явный вид функции $B(\zeta_F)$, поэтому (23.49) применимо для любой изотропной зоны, как параболической, так и не-

параболической. Непараболичность зоны в $H_{N,\sigma}^{\max}$ входит только через g^* -фактор. Действительно, если отбросить член, связанный со спиновым расщеплением, то из (23.49) следует условие (22.60), полученное для параболической зоны.

Более подробно рассмотрим область сверхсильных магнитных полей, когда в суммах (23.47) и (23.48) можно ограничиться одним членом $N=0$, $\sigma=1/2$ (квантовый предел). Только в этом случае можно найти явный вид функции $\alpha(H)$ и $\zeta_F(H)$. Тогда, используя $B(\varepsilon)$ из (23.39), можно решить уравнение (23.48) относительно границы Ферми

$$\zeta_F = -\frac{\varepsilon_g}{2} \left[1 - \sqrt{1 + \left(2 - |g^*| \frac{m_n \hbar^2 R^{-2}}{m_0 m_n \varepsilon_g} + \frac{(2\pi R)^4 n^2 \hbar^2}{2m_n \varepsilon_g} \right)} \right]. \quad (23.50)$$

Термо-э. д. с. (23.47) в квантовом пределе ($N=0$, $\sigma=1/2$), с учетом (23.50) имеет следующий вид

$$\alpha(H) = \alpha^n(H) \left[1 + \left(2 - |g^*| \frac{m_n}{m_0} \right) \frac{\hbar^2 R^{-2}}{m_n \varepsilon_g} + \frac{(2\pi R)^4 \hbar^2 n^2}{2m_n \varepsilon_g} \right]^{1/2}, \quad (23.51)$$

где

$$\alpha^n(H) = -\frac{k_0}{e} \frac{k_0 T m_n}{12\pi^2 \hbar^2 R^4 n^2} \quad (23.52)$$

— термо-э. д. с. параболической зоны в квантовом пределе.

Пределы применимости формулы (23.51) для термо-э. д. с. определяются двумя условиями: во-первых, для осуществления квантового предела магнитное поле H и концентрация n должны удовлетворять неравенству $\zeta_F < \varepsilon_0(0, -1/2)$, а в явном виде, согласно (23.40) и (23.50), это условие есть

$$(2\pi^2 R^3 n)^{1/2} < |g^*| \frac{m_n}{m_0} \quad \text{или} \quad H > \frac{\hbar c}{e} \left(\frac{4\pi^4 n^2 m_0}{|g^*| m_n} \right)^{1/3}, \quad (23.53)$$

во-вторых, должно выполняться условие сильного вырождения $[\zeta_F - \varepsilon_0(0, +1/2)] \gg k_0 T$, т. е.

$$\left\{ \left[1 + \left(2 - |g^*| \frac{m_n}{m_0} \right) \frac{\hbar^2 R^{-2}}{m_n \varepsilon_g} + \frac{(2\pi R)^4 \hbar^2 n^2}{2m_n \varepsilon_g} \right]^{1/2} - \left[1 + \left(2 - |g^*| \frac{m_n}{m_0} \right) \frac{\hbar^2 R^{-2}}{m_n \varepsilon_g} \right]^{1/2} \right\} \gg \frac{2k_0 T}{\varepsilon_g}. \quad (23.54)$$

Корень в (23.51) появился из-за нестандартности. Видно, что за счет нестандартности термо-э. д. с. заметно увеличивается. Например, для $n\text{-InSb}$ с концентрацией $n = 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ в магнитном поле $H = 10^5 \text{ Э}$ термо-э. д. с. примерно на 50% больше, чем для параболической зоны. В случае $\varepsilon_g \rightarrow 0$ (сильная непарабо-

личность — СМП) учет непараболичности меняет даже зависимость α от магнитного поля. Из (23.51) при $\epsilon_g \rightarrow 0$ имеем

$$\alpha^{\text{СМП}}(H) = -\frac{k_0}{e} \frac{k_0 T}{12\pi^2 \hbar R^3 n^2} \left(\frac{m_n}{\epsilon_g}\right)^{1/2} [1 + 2(2\pi^2 n R^3)^2]^{1/2}. \quad (23.55)$$

Отсюда видно, что $\alpha^{\text{СМП}}(H) \sim H^{3/2}$, тогда как для параболической зоны, согласно (23.52) $\alpha^n(H) \sim H^2$, так как $R \sim H^{-1/2}$. Отношение термо-э. д. с. в этих двух случаях, согласно (23.55) и (23.52), дается выражением

$$\frac{\alpha^{\text{СМП}}(H)}{\alpha^n(H)} = \frac{\hbar}{m_n R} \left(\frac{m_n}{\epsilon_g}\right)^{1/2} [1 + 2(2\pi^2 n R^3)^2]^{1/2}. \quad (23.56)$$

Из (23.62) следует, что измеряя $\alpha(H)$ в полупроводниках с сильно непараболической зоной типа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ непосредственно можно определить отношение ϵ_g/m_n . Зная это, согласно (3.21) и (3.17), найдем константу (3.11), учитывающую взаимодействие между зоной проводимости и валентной зонами.

Отметим, однако, что формулы (23.55) и (23.56) верны при одновременном выполнении условий квантового предела (23.53) и сильного вырождения электронного газа (23.54). В случае сильной непараболичности ($\epsilon_g \rightarrow 0$) эти условия имеют следующий простой вид, соответственно,

$$(2\pi^2 R^3 n)^2 < 1 \quad \text{и} \quad (2\pi^2 R^3 n)^2 \gg (2R/\hbar) (m_n/\epsilon_g)^{1/2} k_0 T. \quad (23.57)$$

При заданной концентрации и температуре эти неравенства определяют область магнитного поля H , в которой применима формула (23.62):

$$\frac{\hbar c}{e} (2\pi^2 n)^{2/3} < H \ll \frac{\hbar c}{e} \left(\frac{2\pi^4 n^2 \hbar c}{k_0 T}\right)^{2/5}. \quad (23.58)$$

Экспериментальному исследованию термо-э. д. с. в квантующем магнитном поле посвящен ряд работ. В [86] наряду с другими эффектами измерено относительное изменение термо-э. д. с. вырожденного образца $n\text{-InSb}$ с концентрацией $n = 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при температуре $T \approx 4 \text{ К}$. Условие квантового предела (23.60) для этого образца выполняется при магнитных полях $H > 15 \text{ кЭ}$.

В табл. 13 приведены экспериментальные данные [86] для указанного выше образца и теоретически вычисленные значения $(\Delta\alpha/\alpha_0)$ для параболической, а также для непараболической зон. При этом $(\Delta\alpha/\alpha_0)_n$ и $(\Delta\alpha/\alpha_0)_{\text{нп}}$ вычислены на основе формул (23.52) и (23.51), соответственно, и использованы следующие параметры $n\text{-InSb}$: $\epsilon_g = 0,23 \text{ эВ}$, $|g^*| = 50$, $m_n = 0,013m_0$. Термо-э. д. с. при отсутствии магнитного поля вычислена согласно формулам (14.36) и (14.33) при рассеянии на акустических фононах ($r=0$). Как видно из табл. 13, учет непараболичности зоны в $n\text{-InSb}$ заметно улучшает количественное совпадение теории с экспериментом в квантовом пределе.

Работа [149] посвящена экспериментальному исследованию термо-э. д. с. n - $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ в поперечном квантующем магнитном поле для состава $x = 0,16$. Для такого состава зоне проводимости $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ соответствует сильно непараболическая модель. В квантовом пределе для этой модели термо-э. д. с. дается формулой (23.55), полученной в [79]. В работе [87] эксперимент проводился при $T = 4,6$ К на образце n - $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с концентрацией

Т а б л и ц а 13

Сравнение теоретических значений относительного изменения термо-э. д. с. для n - InSb в квантовом пределе с экспериментальными результатами работы [86]

H , кЭ	$\left(\frac{\Delta\alpha}{\alpha_0}\right)_{\text{эксп}}$	$\left(\frac{\Delta\alpha}{\alpha_0}\right)_{\text{п}}$	$\left(\frac{\Delta\alpha}{\alpha_0}\right)_{\text{нп}}$
16,4	0,44	0,21	0,38
17,5	0,69	0,39	0,58
19,3	1,20	0,67	0,91
20,8	1,60	0,94	1,21

$n = 4,1 \cdot 10^{14}$ см $^{-3}$, для которого формула (23.55), согласно (23.58), применима в области магнитных полей $3 < H$ (кЭ) $\ll 82$. Термо-э. д. с. [87] измерялась в области магнитных полей $25 < H$ (кЭ) < 60 и было показано, что $\alpha(H) \sim H^{2,6}$. Этот результат полностью соответствует теоретической зависимости $\alpha(H) \sim H^{2,5}$, которая следует из (23.55).

Таким образом, теория термо-э. д. с., развитая в [79], получила экспериментальное подтверждение: термо-э. д. с. в квантовом пределе сильно растет с ростом магнитного поля, тогда как в области классически сильных магнитных полей она не зависит от магнитного поля — насыщается; непараболичность не только увеличивает величину термо-э. д. с. по сравнению с параболической зоной, но и может менять ее зависимость от магнитного поля $\alpha^{\text{нп}}(H) \sim H^{2,5}$, тогда как для параболической зоны $\alpha^{\text{п}}(H) \sim H^2$.

Глава 7

ЭЛЕКТРОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНКАХ. РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ

Существуют различные параметры с размерностью длины. Здесь отметим четыре из них: длина свободного пробега носителей $l = v\tau$, радиус циклотронной орбиты $r = v/\Omega$, размер образца d и длина волны де Бройля носителей $\lambda = h/\sqrt{2m\bar{\epsilon}}$, где $\bar{\epsilon}$ — характерная энергия электрона проводимости. Трудно построить универсальную теорию явлений переноса, которая была бы применима при любых соотношениях между указанными параметрами.

Если длина волны де Бройля намного меньше каждого из трех параметров, т. е. $\lambda \ll r, l, d$, то теория носит классический характер и основным уравнением является кинетическое уравнение. При этом, если $d \gg l$, то взаимодействие носителей с границами образца можно пренебречь и все кинетические свойства проводника определяются рассеянием в объеме. Такая ситуация рассмотрена в третьей и четвертой главах книги. Отметим, что в этом случае отношение $l/r = \Omega\tau$ может быть любое. Обобщению теории на случай, когда не только l/r любое, но и l/d — любое, посвящены первые два параграфа данной главы.

Когда нарушаются неравенства, приведенные в начале предыдущего абзаца, теория должна быть квантовой. Например, в случае $\lambda \gtrsim r$ магнитное поле является квантующим, что было рассмотрено в шестой главе. В случае $\lambda \gtrsim l$ обычная зонная теория проводимости неприменима и поэтому была создана квантовая теория малой подвижности, что в данной книге не рассматривается. Когда $\lambda \gtrsim d$, имеет место размерное квантование движения носителей заряда. Краткому изложению этого случая посвящен заключительный параграф книги.

§ 24. Решение кинетического уравнения в пленках с учетом граничных условий

Широкое применение тонких пленок в современной технике, а также наблюдение новых физических явлений, связанных с ограниченными размерами образца, привели к их интенсивному

исследованию [1—6]. Эти новые явления, которые не имеют места в массивных образцах могут служить источником дополнительных сведений об основных физических свойствах кристаллов: о структуре энергетических зон, о механизмах объемного и поверхностного рассеяния носителей тока и т. д.

Понятие «тонкая пленка» означает, что ее толщина сравнима с величинами размерности длины, характерными для данного явления. Эффекты, возникающие в пленках, можно разбить на две группы: квантовые и классические размерные эффекты. Квантовые размерные эффекты, как было отмечено выше, имеют место, когда толщина пленки становится порядка длины волны де Бройля носителей заряда [7, 8].

Классические размерные эффекты возникают, когда хотя бы один из параметров движения носителей заряда, имеющих размерность длины, становится порядка толщины пленки или характерной длины изменения потенциала вблизи поверхности (дебаевской длины). К таковым можно отнести длину свободного пробега по импульсу, длину остывания, длину биполярной диффузии, длину по междолинному рассеянию и т. д. В зависимости от того, какой из этих параметров становится соизмеримым с толщиной пленки наблюдается тот или иной размерный эффект.

Здесь мы рассмотрим размерные эффекты только на длине свободного пробега по импульсу, т. е. учтем влияние поверхностного рассеяния на явления переноса в полупроводниковых пленках.

Предполагается, что длина волны де Бройля

$$\lambda \ll r, l, d, \quad (24.1)$$

но при этом отношения l/r и l/d могут принимать любые значения. В силу (24.1) кинетическое уравнение применимо.

1. Кинетическое уравнение и граничные условия. Размерные эффекты, связанные с длиной свободного пробега, теоретически изучаются в течение многих лет. Первая последовательная теория проводимости в пленках была предложена Фуксом [9] на основе модели свободного электронного газа с параболическим изотропным законом дисперсии при отсутствии магнитного поля. Поверхностное рассеяние учитывалось с помощью граничных условий, налагаемых на функцию распределения носителей.

Зондгеймер [10] распространил теорию Фукса на гальваномагнитные эффекты в поперечном магнитном поле и впервые предсказал осцилляции сопротивления в неквадрупольном магнитном поле. Работы Фукса и Зондгеймера были обобщены на случай рассеяния от двух поверхностей с разной зеркальностью в [11, 12].

Теория Фукса [9] развивалась также в направлении, учитывающем конкретную структуру энергетических зон [13—18]. В отличие от металлов размерный эффект в полупроводниках необходимо анализировать с учетом приповерхностного пространственного заряда, т. е. изгиба зон. Его впервые учел Шриффер

[19] в предположении сферичности изоэнергетической поверхности, постоянства времени релаксации и полностью диффузного характера поверхностного рассеяния для полубесконечной пластины. Далее, эта теория развивалась в [20—23] с учетом зависимости $\tau(\epsilon)$ и частично зеркальности поверхности пленки. Теория гальваномагнитных явлений в пленках развивалась также в работах [24—29], а термоэлектрические и термомагнитные явления рассмотрены в [30—50].

В предположении (24.1), в основе теории явлений переноса лежит кинетическое уравнение. В стационарном случае $df/dt = 0$ оно приведено в (8.11), которое можно записать в виде

$$v \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} \left(\mathbf{E}_0 + \frac{1}{c} [\mathbf{vH}] \right) \nabla_{\mathbf{k}} f = I(f), \quad (24.2)$$

где $I(f)$ — интеграл столкновений.

Когда размеры образца намного больше длины свободного пробега, то число носителей тока, взаимодействующих с поверхностью, намного меньше общего числа носителей, поэтому $I(f)$ определяется рассеянием на различных дефектах в объеме или на фононах. Если же размеры кристалла порядка длины свободного пробега носителей заряда, то взаимодействие носителей с поверхностью становится существенным и это, вообще говоря, нужно учитывать в интеграле столкновения. Предполагая независимость рассеяния носителей в объеме и на поверхности, правую часть уравнения (24.2) можно представить в виде

$$I(f) = I_0(f) + I_s(f), \quad (24.3)$$

где $I_0(f)$ и $I_s(f)$ — есть интегралы столкновения, определяемые объемным и поверхностным рассеянием, соответственно. Известно, что при выполнении определенных условий (см. § 9) можно ввести транспортное время релаксации для объемного рассеяния $\tau(\epsilon)$, т. е. $I_0(f)$ можно представить в виде

$$I_0(f) = -f_1/\tau(\epsilon), \quad (24.4)$$

где $f_1 = f - f_0$ — неравновесная часть функции распределения.

Что касается $I_s(f)$, то его, вообще говоря, также надо записать через вероятность рассеяния на различных поверхностных дефектах, как в (8.10), и выразить через время релаксации поверхностного рассеяния, подобно (9.6). Однако такой подход приводит к сложному интегродифференциальному уравнению. Более того, не всегда можно описать поверхностное рассеяние замкнутым выражением вероятности перехода, и точное рассмотрение поверхностного рассеяния представляет собой более трудную задачу, чем точное рассмотрение объемного рассеяния.

Поэтому в правой части уравнения (24.2) оставляют только интеграл объемного столкновения $I(f) = I_0(f)$, а поверхностное рассеяние учитывают с помощью граничных условий, налагаемых на функцию распределения.

Впервые граничные условия к кинетическому уравнению были записаны Фуксом [9] с помощью введения параметра зеркальности p , имеющего следующий смысл: параметр зеркальности показывает, что p -я часть электронов, падающих на поверхность, отражается зеркально, следовательно, $(1-p)$ -я часть рассеивается поверхностью диффузно, или p есть вероятность того, что электрон от поверхности отразится зеркально.

Если ось z направить перпендикулярно плоскости пленки, толщиной d , то граничные условия Фукса можно записать в виде

$$\begin{aligned} f^+(0, k_z) &= pf^-(0, -k_z) + (1-p)f_0, & z=0, \\ f^-(d, k_z) &= pf^+(d, -k_z) + (1-p)f_0, & z=d. \end{aligned} \quad (24.5)$$

Здесь предполагается, что диффузно отраженная часть электронов описывается равновесной функцией распределения f_0 , а знаки \pm относятся к электронам проводимости с $k_z > 0$ и $k_z < 0$, соответственно; полную функцию распределения электронов в пленке можно представить в виде

$$f(\mathbf{k}, z) = f_0(\mathbf{k}) + f_1(\mathbf{k}, z). \quad (24.6)$$

Тогда из (24.5) получим граничные условия для неравновесной части функции распределения:

$$\begin{aligned} f_1^+(0, k_z) &= pf_1^-(0, -k_z), & z=0, \\ f_1^-(d, k_z) &= pf_1^+(d, -k_z), & z=d. \end{aligned} \quad (24.7)$$

Поскольку граничные условия Фукса (24.5) или (24.7) являются феноменологическим описанием поверхностного рассеяния, то было бы лучше вывести их из основных предпосылок, используемых в теории отражения и рассеяния электронных волн на поверхности кристалла [36—41].

Исходя из требования обращения в нуль суммарного потока через границу пленки, при выполнении определенных условий, можно связать параметр зеркальности p с вероятностью перехода электрона из состояния $\mathbf{k}^-(k_x, k_y, -k_z)$ в состояние $\mathbf{k}^+(k_x, k_y, k_z)$, благодаря рассеянию на поверхностных дефектах, следующим образом [41]:

$$p = 1 - \frac{1}{|v_z^-|} \int dk_1^+ W(\mathbf{k}^-, \mathbf{k}_1^+), \quad (24.8)$$

где рассеяние считается упругим.

Простейшим типом дефектов поверхности являются хаотически расположенные точечные или заряженные центры рассеяния [42]. Задача о рассеянии электронов на шероховатостях поверхности решалась в [43, 44]. Кинетические эффекты в пленках с шероховатыми поверхностями и влияние размера шероховатости на них исследовались в [45, 46].

Отметим, что введение параметра зеркальности с помощью (24.8) аналогично введению транспортного времени релаксации для объемного рассеяния.

Граничные условия (24.5) или (24.7) предполагают, что значение p одинаково для обеих поверхностей. Однако практически трудно получить пленку с идеально одинаковыми поверхностями. Обычно пленка контактирует с изолирующей подложкой с одной стороны поверхности, с атмосферой или защитным слоем, с другой, и поэтому параметр зеркальности будет иметь разные значения для двух поверхностей: p_1 и p_2 . Лукас [11] обобщил граничные условия Фукса (24.7) на случай пленки с различными поверхностями и вычислил проводимость без магнитного поля. Тогда вместо (24.7) имеем граничные условия

$$\begin{aligned} f_1^+(0, k_z) &= p_1 f_1^-(0, -k_z), \quad z=0, \\ f_1^-(d, k_z) &= p_2 f_1^+(d, -k_z), \quad z=d, \end{aligned} \quad (24.9)$$

для неравновесной функции распределения в пленках с параметрами зеркальности p_1 и p_2 на поверхностях $z=0$ и $z=d$, соответственно.

2. Решение кинетического уравнения в пленках с произвольной изотропной зоной. Как видно из (24.8) параметр зеркальности поверхности в общем случае является функцией энергии падающего электрона и угла падения $p=p(\mathbf{k})$. Таким образом, в этом приближении классическая теория явлений переноса в пленках сводится к решению кинетического уравнения (24.2) с правой частью (24.4) при граничных условиях (24.9), в которые входят параметры зеркальности p_1 и p_2 , в общем случае, зависящие как от энергии электрона, так и от угла падения электрона на поверхность.

Неравновесную часть функции распределения $f_1(\mathbf{k}, z)$, входящую в (24.6), по аналогии с (9.38), представим в виде

$$f_1(\mathbf{k}, z) = -\tau(k) (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \Phi(\mathbf{k}, z)) (\partial f_0 / \partial \epsilon). \quad (24.10)$$

В отличие от (9.38) в случае пленки, где учитывается поверхностное рассеяние, неизвестная функция $\Phi(\mathbf{k}, z)$ зависит от координат z и k_z . Тогда граничные условия (24.9) для функции $\Phi(\mathbf{k}, z)$ будут следующими [12]:

$$\begin{aligned} \Phi_\alpha^+(0, k_z) &= p_1 \Phi_\alpha^-(0, -k_z), \quad z=0, \\ \Phi_\alpha^-(d, k_z) &= p_2 \Phi_\alpha^+(d, -k_z), \quad z=d. \end{aligned} \quad (24.11)$$

Подставляя (24.6) и (24.10) в кинетическое уравнение (24.2), а также учитывая (24.4), получим уравнение для функции $\Phi(\mathbf{k}, z)$:

$$l_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \frac{e\tau(k)}{cm(k)} [\Phi \mathbf{H}] + \Phi = \Phi_0, \quad (24.12)$$

где $l_z = \tau(k) v_z$, а возмущающая сила Φ_0 дается формулой (9.16). Уравнение (24.12) от (9.47) отличается наличием первого члена.

Для решения уравнения (24.12) рассмотрим изотропный проводник в виде плоскопараллельной пластины, ограниченной по оси z , толщиной d . Магнитное поле \mathbf{H} направим по оси z , т. е.

перпендикулярно плоскости пленки. Удобнее писать векторное уравнение (24.12) в проекциях, учитывая, что $\mathbf{H}(0, 0, H)$ имеет всего одну компоненту. Тогда получим систему уравнений для Φ_α :

$$\begin{aligned} l_z \partial \Phi_x / \partial z + v \Phi_y + \Phi_x &= \Phi_{0x}, \\ l_z \partial \Phi_y / \partial z - v \Phi_x + \Phi_y &= \Phi_{0y}, \\ l_z \partial \Phi_z / \partial z + \Phi_z &= \Phi_{0z}, \end{aligned} \quad (24.13)$$

где $v = \Omega\tau = (eH/mc)\tau$.

Решая эту систему с учетом граничных условий (24.11), можно найти $\Phi_\alpha(z)$. Подставляя $\Phi_\alpha(z)$ в (13.5) и (13.6), найдем плотность тока и потока энергии $j_\alpha(z)$ и $w_\alpha(z)$. Затем необходимо усреднить эти токи по толщине пленки. Легко показать, что в рассматриваемой геометрии усредненные плотности тока и потока энергии сводится к усреднению функции $\Phi_\alpha(z)$ по толщине.

Приведем окончательное, усредненное решение системы (24.13) с учетом граничных условий (24.11)

$$\Phi_x^\pm = \frac{1}{1+v^2} [(1 \mp A_{1,2}) \Phi_{0x} - (v \mp B_{1,2}) \Phi_{0y}], \quad (24.14)$$

$$\Phi_y^\pm = \frac{1}{1+v^2} [(1 \mp A_{1,2}) \Phi_{0y} + (v \mp B_{1,2}) \Phi_{0x}], \quad (24.15)$$

$$\Phi_z^\pm = [1 \mp (l_z/d) \varphi_{1,2}(0)] \Phi_{0z}, \quad (24.16)$$

где знаки \pm относятся к электронам проводимости с $k_z > 0$ и $k_z < 0$, соответственно,

$$A_{1,2} = \frac{1}{1+v^2} \frac{l_z}{d} [(1-v^2) \operatorname{Re} \varphi_{1,2}(v) - 2v \operatorname{Im} \varphi_{1,2}(v)], \quad (24.17)$$

$$B_{1,2} = \frac{1}{1+v^2} \frac{l_z}{d} [2v \operatorname{Re} \varphi_{1,2}(v) + (1-v^2) \operatorname{Im} \varphi_{1,2}(v)], \quad (24.18)$$

$$\varphi_{1,2}(v) = \frac{1 - p_{1,2} + p_{1,2}(1 - p_{2,1}) \exp(\mp s_z)}{1 - p_1 p_2 \exp(\mp 2s_z)} [1 - \exp(\mp s_z)], \quad (24.19)$$

$$s_z = (d/l_z)(1 - iv). \quad (24.20)$$

Отметим, что решения (24.14)–(24.16) представляют собой компоненты обобщенной возмущающей силы с учетом поверхностного рассеяния и совпадают с (13.7)–(13.9) при $d \rightarrow \infty$, а также при $p_1 = p_2 = 1$.

Функции (24.14)–(24.16) совместно с (24.10) и (24.6) представляют собой решение кинетического уравнения (24.2) в произвольном некантованном магнитном поле, перпендикулярном плоскости пленки с произвольным изотропным законом дисперсии. В таком общем виде оно получено в работе [12]. Однако для пленки с одинаковыми поверхностями, при отсутствии градиента температуры кинетическое уравнение решено впервые Зондгеймером [10].

3. **Общий вид тензоров проводимости в пленках.** Используя решения (24.14) и (24.15) и (13.5) и (13.6), можно получить следующие общие выражения для тензоров проводимости σ_{ik} , β_{ik} и χ_{ik} в пленке, входящих в уравнение переноса (13.10) и (13.11),

$$\sigma_{ik} = ne^2 \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{v^{k-i}}{1+v^2} D_{ik} \right\rangle, \quad (24.21)$$

$$\beta_{ik} = -\frac{ne}{T} \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{(\epsilon - \zeta) v^{k-i}}{1+v^2} D_{ik} \right\rangle, \quad (24.22)$$

$$\chi_{ik} = \frac{n}{T} \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{(\epsilon - \zeta)^2 v^{k-i}}{1+v^2} D_{ik} \right\rangle, \quad i \leq k; \quad i, k = 1, 2, \quad (24.23)$$

где символ усреднения имеет смысл (13.21) и введены обозначения

$$D_{11} = 1 - \frac{3}{2\delta} \frac{1}{1+v^2} [(1-v^2) \operatorname{Re} I - 2v \operatorname{Im} I], \quad (24.24)$$

$$D_{12} = 1 - \frac{3}{2\delta} \frac{1}{v(1+v^2)} [2v \operatorname{Re} I + (1-v^2) \operatorname{Im} I], \quad (24.25)$$

$$I(p_1, p_2, s) = \int_1^\infty \frac{[1 - \bar{p} + (\bar{p} - p_1 p_2) e^{-sx}] (1 - e^{-sx})}{1 - p_1 p_2 e^{-2sx}} \left(\frac{1}{x^3} - \frac{1}{x^5} \right) dx, \quad (24.26)$$

$$s = \delta(1 - iv), \quad \delta = d/l, \quad \bar{p} = 1/2(p_1 + p_2), \quad x^{-1} = \cos \theta, \quad (24.27)$$

θ — угол между осью z и волновым вектором \mathbf{k} электрона проводимости.

Выражения для тензоров проводимости (24.21) — (24.23) в общем случае в компактном виде получены в [12]. Позднее и в частном случае, когда отсутствует градиент температуры, аналогичные выражения получены в работе [47].

Следует отметить, что формулы (24.21) — (24.25) представляют собой обобщение (13.23) — (13.25) на случай, когда d/l имеет произвольное значение. Сравнение этих формул показывает, что они отличаются только наличием функций D_{ik} , характеризующих влияние поверхностного рассеяния на кинетические эффекты. Функции D_{ik} в свою очередь выражаются через единственный интеграл $I(p_1, p_2, s)$. Таким образом, вся информация о роли поверхностного рассеяния содержится в функции $I(p_1, p_2, s)$. Если поверхностное рассеяние отсутствует ($p_1 = p_2 = 1$), то интеграл (24.26) обращается в нуль. Тогда, как видно из (24.24) и (24.25), $D_{ik} = 1$, и выражения тензоров проводимости (24.21) — (24.23) переходят в (13.23) — (13.25) для массивного образца. Отметим, что такой переход имеет место и при $\delta = (d/l) \rightarrow \infty$.

Следовательно, переход к массивному образцу можно осуществить двумя путями: либо в выражениях тензоров проводимости перейти к пределу при $\delta = (d/l) \rightarrow \infty$, либо в этих выражениях положить $p_1 = p_2 = 1$. Первый путь понятен по своему смыслу,

что касается второго, то по определению $p_i = 1$ соответствует зеркальному отражению электрона от данной поверхности $k'_z \rightarrow -k_z$, т. е. при $p = 1$ отражение происходит без потери импульса, параллельно плоскости пленки, что равносильно отсутствию поверхностного рассеяния.

§ 25. Явления переноса в пленках с произвольным изотропным законом дисперсии

Приведенные в предыдущем параграфе результаты для тензоров проводимости σ_{ik} , β_{ik} и κ_{ik} , с использованием определений (13.14) — (13.19), вполне достаточны для всестороннего рассмотрения всех основных кинетических эффектов в пленках с изотропным законом дисперсии. Как было отмечено выше, параметры зеркальности поверхностей пленки p_1 и p_2 , вообще говоря, являются произвольной функцией энергии электрона и угла падения электрона на поверхность. Для вычисления кинетических коэффициентов, которые выражаются через тензоры проводимости по формулам (13.14) — (13.19), нужно знать конкретный вид закона дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(k)$, явную зависимость τ от k , а также явную зависимость $p_{1,2}$ от ε и θ , т. е. нужно исходить из определенной модели. Рассмотрим некоторые частные модели, приведем конкретные результаты и отметим интересные особенности явлений переноса в пленках, связанные с поверхностным рассеянием.

Поверхностное рассеяние, как видно из (24.24) и (24.45), описывается интегралом $I(p_1, p_2, s)$. Если параметры зеркальности p_1 и p_2 , входящие в этот интеграл, не зависят от угла падения θ и, следовательно, от x , то (24.26) можно выразить через известные функции.

Действительно, если учесть, что при $p_{1,2} < 1$ *) величина

$$|p_1 p_2 \exp(-2sx)| < 1, \quad (25.1)$$

то подынтегральный множитель в (24.26) можно представить в виде

$$[1 - p_1 p_2 \exp(-2sx)]^{-1} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (p_1 p_2)^n \exp(-2snx). \quad (25.2)$$

Подставляя (25.2) в (24.26) и учитывая, что p_1 и p_2 от x не зависят, для интеграла $I(p_1, p_2, s)$ получим выражение

$$\begin{aligned} I(p_1, p_2, s) = & \\ = \frac{1}{4} (1 - \bar{p}) + [(2 - \bar{p}) p_1 p_2 - \bar{p}] \sum_{n=1}^{\infty} (p_1 p_2)^{n-1} [E_3(2ns) - E_5(2ns)] + & \\ + (2\bar{p} - p_1 p_2 - 1) \sum_{n=1}^{\infty} (p_1 p_2)^{n-1} [E_3((2n-1)s) - E_5((2n-1)s)], & \end{aligned} \quad (25.3)$$

*) Случай $p_1 = p_2 = 1$ автоматически исключается, так как при этом $I(p_1, p_2) = 0$.

где

$$E_m(s) = \int_1^{\infty} x^{-m} \exp(-sx) dx \quad (25.4)$$

есть интегро-экспоненциальная функция с комплексным параметром s [48].

Представление интеграла $I(p_1, p_2, s)$ в виде (25.3) удобно тем, что он выражен через известные функции $E_m(s)$. Применение асимптотики и таблицы этой функции [48] дает возможность исследовать влияние поверхностного рассеяния на кинетические эффекты при различных предположениях о толщине пленки и величине магнитного поля. Здесь рассмотрим некоторые частные случаи.

1. Толстые пленки ($\delta \gg 1$) в произвольном магнитном поле или пленки почти произвольной толщины ($\delta \geq 1$) в сильном магнитном поле ($v \gg 1$). Толщина пленки и величина магнитного поля даются комплексным параметром $s = \delta(1 - iv)$. Легко видеть, что рассматриваемым случаям соответствует условие $|s| = \delta\sqrt{1 + v^2} \gg 1$. Тогда, если использовать асимптотическое разложение интегро-экспоненциальной функции [48] при больших значениях s ,

$$E_m(s) \sim s^{-1} \exp(-s), \quad (25.5)$$

то в (25.3) можно оставить только первый член, и для интеграла получим вещественное значение простого вида

$$I(p_1, p_2) = (1 - \bar{p})/4, \quad (25.6)$$

не зависящего ни от толщины δ , и ни от магнитного поля v .

Тогда из (24.24) и (24.25) для D_{ik} имеем

$$D_{11} = 1 - \frac{3(1 - \bar{p})}{8\delta} \frac{1 - v^2}{1 + v^2}, \quad (25.7)$$

$$D_{12} = 1 - \frac{3(1 - p)}{4\delta} \frac{1}{1 + v^2}. \quad (25.8)$$

Подставляя эти выражения в (24.21) — (24.23), для компонент тензоров проводимости получим

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ik}^M - \frac{3ne^2}{8} (1 - \bar{p}) \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{(2v)^{k-i} (1 - v^2)^{2i-h}}{\delta (1 + v^2)^2} \right\rangle, \quad (25.9)$$

$$\beta_{ik} = \beta_{ik}^M + \frac{3ne}{8T} (1 - \bar{p}) \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{(2v)^{k-i} (\varepsilon - \zeta) (1 - v^2)^{2i-h}}{\delta (1 + v^2)^2} \right\rangle, \quad (25.10)$$

$$\chi_{ik} = \chi_{ik}^M - \frac{3n}{8T} (1 - \bar{p}) \left\langle \frac{\tau}{m} \frac{(2v)^{k-i} (\varepsilon - \zeta)^2 (1 - v^2)^{2i-h}}{\delta (1 + v^2)^2} \right\rangle, \quad (25.11)$$

$$i \leq k; \quad i, k = 1, 2,$$

где σ_{ik}^M , β_{ik}^M и χ_{ik}^M — компоненты соответствующих тензоров в массивном образце, которые даются формулами (13.23) — (13.25).

Таким образом, в предположении постоянства параметра зер-
кальности $p_{1,2} = \text{const}$ и $|s| \gg 1$, нахождение тензоров проводимо-
сти сводится к вычислению интегралов по энергии (25.9) —
(25.11). Для заданного механизма рассеяния и закона дисперсии
можно найти явный вид этих интегралов. Расчет доводится до
конца в случае сильного вырождения даже для произвольной
изотропной зоны. Однако полученные выражения для кинетиче-
ских коэффициентов в пленке оказываются довольно громоздки-
ми. Поэтому приведем окончательные результаты, полученные на
основе (25.9) — (25.11), в некоторых конкретных условиях.

Толстые пленки в слабом магнитном поле. Разлагая в этом
случае (25.9) — (25.11) по степеням $v \ll 1$ можно найти явный
вид тензоров. Для параболической зоны и для модели Кейна они
выражаются через одно- и двухпараметрические интегралы Фер-
ми, соответственно. Но мы здесь приведем результаты для про-
извольной изотропной зоны, только предполагая, что электрон-
ный газ сильно вырожден. Для основных кинетических коэффи-
циентов: сопротивления ρ , термо-э. д. с. α , электронной теплопро-
водности κ и коэффициента Нернста — Эттингсгаузена Q эти ре-
зультаты следующие [16]:

$$\rho_{\text{пл}}(H) = \rho_{\text{м}}(H) + (3(1 - \bar{p})/8\delta_F) \rho_{\text{м}}(0), \quad (25.12)$$

$$\alpha_{\text{пл}}(H) = \alpha_{\text{м}}(H) + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_0}{e}\right) \frac{k_0 T}{\zeta^*} \frac{3(1 - \bar{p})}{8\delta_F} (r - \gamma(n)), \quad (25.13)$$

$$\kappa_{\text{пл}}(H) = \kappa_{\text{м}}(H) - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 T \sigma_0 \frac{3(1 - \bar{p})}{8\delta_F}, \quad (25.14)$$

$$Q_{\text{пл}} = Q_{\text{м}} - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_0}{e}\right) \frac{u}{c} \frac{3(1 - \bar{p})}{4\delta_F} \frac{k_0 T}{\zeta^*} \left(r - \frac{1}{4} - \gamma(n)\right), \quad (25.15)$$

где $\rho_{\text{м}}(H)$, $\alpha_{\text{м}}(H)$, $\kappa_{\text{м}}(H)$ и $Q_{\text{м}}$ — коэффициенты для массивного
образца в слабом магнитном поле ($v \ll 1$), $\delta_F = d/l_F$, σ_0 — электро-
проводность массивного образца, ζ^* — дается (14.42), параметр
 $\gamma(n)$ характеризует степень непараболичности зоны и дается
(14.35). В двухзонном приближении Кейна, согласно (14.33),
этот параметр имеет вид

$$\gamma(n) = \frac{3n}{m} \frac{dm}{dn} = \frac{2\hbar^2 m_n (3\pi^2 n)^{2/3}}{\varepsilon_g m^2 (\zeta_F)}. \quad (25.16)$$

При отсутствии магнитного поля из (25.12) для сопротивления
пленки получаем известный результат

$$\rho_{\text{пл}}(0)/\rho_{\text{м}}(0) = 1 + 3(1 - \bar{p})/8\delta_F. \quad (25.17)$$

Видно, что сопротивление пленки самое большое значение
имеет при диффузном рассеянии электронов проводимости на по-
верхностях, когда $p_1 = p_2 = 0$.

Отметим, что формула (25.17) справедлива для толстых пле-
нок $d \gg l_F$ с вырожденным электронным газом. В общем случае,
для вырожденных пленок произвольной толщины, согласно

(24.12), отношение удельных сопротивлений пленки и массивного образца дается формулой

$$\rho_{пл}(0)/\rho_m(0) = [1 - (3/2\delta)I(p_1, p_2, 0)]^{-1}, \quad (25.18)$$

где $I(p_1, p_2, 0)$ — имеет вид (24.26) при $\nu = 0$.

На основе численного расчета (25.18), проведенного на ЭВМ, можно построить зависимость $\rho_{пл}(0)/\rho_m(0)$ от приведенной толщины $\delta = d/l$ во всей области толщин.

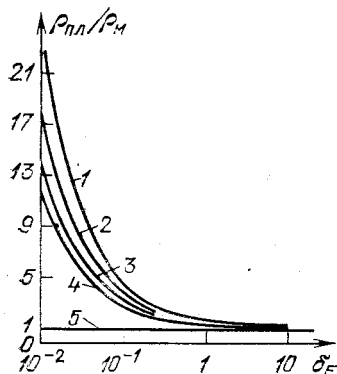


Рис. 31. Зависимость отношения удельного сопротивления пленки к сопротивлению массивного образца от приведенной толщины $\delta_F = d/l_F$ при различных параметрах зеркальности p_1 и p_2 : 1 — $p_1 = p_2 = 0$; 2 — $p_1 = 0, p_2 = 0,5$; 3 — $p_1 = 0, p_2 = 1$; 4 — $p_1 = 0,2, p_2 = 0,8$; 5 — $p_1 = p_2 = 1$

знак этой части различен при рассеянии на акустических фононах ($r=0$), при рассеянии на оптических фононах ($r=1$) и рассеянии на ионах примеси ($r=2$).

Когда магнитное поле отсутствует, из (25.13) имеем

$$\alpha_{пл}(0) = \alpha_m(0) \left[1 - \frac{3(1-\bar{p})}{8\delta_F} \frac{r - \gamma(n)}{r + 1 - \gamma(n)} \right], \quad (25.19)$$

где $\alpha_m(0)$ — термо-э. д. с. массивного образца (14.34).

Из (25.19) видно, что при рассеянии на акустических фононах ($r=0$) нестандартность зоны $\gamma(n)$ играет определяющую роль: при $\gamma(n) \rightarrow 1$ отношение $\alpha_{пл}/\alpha_m > 1$. Для этого механизма можно наблюдать заметное увеличение $\alpha_{пл}/\alpha_m$ с концентрацией носителей [16]. Для других механизмов ($r=1, r=2$) термо-э. д. с. пленки меньше, чем в массивном образце и $\alpha_{пл}/\alpha_m$ почти не зависит от непараболичности зоны $\gamma(n)$, т. е. от концентрации [16].

Пленки в сильном магнитном поле. В этом случае ($\nu \gg 1$) формулы (25.9) — (25.11) применимы для пленок почти произвольной толщины ($\delta \geq 1$), так как они верны при $|s| \gg 1$, что

Результаты этого расчета показаны на рис. 31, которые не зависят от модели изотропной зоны. Из этого рисунка видно, что в тонких пленках ($\delta < 0,1$) сопротивление на порядок больше, чем в массивном образце. Асимптотическое поведение сопротивления в тонких пленках рассмотрено в пункте 2 настоящего параграфа.

Поскольку концентрации электронов проводимости в пленке и в массивном образце считаем одинаковыми, то отношение подвижностей в пленке и в массивном случае определяется такими же формулами (25.17) или (25.18), как и отношение сопротивлений.

Из (25.13) следует, что природа объемного механизма рассеяния (параметр r) и степень нестандартности зоны $\gamma(n)$ сильно влияют на размерную часть термо-э. д. с. Так,

выполняется, когда $\nu d \gg 1$. Можно рассмотреть все кинетические коэффициенты. Однако здесь остановимся только на эффекте Нернста — Эттингсгаузена, поскольку в сильном магнитном поле его зависимость от толщины является интересной. В первом приближении по вырождению для коэффициента Нернста — Эттингсгаузена в этом случае получим выражение [16]

$$Q = Q_0 \frac{1}{\nu^2} \left[(r - \gamma(n) - 1/2) - \frac{3(1 - \bar{\rho})}{16\delta_F} \right], \quad \delta_F \gg 1; \quad (25.20)$$

здесь

$$Q_0 = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_0 T}{\zeta_F} \right) \frac{u}{c}. \quad (25.21)$$

Из (25.20) видно, что при рассеянии на акустических фононах ($r=0$) знак Q всегда отрицателен, тогда как для рассеяния на оптических фононах ($r=1$) и на ионах примеси ($r=2$) при некотором значении приведенной толщины

$$\delta_0 = \frac{3}{8}(1 - \bar{\rho}) / (2r - 2\gamma - 1) \quad (25.22)$$

Q может менять свой знак. При толщинах $\delta_F > \delta_0$ знак Q , согласно (25.20), положителен, а при $\delta_F < \delta_0$ знак Q отрицателен. Таким образом, в пленках с приведенной толщиной $\delta_F < \delta_0$ независимо от объемного механизма рассеяния Q должен быть отрицательным.

Из (25.22) следует, что учет непараболичности зоны ($\gamma > 0$) увеличивает толщину пленки, при которой происходит инверсия знака Q , что способствует экспериментальному обнаружению данного эффекта.

Поскольку формула (25.20) верна только при толщине $\delta_F \gg 1$, то для получения зависимости Q от δ_F необходимо произвести численные расчеты на основе общей формулы. Результаты такого расчета на ЭВМ для одного значения магнитного поля ($\nu = 8$) в случае параболической зоны приведен на рис. 32, из которого видно, что, действительно при $d \leq l$ знак Q , независимо от объемного механизма, определяется поверхностным рассеянием и является отрицательным. Значения δ_F , при которых Q меняет знак (для $r=1$ и $r=2$) хорошо согласуются с формулой (25.22). Из

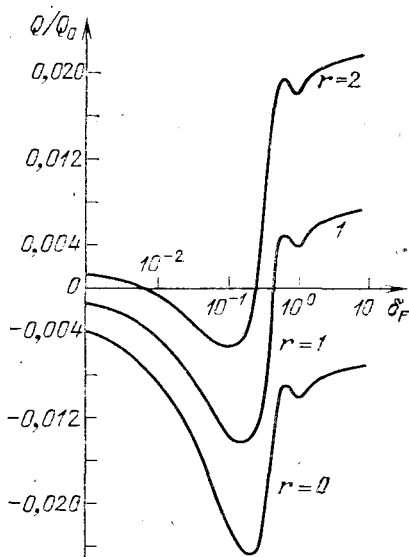


Рис. 32. Зависимость коэффициента Нернста — Эттингсгаузена от приведенной толщины $\delta_F = d/l_F$ в сильном магнитном поле ($\nu = 8$) при различных механизмах рассеяния

рис. 32 также видно, что и для очень тонких пленок ($\delta \ll 1$) знак Q определяется объемным механизмом рассеяния, т. е. при рассеянии на оптических фононах и ионах примеси Q , в зависимости от приведенной толщины может два раза менять свой знак, тогда как при рассеянии на акустических фононах для всех толщин Q отрицателен. По-видимому, такое поведение Q качественно можно объяснить следующим образом: в сильном магнитном поле каждый электрон в плоскости локализуется в области циклотронной орбиты $r \ll l$ и поэтому при толщинах $d \sim l$ большинство электронов испытывает поверхностное рассеяние, характеризующееся эффективным временем релаксации $\tau_s \sim d/v \sim \varepsilon^{-1/2}$, что аналогично рассеянию на акустических фононах. В случае тонких пленок ($d \ll l$) основной вклад в образование поля Нернста — Эттингсгаузена вносят скользящие электроны с холловским углом $\varphi = \Omega\tau$, так как для остальных групп электронов этот угол $\varphi \approx \approx \Omega\tau_s \approx \Omega\tau(d/l)$ и он в $l/d \gg 1$ раз меньше. Поэтому, знак Q может определяться скользящими электронами, для которых поверхностное рассеяние не играет роли.

Отметим, что в сильном магнитном поле выражения для термо-э. д. с. и эффекта Холла в пленке совпадают с соответствующими выражениями для массивного образца. Сопротивление пленок в сильном магнитном поле будем рассматривать отдельно в пункте 3 настоящего параграфа, а пока остановимся на тонких пленках.

2. Тонкие пленки в слабом магнитном поле [16, 33, 48]. В этом случае ($\delta \ll 1$) результаты, приведенные в предыдущем пункте, неприменимы, так как условие $|s| \gg 1$ не выполняется. Наоборот, для тонких пленок может выполняться неравенство $|s| \ll 1$, если магнитное поле несильное ($v \ll 1$).

Мы здесь рассмотрим тонкие пленки в слабом магнитном поле ($\delta \ll 1, v \ll 1$) с произвольной изотропной зоной. Тогда интеграл $I(p_1, p_2)$, представленный в виде (25.3), можно вычислить, если использовать рекуррентную формулу

$$E_{n+1}(s) = \frac{1}{n} [e^{-s} - sE_n(s)], \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (25.23)$$

и асимптотику для малых s [70]:

$$E_1(s) = -C - \ln s - \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{s^k}{kk!}, \quad (25.24)$$

где $C = 0,5772$ — постоянная Эйлера.

Используя это приближение для сопротивления, термо-э. д. с. и электронной теплопроводности вырожденных тонких пленок при отсутствии магнитного поля ($\delta \ll 1, v = 0$), получим следующие выражения [16, 33]:

$$\rho_{\text{пл}}(0) = \rho_{\text{м}}(0) \frac{4}{3} \frac{1 - p_1 p_2}{(1 + p_1)(1 + p_2)} \frac{1}{\delta_F} \frac{1}{(1 - C - \ln \delta_F)}, \quad (25.25)$$

$$\alpha_{\text{пл}}(0) = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_0}{e} \frac{k_0 T}{\zeta^*} \left[1 + \frac{r - \gamma(n)}{(1 - C - \ln \delta_F)} \right], \quad (25.26)$$

$$\kappa_{\text{пл}}(0) = \kappa_{\text{м}}(0) \frac{3}{4} \frac{(1 + p_1)(1 + p_2)}{1 - p_1 p_2} \delta_F (1 - C - \ln \delta_F), \quad (25.27)$$

где $\delta_F = d/l_F$, ζ^* и $\gamma(n)$ даны в (14.42) и (25.16), соответственно.

Формула для сопротивления (25.25) в случае тонких пленок с различными зеркальностями поверхностей p_1 и p_2 получена Юречке [49] и при $p_1 = p_2$ переходит в формулу, полученную впервые Чамберсом [50] и Зондгеймером [24], а при $p_1 = p_2 = 0$ совпадает с результатом работы [51].

Как видно из (25.25) и (25.27), в области тонких пленок ($\delta_F \ll 1$) сопротивление намного больше, чем в массивном образце, а теплопроводность во столько же раз меньше. Из этих же формул следует, что закон Видемана — Франца выполняется и в тонких пленках: $\rho_{\text{пл}}(0) \kappa_{\text{пл}}(0) = \rho_{\text{м}}(0) \kappa_{\text{м}}(0)$.

При слабых магнитных полях для коэффициентов Холла R и Нернста — Эттингсгаузена Q в тонких вырожденных пленках ($\nu \ll 1$ и $\delta_F \ll 1$) можно получить выражения

$$R_{\text{пл}} = R_{\text{м}} \frac{4}{3} \frac{1 - p_1 p_2}{(1 + p_1)(1 + p_2)} \frac{1}{\delta_F} (1 - C - \ln \delta_F)^{-2}, \quad (25.28)$$

$$Q_{\text{пл}} = \frac{k_0}{e} \frac{u}{c} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_0 T}{\zeta^*} \frac{[r - 1/2 - \gamma(n)] (1 - C - \ln \delta_F) - r + \gamma(n)}{(1 - C - \ln \delta_F)^2}. \quad (25.29)$$

Из этих выражений следует, что в тонких пленках ($\delta_F \ll 1$) коэффициент Холла больше, чем в массивных образцах, а Q , вообще говоря, с уменьшением толщины растет.

Отметим, что для тонких пленок ($\delta_F \ll 1$) формулы (25.25) — (25.29) получены в предположении, что параметр зеркальности одной поверхности хотя бы p_1 или p_2 был намного меньше единицы ($p_1 \ll 1$ или $p_2 \ll 1$).

3. Отрицательное магнетосопротивление в пленках. Когда толщина пленки порядка длины свободного пробега носителей тока по импульсу, наблюдается ряд новых явлений, не имеющих места в массивных образцах. Наиболее интересным являются осцилляции сопротивления в некантованном магнитном поле, впервые предсказанные Зондгеймером [10], осцилляции других кинетических характеристик [52], немонотонная зависимость эффекта Нернста — Эттингсгаузена от толщины пленки [33, 48] и т. д.

В работе [53] показана еще одна особенность кинетических свойств пленок, а именно, в пленках с изотропным спектром носителей заряда и при полном вырождении магнетосопротивление отлично от нуля; более того оно в определенной области толщин отрицательно. На этом интересном эффекте остановимся более подробно.

Если подставить (24.21) в (13.14) и предположить, что электронный газ полностью вырожден, то для сопротивления вырож-

денных пленок получим выражение

$$\rho_{\text{пл}}(H) = \rho_{\text{м}}(0) \frac{(1 + v^2) D_{11}(v, \delta_F)}{D_{11}^2(v, \delta_F) + v^2 D_{12}^2(v, \delta_F)}, \quad (25.30)$$

где $\rho_{\text{м}}(0) = (m/\tau)(1/ne^2)$ — сопротивление массивного образца без магнитного поля при полном вырождении. В (25.30) все величины: $v = (eH/m(\epsilon)c)\tau(\epsilon)$, $m(\epsilon)$, $\tau(\epsilon)$ берутся на границе Ферми.

Для теоретического анализа, а также для сопоставления с экспериментом удобным является отношение изменения сопротивления в магнитном поле $\Delta\rho = \rho_{\text{пл}}(H) - \rho_{\text{пл}}(0)$ к сопротивлению пленки без поля $\rho_{\text{пл}}(0)$. Из (25.30) легко получим

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_{\text{пл}}(0)} = \frac{(1 + v^2) D_{11}(v, \delta_F) D_{11}(0, \delta_F)}{D_{11}^2(v, \delta_F) + v^2 D_{12}^2(v, \delta_F)} - 1, \quad (25.31)$$

где $\rho_{\text{пл}}(0) = \rho_{\text{м}}(0)/D_{11}(0, \delta_F)$ — сопротивление пленки без магнитного поля.

Из (25.31) видно, что при переходе к массивному случаю ($D_{11} = D_{12} = 1$), как следовало ожидать, магнетосопротивление отсутствует. В случае же пленки ($D_{11} \neq 1$ и $D_{12} \neq 1$), вообще говоря, $\Delta\rho/\rho_{\text{пл}}(0)$ отлично от нуля в пленках с изотропным спектром и при полном вырождении. Этот факт качественно можно объяснить наличием двух групп электронов проводимости в пленке с различными эффективными временами релаксации: одна группа электронов, движущихся в плоскости пленки, имеет $\tau = \tau_{\text{об}}$, а другая группа электронов, движущихся поперек пленки, характеризуется $\tau = \tau_{\perp} = d/v_z$. Это и есть необходимое условие возникновения магнитного сопротивления в проводнике (см. § 15, п. 2).

В общем случае задача сводится к исследованию правой части (25.31) в различных ситуациях по толщине (параметр δ_F) и по величине магнитного поля (параметр v). Мы здесь приведем аналитическое выражение для магнетосопротивления в одном случае: толстые пленки в произвольном некваंटующем магнитном поле ($\delta_F \gg 1$, v — любое). В этом случае можно использовать выражения (25.7) и (25.8). Подставляя их в (25.31), а затем разлагая по параметру $\delta_F^{-1} \ll 1$, получим

$$\Delta\rho/\rho_{\text{пл}}(0) = -(v^2/(1 + v^2))(3(1 - \bar{p})/8\delta_F)^2. \quad (25.32)$$

Видно, что в пределе толстых пленок ($\delta_F \gg 1$) при любом магнитном поле магнитное сопротивление отрицательно. В сильных магнитных полях ($v \gg 1$) магнитное сопротивление (25.32) насыщается и стремится к довольно большому отрицательному значению (см. рис. 40, 34).

Отрицательность магнитного сопротивления, по-видимому, можно объяснить следующим образом: когда пленка толщиной $d < l_F$ вносится в магнитное поле, перпендикулярное плоскости пленки, то число носителей, не достигающих поверхности, растет, а число электронов, рассеивающихся на поверхности, уменьша-

ется. Поскольку не достигающие поверхности носители имеют длину свободного пробега $l_F > d$, то сопротивление в магнитном поле становится меньше, чем без него.

Чтобы иметь полное представление о магнитном сопротивлении при произвольном значении магнитного поля и произвольной

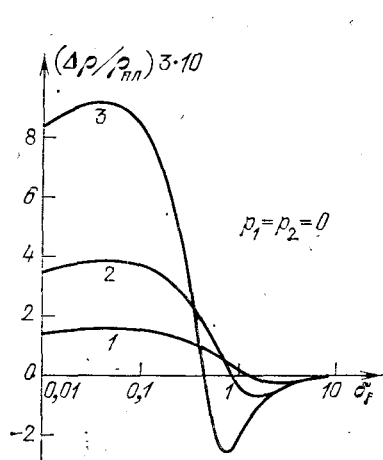


Рис. 33. Зависимость $\Delta\rho/\rho_{пл}$ от толщины пленки δ_F в области средних и сильных магнитных полей: 1 — $\nu = 1$; 2 — $\nu = 2$; 3 — $\nu = 5$

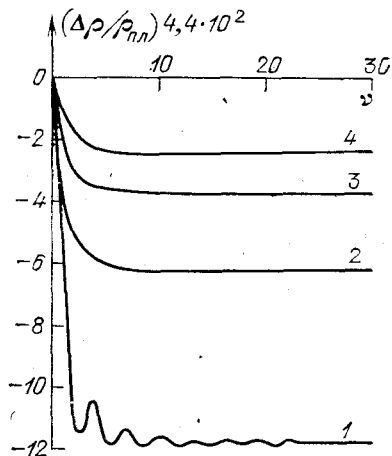


Рис. 34. Зависимость $\Delta\rho/\rho_{пл}$ от магнитного поля ν в области толстых пленок: 1 — $\delta_F = 2$; 2 — $\delta_F = 3$; 3 — $\delta_F = 4$; 4 — $\delta_F = 5$

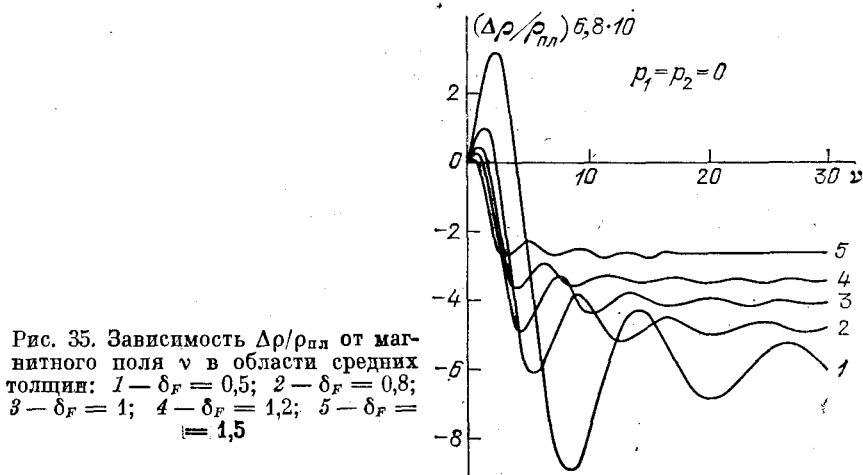


Рис. 35. Зависимость $\Delta\rho/\rho_{пл}$ от магнитного поля ν в области средних толщин: 1 — $\delta_F = 0,5$; 2 — $\delta_F = 0,8$; 3 — $\delta_F = 1$; 4 — $\delta_F = 1,2$; 5 — $\delta_F = 1,5$

толщине пленки на основе общей формулы (25.31), с использованием (24.24) и (24.25), был произведен численный расчет [53] при диффузном рассеянии на поверхностях $p_1 = p_2 = 0$. Некоторые результаты этого расчета в виде графиков приведены на рис. 33—35. На рис. 33 показана зависимость магнитного сопро-

тивления от толщины, т. е. от параметра δ_F при различных значениях магнитного поля. Видно, что имеется область толщин, где магнетосопротивление отрицательно. Значение толщины, при которой $\Delta\rho/\rho_{пл}(0)$ меняет свой знак на положительный, зависит от магнитного поля и с его ростом уменьшается.

Зависимость $\Delta\rho/\rho_{пл}(0)$ от магнитного поля в области толщин, где магнитное сопротивление отрицательно, показано на рис. 34, 35, из которых видно, что магнетосопротивление в сравнительно тонких пленках (кривые 1—5 на рис. 35 и кривая 1 на рис. 34) в зависимости от магнитного поля осциллирует (осцилляции Зондгеймера [10]) и с ростом ν насыщается, оставаясь при этом отрицательным. Период этих осцилляций уменьшается с ростом толщины.

Легко проверить, что кривые для толстых пленок 2—4 на рис. 34 довольно хорошо описываются формулой (25.32) при $p_1 = p_2 = 0$. По экспериментальным значениям насыщения $\Delta\rho/\rho_{пл}(0)$, используя (25.32), можно оценить $\bar{\rho}$ или l_F в вырожденных толстых пленках.

Таким образом, в отличие от массивных образцов, в вырожденных пленках с изотропным законом дисперсии магнитное сопротивление отлично от нуля и может быть отрицательным. Как видно из рис. 33, величина $\Delta\rho/\rho_{пл}(0)$ в отрицательной области может достигнуть около десяти процентов. Уменьшение сопротивления пленки в магнитном поле на одном образце *n*-PbTe экспериментально наблюдается в работе [54].

В заключении отметим, что в теории электронных явлений переноса в пленках существует много задач, которых мы здесь не коснулись. Укажем лишь, что влияние увлечения носителей тока фононами на термомагнитные явления в пленках исследовано в [34], изгиб зоны учтен в работах [19, 55—57]. Явления переноса в пленках с анизотропным спектром и анизотропным рассеянием в объеме рассмотрены в работе [18]. Эти и многие другие результаты по электронным явлениям переноса в полупроводниковых пленках подробно изложены в обзоре [58].

§ 26. Квантовые размерные эффекты

В последних двух параграфах были изучены классические размерные эффекты, когда толщина пленки d сравнима с длиной свободного пробега l , и было показано, что кинетические характеристики в этом случае существенно зависят от толщины, а также появляются качественно новые свойства, отсутствующие в массивных образцах.

Здесь рассмотрим случай, когда толщина пленки порядка длины волны де Бройля носителей тока. В этом случае поперечное движение носителей квантуется, спектр становится частично дискретным, т. е. имеет место *квантовый размерный эффект*.

Теория квантового размерного эффекта впервые была создана в работах И. Лифшица с сотрудниками [59, 60], где исследованы

осцилляции термодинамических величин сильно вырожденного электронного газа в ограниченных металлических образцах.

Исследованию квантового размерного эффекта в полуметаллических и полупроводниковых пленках посвящено довольно много работ [7, 8, 61—69]. В них сформулированы необходимые условия для проявления размерного квантования и исследованы различные термодинамические и гальваномагнитные свойства квантовых пленок и проволок. Термомагнитные явления в условиях размерного квантования теоретически исследованы авторами [70, 71].

Условия проявления размерного квантования, которые приведем ниже, реально выполняются в полуметаллических и полупроводниковых пленках, так как в них длина волны де Бройля носителей, как правило, на несколько порядков превышает межатомное расстояние. В настоящее время имеются убедительные экспериментальные доказательства существования квантового размерного эффекта в полуметаллических [72—75] и полупроводниковых [76, 77] пленках. В этих работах обнаружено влияние размерного квантования на ряд физических свойств Bi и InSb .

На основе простой модели пленки проанализируем некоторые особенности квантового размерного эффекта.

1. Энергетический спектр и плотность состояний. Рассмотрим тонкую пленку с изотропным законом дисперсии. Если направить ось z по нормали к пленке, то электроны проводимости будут совершать свободное движение вдоль осей x и y (в плоскости пленки), а движение вдоль оси z будет ограничиваться поверхностями пленки. В качестве модели потенциала пленки $U(z)$, как обычно, примем прямоугольную яму с плоским дном и бесконечно высокими стенками, т. е.

$$U(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < z < d, \\ \infty & \text{при } 0 > z > d; \end{cases} \quad (26.1)$$

где d — толщина пленки. В плоскости (XY) пленки будем считать, что $U(x, y) = \text{const}$.

Одноэлектронные нормированные волновые функции и энергетический спектр носителей тока для заданного распределения потенциала имеют вид

$$\Psi_{n\hbar_x\hbar_y}(x, y, z) = \left(\frac{2}{L_1 L_2 d}\right)^{1/2} \sin \frac{\pi}{d} n \exp[i(k_x x + k_y y)], \quad (26.2)$$

$$\varepsilon(n, k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{d}\right)^2 n^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2), \quad (26.3)$$

где m — эффективная масса носителей тока, L_1 и L_2 — соответствующие размеры основной области пленки в плоскости (xy) , $n = 1, 2, 3, \dots$ — размерное квантовое число.

Видно, что состояния электрона проводимости определяются тремя квантовыми числами (n, k_x, k_y) , одно из которых n принимает дискретные положительные значения. Энергетический

спектр, согласно (26.3), разбивается на отдельные перекрывающиеся двумерные подзоны $\varepsilon_n = \varepsilon_n(k_x, k_y)$, соответствующие фиксированным значениям n . Три такие подзоны схематически показаны на рис. 36. Движение электрона в двумерном \mathbf{k} -пространстве (k_x, k_y) непрерывно, а по третьему направлению (k_z) движение или запрещено ($n=1$) или ограничено — двумерный электрон.

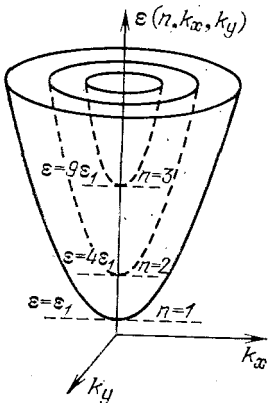


Рис. 36. Частично квантованный спектр носителей тока в тонкой пленке

Отличительной особенностью спектра в пленке является также наличие конечной минимальной энергии

$$\varepsilon_1 \equiv \varepsilon(n=1, k_x = k_y = 0) = (\hbar^2/2m) (\pi/d)^2 \quad (26.4)$$

в соответствии с принципом неопределенности.

Отметим, что дискретному квантовому числу n можно сопоставить разрешенные значения абсолютной величины z -компоненты волнового вектора $|k_z| = (\pi/d)n$. Тогда можно говорить о распределении квантовых состояний в \mathbf{k} -пространстве, которое показано на рис. 37. Видно, что объем \mathbf{k} -пространства, ограниченный замкнутой изоэнергетической поверхностью данной энергии ε , в случае пленки разбивается на ряд сечений, соответствующих фиксированным значениям n .

Теперь определим плотность состояний в квантованной пленке. Суммируя по всем значениям квантовых чисел n, k_x, k_y , можно найти полное число электронных состояний единицы объема с энергией, меньшей ε ,

$$Z(\varepsilon) = \frac{2}{V} \sum_{n, k_x, k_y} \Rightarrow \Rightarrow \frac{2}{(2\pi)^2 d} \sum_n \int dk_x dk_y = \int_0^\varepsilon g_{\text{пл}}(\varepsilon') d\varepsilon', \quad (26.5)$$

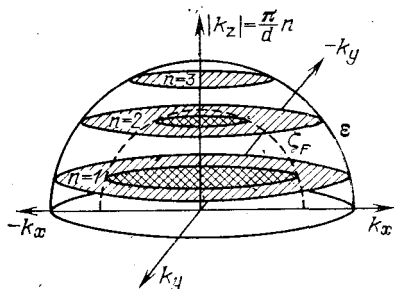


Рис. 37. Распределение электронных состояний в \mathbf{k} -пространстве тонкой пленки. Занятые электронами проводимости состояния заштрихованы дважды. Заштрихованная сфера соответствует граничной энергии Ферми ζ_F

где множитель 2 учитывает спиновое вырождение состояний, $V = L_1 L_2 d$ — объем основной области пленки,

$$g_{\text{пл}}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi d} \sum_n k_{\perp}(\varepsilon, n) \frac{dk_{\perp}(\varepsilon, n)}{d\varepsilon} \quad (26.6)$$

— плотность электронных состояний в квантовой пленке; $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ — величина двумерного волнового вектора; суммирование по n ведется по всем подзонам, дно которых находится ниже энергии ε .

Для параболической зоны, согласно (26.3), $k_{\perp}(\varepsilon, n)$ имеет простой вид

$$k_{\perp}(\varepsilon, n) = (\sqrt{2m/\hbar})(\varepsilon - \varepsilon_1 n^2)^{1/2}. \quad (26.7)$$

Используя это выражение, из (26.6) для плотности состояний в квантованной пленке с параболической зоной получим

$$g_{\text{пл}}(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \left[\sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_1}} \right], \quad (26.8)$$

где $[\sqrt{\varepsilon/\varepsilon_1}]$ — есть целая часть $\sqrt{\varepsilon/\varepsilon_1}$, т. е. число подзон, дно которых находится ниже заданной энергии ε .

Из (26.8) видно, что каждая подзона в плотность состояний дает одинаковый вклад. При фиксированной толщине пленки, плотность состояний $g_{\text{пл}}(\varepsilon)$ от энергии не зависит, пока величина $\sqrt{\varepsilon/\varepsilon_1}$ не изменится на единицу. Поэтому общая зависимость $g_{\text{пл}}(\varepsilon)$ имеет ступенчатый характер, что показано на рис. 38. Скачок плотности состояний происходит всякий раз, когда энергия ε совпадает с дном очередной подзоны, т. е. $\varepsilon = \varepsilon_n = \varepsilon_1 n^2$. При таких значениях энергии плотность состояний в пленке совпадает со значением плотности состояний в массивном образце: $g_{\text{пл}}(\varepsilon_n) = g_{\text{м}}(\varepsilon)$. Это легко проверить, если в (26.8) $[\sqrt{\varepsilon/\varepsilon_1}]$ просто заменить на $\sqrt{\varepsilon/\varepsilon_1}$ и использовать (26.4).

Интересным является поведение плотности состояний в условиях размерного квантования для фиксированной энергии ε при изменении толщины пленки. Чтобы сравнить поведение $g_{\text{пл}}(\varepsilon, d)$ с плотностью состояний в массивном образце $g_{\text{м}}(\varepsilon)$, (26.8) представим в виде

$$g_{\text{пл}}(\varepsilon, d) = g_{\text{м}}(\varepsilon) \left[\sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_1}} \right] / \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_1}}, \quad (26.9)$$

где $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(d)$ — энергия наименьшего пленочного уровня (26.4), а

$$g_{\text{м}}(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2 d} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_1} \right)^{1/2} = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \varepsilon^{1/2} \quad (26.10)$$

— плотность состояний массивного образца (4.12).

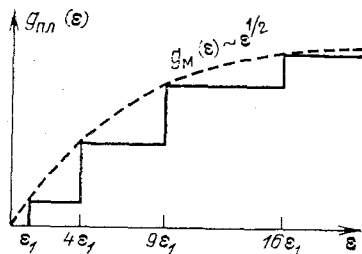
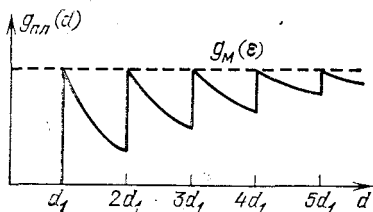


Рис. 38. Зависимость плотности электронных состояний от энергии в квантованной пленке с параболической зоной при фиксированной толщине. Штриховой линией показана $g_{\text{м}}(\varepsilon)$ для массивного образца

Из (26.9) видно, что при толщинах d_n , когда $(\varepsilon/\varepsilon_1)^{1/2}$ равняется целому числу, т. е. когда дно какой-либо подзоны совпадает с заданной энергией ε $g_{пл}(\varepsilon, d_n) = g_M(\varepsilon)$. При других толщинах с ростом d плотность состояний $g_{пл}(d)$ уменьшается как $1/d$ до тех пор, пока не изменится на единицу число подзон, расположенных ниже уровня ε . Эта зависимость $g_{пл}(d)$ приведена на рис. 39.

Характерным является то, что в пленке плотность состояний меньше, чем в массивном образце, и $g_{пл}(d)$ меняется немонотонно. Значения толщины, при которых плотность состояний меняется скачком, определяются из условия $(\varepsilon/\varepsilon_1)^{1/2} = n$ — целое число. Из этого условия находим значения этих толщин



$$d_n = (\pi^2 \hbar^2 / 2m\varepsilon)^{1/2} n = d_1 n, \quad (26.11)$$

Рис. 39. Зависимость плотности состояний от толщины размерно квантованной пленки при заданной энергии $\varepsilon = \text{const}$. Штриховой линией показана плотность состояний массивного образца

где $n = 1, 2, 3, \dots$, $d_1 = \pi \hbar / \sqrt{2m\varepsilon}$ — толщина, при которой дно наинижней зоны совпадает с заданной энергией ε , т. е. d_1 определяется из условия $\varepsilon_1 = \varepsilon$. Отметим, что при толщинах $d < d_1$

состояний нет (см. рис. 39), так как эта область толщин соответствует $\varepsilon_1 > \varepsilon$, т. е. ε попадает в запрещенную область. Из рис. 39 видно, что $g_{пл}(d)$ является периодической функцией толщины. Осцилляции термодинамических и кинетических характеристик пленки в условиях размерного квантования в зависимости от толщины связаны именно с этим поведением плотности состояний. Период осцилляции $g_{пл}(d)$ легко определить из (26.11)

$$\Delta d = d_1 = h / 2\sqrt{2m\varepsilon} = \lambda / 2, \quad (26.12)$$

где $\lambda = h / \sqrt{2m\varepsilon}$ — длина волны де Бройля электронов с энергией ε . Таким образом, период осцилляций плотности состояний по толщине равен половине длины волны де Бройля.

Отметим, что особенности плотности состояний пленки мы проанализировали для прямоугольной ямы с плоским дном и бесконечно высокими стенками и для параболического закона дисперсии. В случае произвольного закона дисперсии и выбора иной модели для аппроксимации потенциала пленки функции $g_{пл}(\varepsilon, d)$, вообще говоря, будет отличаться от приведенной на рис. 38 и 39, однако наличие дискретного квантового числа n приведет к тому, что основная особенность — немонотонный ход — сохранится.

2. Концентрация носителей тока и уровень Ферми. Рассмотрим пленку с одним типом носителей заряда (для определенности электроны) и предположим, что концентрация их $n_{эл}$ задана. В случае простой модели пленки найдем связь уровня Ферми

с концентрацией, исходя из известной формулы

$$n_{\text{эл}} = \int g_{\text{пл}}(\epsilon) f_0(\epsilon) d\epsilon, \quad (26.13)$$

где $g_{\text{пл}}(\epsilon)$ плотность состояний (26.6), $f_0(\epsilon)$ — функция распределения Ферми. Подставляя (26.6) в (26.13) и интегрируя один раз по частям, получим

$$n_{\text{эл}} = (1/2\pi d) \sum_n \int k_{\perp}^2(\epsilon, n) (-\partial f_0/\partial \epsilon) d\epsilon. \quad (26.14)$$

В случае параболического закона дисперсии (26.7), концентрация (26.14) имеет вид

$$n_{\text{эл}} = \frac{1}{\pi d} \frac{m}{\hbar^2} \sum_n \int_{\epsilon_n}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_n) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}\right) d\epsilon, \quad (26.15)$$

где $\epsilon_n = \epsilon_1 n^2$.

Если электронный газ в пленке сильно вырожден ($\zeta_F - \epsilon_1 \gg k_0 T$), то из (26.15) легко получим

$$n_{\text{эл}} = \frac{1}{\pi d} \frac{m}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{n_0} (\zeta_F - \epsilon_n) = \frac{m}{\pi d \hbar^2} \sum_{n=1}^{n_0} (\zeta_F - \epsilon_1 n^2), \quad (26.16)$$

где $n_0 = [(\zeta_F/\epsilon_1)^{1/2}]$ — целая часть числа $(\zeta_F/\epsilon_1)^{1/2}$.

В последнем выражении суммирование по n легко выполняется. В результате имеем

$$n_{\text{эл}} = \frac{m}{\pi d \hbar^2} n_0 \left[\zeta_F - \epsilon_1 \frac{(n_0 + 1)(2n_0 + 1)}{6} \right]. \quad (26.17)$$

Поскольку $n_0 = [(\zeta_F/\epsilon_1)^{1/2}]$, то (26.17) представляет собой общее соотношение между границей Ферми ζ_F и концентрацией $n_{\text{эл}}$ для пленок произвольной толщины.

Заметим, что для толстых пленок $n_0 \gg 1$ (заполнено много подзон) и (26.27) легко переходит в известное выражение (4.13).

Для сверхтонкой пленки, когда заполнена всего одна подзона, $n_0 = 1$ (граница Ферми находится между первым и вторым пленочными уровнями), из (26.17) имеем

$$\zeta_F(d) = \epsilon_1 + (\pi \hbar^2/m) n_{\text{эл}} d. \quad (26.18)$$

Видно, что при $d \rightarrow 0$ уровень Ферми $\zeta_F(d) \rightarrow \epsilon_1$.

В случае средних толщин, т. е. для промежуточных значений n_0 из (26.17) аналитически можно определить значения толщин d_{n_0} , при которых уровень Ферми совпадает с дном подзоны с номером n_0 , а также сравнить $\zeta_F(d_{n_0})$ со значением уровня Ферми для массивного образца $\zeta_F(\infty)$. Допустим, уровень Ферми в пленке совпадает с дном зоны n_0 , тогда $\zeta_F(d_{n_0}) = \epsilon_1 n_0^2$. При таких толщинах $(\zeta_F(d_{n_0})/\epsilon_1)^{1/2}$ — есть целое число. Подставляя это

значение в (26.17) и используя (26.4), для d_{n_0} получим

$$d_{n_0} = d_0 n_0 \left[1 - \frac{(n_0 + 1)(2n_0 + 1)}{6n_0^2} \right]^{1/3}, \quad (26.19)$$

где $d_0 = (\pi/2n_{эл})^{1/3}$, причем в (26.19) n_0 принимает значения $n_0 = 2, 3, 4, \dots$, так как в вырожденном случае уровень Ферми точно может совпадать только с дном подзоны $n_0 = 2$.

Из (26.17) можно найти связь $\zeta_F(d_{n_0}) = \varepsilon_1 n^2$ с уровнем Ферми в массивном случае $\zeta_F(\infty)$ (4.13). Тогда имеем

$$\zeta_F(d_{n_0}) = \zeta_F(\infty) \left[\frac{3}{2} - \frac{(n_0 + 1)(2n_0 + 1)}{4n_0^2} \right]^{-2/3}, \quad n_0 = 2, 3, 4, \dots \quad (26.20)$$

Зависимость уровня Ферми в пленке $\zeta_F(d)$ от толщины приведена на рис. 40. Видно, что при больших толщинах $\zeta_F(d)$ стремится к значению уровня Ферми $\zeta_F(\infty)$ для магнитного образца, а для очень тонких пленок $\zeta_F(d)$ ведет себя как ε_1 и описывается формулой (26.18). В промежуточных толщинах $\zeta_F(d)$ осциллирует. Эти осцилляции почти периодичны с периодом $\Delta d \approx 0,9d_0$. Для наглядности приведем некоторые численные значения, вычисленные на основе формул (26.19) и (26.20):

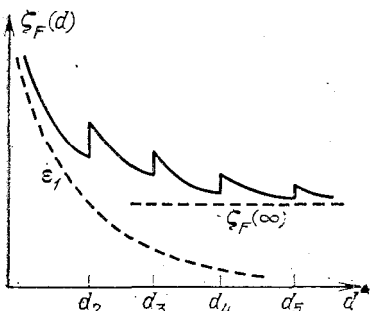


Рис. 40. Зависимость уровня Ферми от толщины размерно квантованной пленки

$d_2 = 1,44d_0$, $\zeta_F(d_2) = 1,48\zeta_F(\infty)$; $d_3 = 2,36d_0$, $\zeta_F(d_3) = 1,24\zeta_F(\infty)$; $d_4 = 3,24d_0$, $\zeta_F(d_4) = 1,17\zeta_F(\infty)$; $d_5 = 4,12d_0$, $\zeta_F(d_5) = 1,12\zeta_F(\infty)$ и т. д.

Рассмотрим теперь невырожденный электронный газ в пленке. В этом случае $f_0(\varepsilon) = \exp((\zeta - \varepsilon)/k_0 T)$

и из (26.15) легко получим

$$\exp\left(\frac{\zeta}{k_0 T}\right) = \frac{2\pi\hbar^2 d}{mk_0 T} \frac{n_{эл}}{\Theta(\nu_1) - 1}, \quad (26.21)$$

где введена функция

$$\Theta(\nu_1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-\nu_1 n^2) \quad (26.22)$$

и обозначено $\nu_1 = \varepsilon_1/\pi k_0 T$.

Чтобы найти явный вид выражения (26.21), можно воспользоваться поведением функции $\Theta(\nu_1)$ при больших и малых значениях аргумента ν_1 .

При больших значениях $\nu_1 \gg 1$ (сверхтонкие пленки) в (26.22) можно ограничиться двумя членами:

$$\Theta(\nu_1) \approx 1 + 2 \exp(-\nu_1), \quad \nu_1 \gg 1. \quad (26.23)$$

Тогда из (26.21) получим

$$\zeta(d) = \varepsilon_1 + k_0 T \ln [\pi \hbar^2 dn_{эл} / mk_0 T]. \quad (26.24)$$

Для нахождения асимптотики $\Theta(v_1)$ при малых значениях аргумента $v_1 \ll 1$ (толстые пленки, квазиклассический случай) можно воспользоваться функциональным соотношением [78]

$$\Theta(v_1) = \frac{1}{\sqrt{v_1}} \Theta\left(\frac{1}{v_1}\right), \quad (26.25)$$

а затем применять асимптотику (26.21), учитывая, что $v^{-1} \gg 1$. В результате имеем

$$\Theta(v_1) \approx v_1^{-1/2} [1 + 2 \exp(-\pi/v_1)], \quad v_1 \ll 1. \quad (26.26)$$

Подставляя это выражение в (26.21), в первом приближении получим известный результат случая массивного образца (4.46), а в следующем приближении можно пойти квантовую поправку за счет размерного квантования.

3. Полуметаллические размерно квантованные пленки. Полуметаллические пленки являются удобными объектами, на которых при низких температурах можно наблюдать и экспериментально исследовать квантовые размерные эффекты. Поэтому мы их рассмотрим здесь отдельно. Кроме того, эти пленки обладают рядом особенностей, которых нет в металлических или полупроводниковых пленках.

Полуметаллическую пленку рассмотрим в рамках простой модели. Допустим, что электроны проводимости и дырки в полуметалле являются независимыми частицами со скалярными эффективными массами m_n и m_p , соответственно. Они движутся в потенциальных ямах с плоским дном и бесконечно высокими стенками (26.1). В условиях размерного квантования зона проводимости и валентная зона разбиваются на подзоны. Если энергию отсчитать от дна зоны проводимости в массивном образце (толщина пленки $d = \infty$), то энергии электронов проводимости и дырок будут иметь вид

$$\varepsilon_n(n, k_{\perp}) = \varepsilon_{1n} n^2 + \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m_n, \quad (26.27)$$

$$\varepsilon_p(n', k'_{\perp}) = \varepsilon_{1p} n'^2 - \hbar^2 k'_{\perp}^2 / 2m_p, \quad (26.28)$$

где

$$\varepsilon_{1n} = (\hbar^2 / 2m_n) (\pi/d)^2, \quad \varepsilon_{1p} = (\hbar^2 / 2m_p) (\pi/d)^2, \quad (26.29)$$

ε_{1n} — перекрытие зон в массивном образце (см. рис. 50), d — толщина пленки, $k_{\perp} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$, n и n' принимают значения 1, 2, 3, ...

Видно, что при размерном квантовании, также как и в квантовом магнитном поле (§ 21 п. 6), дно зоны проводимости поднимается на величину ε_{1n} , а потолок валентной зоны опускается на величину ε_{1p} . Такое смещение краев зон схематически

показано на рис. 41, а. Благодаря этому смещению перекрытие зон зависит от толщины d :

$$\epsilon_{\pi}(d) = \epsilon_{\pi} - (\epsilon_{1n} + \epsilon_{1p}) = \epsilon_{\pi} - (\hbar^2/2m^*) (\pi/d)^2, \quad (26.30)$$

где $m^* = m_n m_p / (m_n + m_p)$ — приведенная масса системы электронов и дырок.

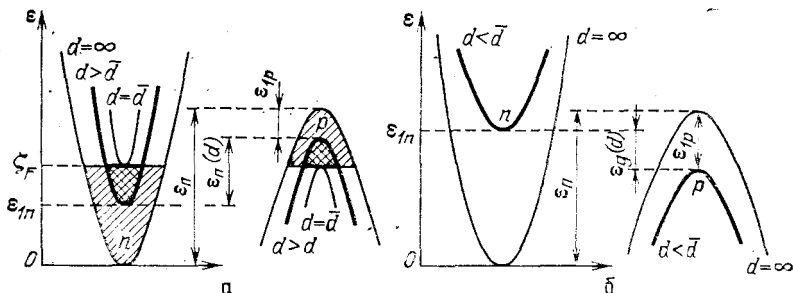


Рис. 41. Смещение краев зон в полуметаллической пленке при размерном квантовании. С толщиной перекрытие зон уменьшается до нуля (при $d = \bar{d}$), а при $d < \bar{d}$ возникает щель $\epsilon_g(d)$ — полуметалл переходит в полупроводник: а) пленка в полуметаллической фазе; б) полупроводниковая фаза

Из (26.30) следует, что с уменьшением толщины $\epsilon_{\pi}(d)$ уменьшается и при некоторой толщине $d = \bar{d}$ перекрытие исчезает совсем, т. е. $\epsilon_{\pi}(\bar{d}) = 0$. Это условие для \bar{d} дает

$$\bar{d} = \pi \hbar / (2m^* \epsilon_{\pi})^{1/2}. \quad (26.31)$$

Дальнейшее уменьшение приводит к тому, что между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны возникает щель — запрещенный участок энергии, по величине равный

$$\epsilon_g(d) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{d} \right)^2 - \epsilon_{\pi} = \epsilon_{\pi} \left(\frac{\bar{d}^2}{d^2} - 1 \right), \quad d < \bar{d}. \quad (26.32)$$

Таким образом, рассматриваемая пленка при $d > \bar{d}$ находится в полуметаллическом состоянии, а при $d < \bar{d}$ она ведет себя как полупроводник. Переход полуметалл — полупроводник имеет место при толщине $d = \bar{d}$. Положения краев зон в обоих фазах показаны на рис. 41.

Эти области толщин рассмотрим в отдельности. При низких температурах (для простоты будем считать, что $T = 0$) электронный и дырочный газы в пленках с толщиной $d > \bar{d}$ вырождены. Тогда для концентрации электронов проводимости в пленке толщиной d можно использовать формулу (26.16), которую перепишем в виде

$$n_{эл}(d) = \frac{\pi}{2d^3} \sum_{n=1}^{n_0} \left(\frac{\zeta_F}{\epsilon_{1n}} - n^2 \right), \quad d \geq \bar{d}, \quad (26.33)$$

где $n_0 = [(\zeta_F/\epsilon_{1n})^{1/2}]$.

Аналогично для концентрации дырок $p(d)$ имеем

$$p(d) = \frac{\pi}{2d^3} \sum_{n'=1}^{n_0'} \left(\frac{\varepsilon_{\pi} - \zeta_F}{\varepsilon_{1p}} - n'^2 \right), \quad d \geq \bar{d}, \quad (26.34)$$

где $n_0' = [V(\varepsilon_{\pi} - \zeta_F)/\varepsilon_{1p}]$.

Из условия нейтральности $n_{эл}(d) = p(d)$, последние два выражения дают $\zeta_F(d)/\varepsilon_{1n} = (\varepsilon_{\pi} - \zeta_F(d))/\varepsilon_{1p}$, т. е. $n_0 = n_0'$. Отсюда легко получим выражение

$$\zeta_F(d) = (m_p/(m_n + m_p))\varepsilon_{\pi}, \quad d \geq \bar{d}, \quad (26.35)$$

что совпадает с (5.29).

Отсюда следует, что уровень Ферми не зависит от толщины пленки. Следовательно, картина движения подзон при изменении толщины состоит в следующем: уровень Ферми ζ_F , отсчитанный от дна зоны проводимости, в массивном образце при уменьшении d стоит на месте, а электронные и дырочные подзоны, двигаясь вверх и вниз, соответственно, пересекают этот уровень, причем при одной и той же толщине уровень Ферми пересекает электронные и дырочные подзоны с одним и тем же номером ($n_0 = n_0'$). Уровень Ферми (26.35) остается постоянным, однако концентрация электронов и дырок с уменьшением толщины падает. Используя (26.35), из (26.33) для концентрации носителей тока в полуметаллической фазе пленки с толщиной d получим выражение

$$n_{эл}(d) = p(d) = (\pi/12d^3) n_0 [6(d/\bar{d})^2 - (n_0 + 1)(2n_0 + 1)], \quad d \geq \bar{d}, \quad (26.36)$$

где $n_0 = [d/\bar{d}]$ — целая часть числа d/\bar{d} .

Формулу (26.36) легко можно представить в виде

$$\frac{n_{эл}(d)}{n_{эл}(\infty)} = \frac{\pi}{4} \left(\frac{\bar{d}}{d} \right)^3 n_0 \left[6 \left(\frac{d}{\bar{d}} \right)^2 - (n_0 + 1)(2n_0 + 1) \right], \quad d \geq \bar{d}, \quad (26.37)$$

где $n_{эл}(\infty)$ — концентрация электронов проводимости в массивном полуметалле при $T = 0$ (5.30).

Из последних формул видно, что когда толщина $d = \bar{d}$, т. е. $n_0 = 1$, концентрация носителей $n_{эл}(\bar{d}) = p(\bar{d}) = 0$. Однако следует отметить, что такое стремление концентраций к нулю с уменьшением толщины немонотонно, так как n_0 принимает только целые значения. При толщинах, когда отношение d/\bar{d} принимает целые значения, $n_{эл}(d)$ меняется скачком.

Теперь рассмотрим пленку в полупроводниковой фазе $d < \bar{d}$ (рис. 41). При толщинах $d < \bar{d}$ полуметалл ведет себя как собственный полупроводник с шириной запрещенной зоны (26.32). В этом случае концентрация носителей тока отлична от нуля только при конечных температурах ($T \neq 0$) и определяется

формулой (26.21). Для концентрации электронов проводимости получим

$$n_{эл}(d) = \frac{m_n k_0 T}{2\pi \hbar^2 d} [\Theta(v_{1n}) - 1] \exp\left(\frac{\zeta}{k_0 T}\right), \quad d < \bar{d}, \quad (26.38)$$

где $v_{1n} = \varepsilon_{1n}/\pi k_0 T$.

Такое же выражение имеем для концентрации дырок $p(d)$, если в (26.38) заменить $m_n \rightarrow m_p$, $v_{1n} \rightarrow v_{1p}$ и $\zeta \rightarrow \zeta_p = \varepsilon_n - \zeta$. Тогда, используя условие нейтральности $n_{эл}(d) = p(d)$, для химического потенциала получим

$$\zeta(d) = \varepsilon_n/2 + \frac{k_0 T}{2} \ln \left[\frac{m_p}{m_n} \frac{\Theta(v_{1p}) - 1}{\Theta(v_{1n}) - 1} \right], \quad d < \bar{d}. \quad (26.39)$$

Подставляя (26.39) в (26.38), для концентрации носителей тока в пленках в полупроводниковой фазе получим выражение

$$n_{эл}d = p(d) = \frac{k_0 T \sqrt{m_n m_p}}{2\pi \hbar^2 d} [\Theta(v_{1n}) - 1]^{1/2} [\Theta(v_{1p}) - 1]^{1/2} \times \\ \times \exp(\varepsilon_n/2k_0 T), \quad d < \bar{d}. \quad (26.40)$$

При низких температурах, когда $v_{1n} = \varepsilon_{1n}/\pi k_0 T \gg 1$ и $v_{1p} = \varepsilon_{1p}/\pi k_0 T \gg 1$, согласно (26.23), последние два выражения принимают простой вид

$$\zeta(d) = \varepsilon_{1n} - \varepsilon_g(d)/2 + (k_0 T/2) \ln(m_p/m_n), \quad d < \bar{d}, \quad (26.41)$$

$$n_{эл}(d) = p(d) = \frac{k_0 T \sqrt{m_n m_p}}{\pi \hbar^2 d} \exp\left(-\frac{\varepsilon_g(d)}{2k_0 T}\right), \quad d < \bar{d}, \quad (26.42)$$

где $\varepsilon_g(d)$ — ширина запрещенной зоны (26.32).

Гальваномагнитные явления в полуметаллических пленках в условиях размерного квантования теоретически исследованы в работе [8]. На этих результатах мы останавливаться здесь не будем.

4. Условия реализации квантового размерного эффекта. Для экспериментального обнаружения размерного квантования условия эксперимента и материал пленки должны удовлетворять определенным требованиям. Эти требования проанализированы и обсуждены в работах [7, 62].

Прежде всего отметим, что спектр носителей в пленке, как видно из рис. 36, состоит из пересекающихся подзон. Когда носители тока занимают большое количество этих пересекающихся подзон, квантование спектра не должно играть существенную роль. Размерное квантование может проявляться только в том случае, когда средняя энергия электрона проводимости ε должна быть порядка характерной энергии квантования ε_1 , т. е. носители должны занимать небольшое количество подзон. Таким образом, необходимым условием проявления квантового размер-

ного эффекта является

$$\bar{\varepsilon} \approx \varepsilon_1, \text{ или } d \approx \pi \hbar / \sqrt{2m\bar{\varepsilon}} \approx \lambda, \quad (26.43)$$

где для вырожденного электронного газа $\bar{\varepsilon}$ порядка граничной энергии Ферми ζ_F , а для невырожденного $\bar{\varepsilon} \approx k_0 T$, m — эффективная масса носителей. Следовательно, для проявления размерного квантования толщина пленки d должна быть порядка длины дебройлевской волны носителей λ . Из (26.43) видно, что для проявления размерного квантования при реальных толщинах требуется малая эффективная масса, небольшое заполнение спектра или низкие температуры. Для металлов $\bar{\varepsilon} \approx 5$ эВ, $m \approx m_0$ — масса свободного электрона и из (26.43) имеем $d \approx 10^{-8}$ см. Эта толщина нереальна. Реальная толщина получается для полупроводниковых или полуметаллических пленок. Например, в висмуте $m \approx 10^{-2} m_0$, $\bar{\varepsilon} \approx 10^{-2}$ эВ, что соответствует $d \approx 10^{-5}$ см.

Второе условие налагает ограничение на процесс рассеяния носителей тока. Из-за рассеяния квазидискретный спектр носителей в пленке частично размывается на величину \hbar/τ , где τ — время релаксации. Для того чтобы дискретность спектра сохранилась, необходимо выполнение условия

$$\hbar/\tau \ll \varepsilon(n+1) - \varepsilon(n), \quad \hbar/\tau \ll (2n+1)\varepsilon_1. \quad (26.44)$$

Это условие существования квазидискретного спектра в пленке является наиболее жестким, которое выполняется только в достаточно совершенных и чистых пленках, где носители имеют большую длину свободного пробега. Для выполнения условия (26.44) требуются сравнительно высокие подвижности носителей тока, удовлетворяющие (при небольших n) условию

$$u \gg ed^2/\hbar\pi, \quad (26.45)$$

например, при толщине $d \approx 10^{-5}$ см, подвижность u должна быть больше 10^3 см²/В · с.

Кроме вышеуказанных двух условий следует отметить, что для наблюдения квантового размерного эффекта пленка должна быть достаточно однородна по толщине так, чтобы изменение положения размерных уровней в разных ее частях вследствие случайного разброса толщины было существенно меньше расстояния между ними. Легко показать, что для этого относительный разброс толщины должен удовлетворять условию

$$|\Delta d|/d \ll (2n+1)/2n^2, \quad (26.46)$$

где n — номер подзоны. При относительно больших n , как видно из (26.46), разброс толщины $|\Delta d|$ должен быть меньше d/n , чтобы пленочные подзоны различных участков не перекрывались.

Однородность пленки по толщине необходима и для того, чтобы рассеяние носителей от поверхности было зеркальным, когда проекция квазиимпульса $\hbar|k_z|$ при отражении от поверхности

не меняется. Для этого, как известно, размер неоднородности $|\Delta d|$ должен быть менее дебройлевской длины волны носителей тока.

Для наблюдения квантовых размерных осцилляционных эффектов, носители тока в пленке должны быть вырожденными $k_0 T \ll \xi_F$, кроме того требуется, чтобы размытие фермиевского распределения (граница Ферми) было намного меньше, чем расстояние между соседними подзонами, т. е.

$$k_0 T \ll (2n + 1) \varepsilon_1 < \xi_F. \quad (26.47)$$

Последнее неравенство в (26.47) необходимо для того, чтобы под уровнем Ферми находилось хотя бы несколько пленочных подзон. Только в этом случае возможно наблюдать осцилляционные квантово-размерные эффекты.

Таким образом, для реализации квантовых размерных эффектов нужны проводники с малой эффективной массой носителей, малым заполнением (уровнем Ферми), большой подвижностью, зеркальным поверхностным рассеянием (однородные по толщине пленки), а эксперименты необходимо проводить при низких температурах (26.47). Этим требованиям достаточно хорошо удовлетворяют полуметаллические пленки. Примером могут служить пленки висмута, на которых впервые были наблюдаены квантовые размерные эффекты [109]. Полуметаллические пленки замечательны еще и тем, что в них носители находятся в вырожденном состоянии без легирования, и степень вырождения в них можно управлять, изменяя толщину. С уменьшением толщины пленки можно от вырожденного состояния перейти к невырожденному полупроводниковому состоянию с шириной запрещенной зоны (26.32).

5. Термо-э. д. с. квантованной пленки в сильном магнитном поле. Размерное квантование, как было отмечено выше, влияет на многие электронные свойства пленки. Электрические свойства в магнитном поле в условиях размерного квантования в полупроводниковых пленках рассмотрены в [79], а в полуметаллических пленках исследованы Сандомирским [61]. Мы здесь рассмотрим одну простую задачу. Допустим, что размерно квантованная пленка с одним типом носителей (электроны проводимости) помещена в магнитное поле, направленное по ее нормали и это поле является в классическом смысле сильным, но неквантующим: $\Omega \tau \gg 1$, $\hbar \Omega \ll \varepsilon$, где τ — время релаксации, $\Omega = eH/mc$ — циклотронная частота, ε — средняя энергия электрона проводимости. Температурный градиент находится в плоскости пленки. Вычислим термо-э. д. с. при таких условиях. Эта задача при наличии квантующего магнитного поля была решена в работе [71].

Простота рассматриваемой задачи заключается в том, что в нашем случае термо-э. д. с. не зависит от механизма рассеяния электронов проводимости, т. е. определяется только спектром и

дается формулой (23.42). Недиагональная компонента, входящая в эту формулу тензора электропроводности $\sigma_{12} = ecn_{эл}/H$, определяется только концентрацией $n_{эл}$. Что касается β_{12} , то его явный вид в условиях размерного квантования можно найти, если применять статистический принцип соответствия (23.16) или (23.21) к формуле (23.12). При этом надо учесть, что в нашем случае плотность состояний имеет вид (26.6). В результате для β_{12} в размерно квантованной пленке при наличии поперечного классически сильного магнитного поля получим следующее выражение

$$\beta_{12} = -\frac{c}{2\pi HTd} \sum_n \int_{\epsilon_n} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) (\epsilon - \zeta) k_{\perp}^2(\epsilon, n) d\epsilon. \quad (26.48)$$

Тогда, в силу (23.42), термо-э. д. с. в сильном магнитном поле в размерно квантованных пленках имеет вид

$$\alpha_{пл} = -\frac{k_0}{e} \frac{1}{k_0 T n_{эл}} \frac{1}{2\pi d} \sum_n \int_{\epsilon_n} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) (\epsilon - \zeta) k_{\perp}^2(\epsilon, n) d\epsilon. \quad (26.49)$$

Отметим, что такое же выражение для термо-э. д. с. в поперечном сильном магнитном поле, очевидно, можно получить и из решения кинетического уравнения, так как оно применимо при рассмотрении движения системы носителей в плоскости пленки. В этой плоскости спектр энергии квазинепрерывен.

Для пленок с сильно вырожденным электронным газом из (26.49), в силу (4.25), легко получим

$$\alpha_{пл} = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_0}{e} \frac{k_0 T}{n_{эл}} g_{пл}(\zeta_F), \quad (26.50)$$

где $g_{пл}(\zeta_F)$ — плотность состояний на границе Ферми (26.6). Отметим, что формула (26.29) применима для любой изотропной зоны.

Из (26.50) следует, что термо-э. д. с. в сильном поперечном магнитном поле должна повторять все особенности плотности состояний в пленке на поверхности Ферми, т. е. $\alpha_{пл}$ в зависимости от толщины должна осциллировать, приблизительно, с периодом (26.12), а также иметь скачок при толщинах d_{n_0} (26.19).

Используя (15.75) и (26.50) легко можно найти отношение

$$\alpha_{пл}(d)/\alpha(\infty) = (\pi/3n_{эл}d^3)^{1/3} n_0, \quad (26.51)$$

где $\alpha(\infty)$ — термо-э. д. с. в классически сильном магнитном поле в массивном полупроводнике (15.75).

Формула (26.51) ясно показывает осцилляционный характер термо-э. д. с. Действительно, при заданном значении n_0 (когда уровень Ферми совпадает с одним пленочным уровнем) с уменьшением толщины термо-э. д. с. возрастает. Однако при уменьшении d расстояние между соседними пленочными уровнями увеличивается, и, когда очередной уровень пересекает границу Ферми,

n_0 становится на единицу меньше, а термо-э. д. с. $\alpha_{пл}$ резко уменьшается. Дальнейшее уменьшение d опять приводит к возрастанию $\alpha_{пл}(d)$ до тех пор, пока следующий уровень не пересекает границу Ферми и n_0 не станет еще на одну единицу меньше. Этот процесс будет повторяться с уменьшением d , пока ниже ζ_F останется всего один пленочный уровень. Таким образом, с уменьшением толщины d термо-э. д. с. вырожденной пленки изменится не монотонно, а пилообразно. Максимум термо-э. д. с. получается при толщине, когда один пленочный уровень совпадает с границей Ферми, т. е. при толщинах (26.19).

Формулу (26.51) удобно представить в виде

$$\frac{\alpha_{пл}(d)}{\alpha(\infty)} = \left(\frac{2}{3}\right)^{1/3} \frac{d_0 n_0}{d}. \quad (26.52)$$

Используя (26.19) можно найти термо-э. д. с. при толщинах $d = d_{n_0}$, когда уровень Ферми пересекается с пленочным уровнем n_0 :

$$\frac{\alpha_{пл}(d_{n_0})}{\alpha(\infty)} = \left[\frac{3}{2} - \frac{(n_0 + 1)(2n_0 + 1)}{4n_0^2} \right]^{-1/3}. \quad (26.53)$$

При $n_0 = 2$ последнее выражение дает $\alpha_{пл}(d_2) = 1,22\alpha(\infty)$, а при больших n_0 термо-э. д. с. пленки совпадает с термо-э. д. с. массивного образца $\alpha_{пл} = \alpha(\infty)$. Таким образом, в тонких пленках ($n_0 = 2$) термо-э. д. с. может на 20% быть больше, чем в массивном образце.

В случае невырожденных пленок из (26.49) для термо-э. д. с. получим выражение

$$\alpha_{пл}(d) = -\frac{k_0}{e} \left\{ 2 - \zeta^* - v_1 \frac{\partial}{\partial v_1} \ln [\Theta(v_1) - 1] \right\}, \quad (26.54)$$

где $\zeta^* = \zeta/k_0 T$ дается формулой (26.21), $\Theta(v_1)$ — функция определена в (26.22).

Приведем выражение для термо-э. д. с. в двух предельных случаях $v_1 \gg 1$ и $v_1 \ll 1$. Первый из них соответствует сверхтонкой пленке. В этом случае, используя (26.23), получим

$$\alpha_{пл}(\alpha)|_{v_1 \gg 1} = \alpha(\infty) + \frac{1}{2} \frac{k_0}{e} (1 - \ln 4v_1), \quad (26.55)$$

где $\alpha(\infty)$ — термо-э. д. с. невырожденного массивного полупроводника в сильном магнитном поле (15.74).

Из (26.55) видно, что при переходе к сверхтонким пленкам термо-э. д. с. может существенно измениться. Однако следует отметить, что модель потенциала пленки, выбранная в виде прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками (26.1), хотя и является грубой аппроксимацией, но учитывает наиболее характерные особенности электронных состояний в пленке. Поэтому результаты, полученные при малых значениях

пленочного квантового числа n , т. е. $\nu_1 \gg 1$, носят качественный характер.

В другом предельном случае, $\nu_1 \ll 1$, когда в интервале $k_0 T$ находится много пленочных уровней, для нахождения асимптотики можно воспользоваться функциональным соотношением (26.25) и разложением (26.23).

Тогда из (26.54) для термо-э. д. с. имеем

$$\alpha_{\text{пл}}(d) |_{\nu_1 \ll 1} = \alpha(\infty) + \frac{1}{2} \frac{k_0}{e} \sqrt{\nu_1}. \quad (26.56)$$

Из (26.56) и (26.55) следует, что термо-э. д. с. невырожденной пленки с уменьшением толщины вначале уменьшается (так как $\alpha(\infty) < 0$), а затем при толщинах, для которых $\nu_1 \gg 1$, возрастает и при $\ln 4\nu_1 > 1$ становится больше, чем для массивного образца. Таким образом, в области размерного квантования термо-э. д. с. с уменьшением толщины изменяется немонотонно, что можно обнаружить на эксперименте.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

К главе 1

1. *Займан Дж.* Электроны и фононы.— М.: ИЛ, 1962.
2. *Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г.* Физика полупроводников.— М.: Наука, 1977.
3. *Смит Р.* Полупроводники.— М.: Мир, 1982.
4. *Аксельм А. И.* Введение в теорию полупроводников.— М.: Наука, 1978.
5. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела.— М.: Наука, 1978.
6. *Стильбанс Л. С.* Физика полупроводников.— М.: Советское радио, 1967.
7. *Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И.* Электронная теория металлов.— М.: Наука, 1971.
8. *Блейкмор Дж.* Физика твердого состояния.— М.: Изд-во Metallургия, 1972.
9. *Блатт Ф.* Физика электронной проводимости в твердых телах.— М.: Мир, 1971.
10. *Киттель Ч.* Квантовая теория твердых тел.— М.: Наука, 1967.
11. *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела.— М.: Мир, 1974.
12. *Харрисон У.* Теория твердого тела.— М.: Мир, 1972.
13. *Левин А. А.* Введение в квантовую химию твердого тела.— М.: Химия, 1974.
14. *Шифф Л.* Квантовая механика.— М.: ИЛ, 1957.
15. *Каллуэй Дж.* Теория энергетической зонной структуры.— М.: Мир, 1969.
16. *Джонс Г.* Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах.— М.: Мир, 1968.
17. *Цидильковский И. М.* Электроны и дырки в полупроводниках.— М.: Наука, 1972.
18. *Shockley W.*— Phys. Rev., 1950, v. 78, p. 173.
19. *Dresselhaus G., Kip A. F. and Kittel C.*— Phys. Rev. 1955, v. 98, p. 368.
20. *Kane E. O.*— J. Phys. Chem. Solids, 1957, v. 1, p. 249.
21. *Kane E. O.* Semiconductors and Semimetals, Ed. by Willarson R. K. and Beer C., Academic Press, New York-London, 1966, v. 1, p. 75.
22. *Pollak F. H., Cardona M. J.*— J. Phys. Chem. Solids, 1966, v. 27, p. 423.
23. *Cardona M. J., Pollak F. H.*— Phys. Rev., 1966, v. 142, p. 530.
24. *Groves S. H., Paul W.*— Phys. Rev. Lett., 1963, v. 11, p. 194, In: Proc. Inter. Conf. on Phys. of Semicond.— Paris, 1964, p. 41.
25. *Гроувс С. Г., Пиджик К. Р., Эвальд А. У., Вагнер Р. Дж.*— Труды IX Международной конференции по физике полупроводников.— Л.: Наука, 1969, т. 1, с. 46.
26. *Herman F.*— J. Electronics, 1955, v. 1, p. 103.
27. *Herman F.*— Phys. Chem. Solids, 1959, v. 8, p. 380.
28. *Callaway J.*— J. Electronics, 1957, v. 2, p. 330.
29. *Löwdin P.*— J. Chem. Phys., 1951, v. 19, p. 1396.
30. *Zawadzki W.*— Advances in Physics, 1974, v. 23, p. 435.
31. *Берченко Н. Н., Пашковский М. В.*— УФН, 1976, т. 119, с. 223.
32. *Гельмонт Б. Л., Иванов-Ожский В. М., Цидильковский И. М.*— УФН, 1976, т. 120, с. 337.

33. Равич Ю. И., Ефимова Б. А., Смирнов И. А. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS.— М.: Наука, 1968.
34. Cohen M. N.— Phys. Rev., 1961, v. 121, p. 387.
35. Nikolic P. M.— Brit. J. Appl. Phys., 1965, v. 16, p. 1075.
36. Dimmock J. O., Nelngailis I., Strauss A. J.— Phys. Rev. Letts, 1966, v. 16, p. 1193.
37. Martinz G.— Phys. Rev., 1973, v. B8, p. 4678.
38. Esaki L., Stiles P. J.— Phys. Rev. Letts, 1966, v. 16, p. 1108.
39. Allgaier R. S., Houston B. B.— In: Proc. Intern. Conf. on Phys. of Semicond.— Exeter, 1962. p. 172; J. Appl. Phys., 1966, v. 37, p. 302.
40. Айрапетянц С. В., Виноградова М. Н., Дубровская И. Н., Коломоец Н. В., Рудник И. М.— ФТТ, 1966, т. 8, с. 1334.
41. Коломоец Н. В., Виноградова М. Н., Лев Е. Я., Сысоева Л. М.— ФТТ, 1966, т. 8, с. 2925.
42. Андреев А. А.— ФТТ, 1966, т. 8, с. 2818; Андреев А. А., Радионов В. Н.— ФТП, 1967, т. 1, с. 183.
43. Саакян В. А., Девяtkова Е. Д., Смирнов И. А.— ФТТ, 1965, т. 7, с. 3136.
44. Виноградова М. Н., Тамарченко В. И., Прокофьева Л. В.— ФТП, 1975, т. 9, с. 483.
45. Волков Б. А., Кучеренко И. В., Тактакашвили М. С., Шотов А. П.— ФТП, 1974, т. 8, с. 2346; ФТП, 1974, т. 8, с. 446.

К главе 2

1. Zawadzki W., Kowalczyk R., Kolodziejczak J.— Phys. Stat. Sol., 1965, v. 10, p. 513.
2. Аскеров Б. М. Кинетические эффекты в полупроводниках.— Л.: Наука, 1970.
3. Грязнов О. С. Таблицы для расчета кинетических коэффициентов в полупроводниках.— Л.: Наука, 1971.
4. Блекмор Дж. Статистика электронов в полупроводниках.— М.: Мир, 1964.
5. Kolodziejczak J.— Acta Phys. Polon., 1961, v. 20, p. 289.
6. Zawadzki W.— Advances in Physics, 1974, v. 23, p. 435.
7. Kolodziejczak J., Zukotynski S., Stramska H.— Phys. Stat. Sol., 1966, v. 14, p. 471; 1966, v. 16, p. K55.
8. Цидильковский И. М. Электроны и дырки в полупроводниках.— М.: Наука, 1972.
9. Galanzka R. R., Sosnowski L.— Phys. Stat. Sol., 1967, v. 20, p. 113.
10. Bush G., Kern T.— Sol. State Phys., 1960, v. 11, p. 1.
11. Dziuba Z., Zakrzewski T.— Phys. Stat. Sol., 1964, v. 7, p. 1019.
12. Иванов-Омский В. И., Коломоец Б. Т., Огородников В. К., Смекалова К. П.— ФТП, 1970, т. 4, с. 264.
13. Verie C.— Phys. Stat. Sol., 1966, v. 17, p. 889.
14. Келдыш Л. В., Прошко Г. П.— ФТТ, 1963, т. 5, с. 3378.
15. Kane E. O.— Phys. Rev., 1963, v. 131, p. 79; 1963, v. 131, p. 1532.
16. Бонч-Бруевич В. Л.— ФТТ 1959, т. 2, с. 177; ФТТ, 1961, т. 3, с. 768.
17. Шкловский Б. Н., Эфрос А. Л.— ЖЭТФ, т. 58, с. 657; ФТП, 1970, т. 4, с. 305.
18. Бонч-Бруевич В. Л.— ФТТ, 1962, т. 4, с. 2660; ФТТ, 1963, т. 5, с. 1852.
19. Бонч-Бруевич В. Л.— В сб.: Итоги науки. Физика твердого тела. М.: Наука, 1965; Semiconductors and Semimetals, v. 1, New-York-London, 1966.
20. Landsberg P. T.— Proc. Phys. Soc., 1952, v. A65, p. 604; 1953, v. A 66, p. 662.
21. Spence E. Electronic Semiconductors, New York, 1958, p. 393.
22. Самойлович А. Г.— Доповиди АН УРСР, 1954, № 3, с. 174.
23. Самойлович А. Г., Каренблит Л. Л.— УФН, 1955, т. 57, с. 577.
24. Ehrenburg W.— Proc. Phys. Soc., 1950, v. A 63, p. 75.
25. Blakemore J. S.— Proc. Phys. Soc., 1952, v. A 65, p. 460.
26. Данлэн У. Введение в физику полупроводников.— М.: ИЛ, 1959.

27. Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. Н.— ЖЭТФ, 1972, т. 62, с. 713.
28. Manger A., Otmezguine S., Verie C., Friedel J.— In: Proc. of 12th Intern. Conf. on Phys. of Semicond.— Stuttgart, 1974, p. 1166.
29. Manger A., Friedel J.— Phys. Rev., 1975, v. 12, p. 2412.
30. Мехтуев М. А.— Изв. АН АзССР, сер. физ.-мат. наук, 1975, № 4, с. 412.
31. Гельмонт Б. Л.— ФТП, 1975, т. 9, с. 1912.
32. Bastard G., Guldner J., Mycielski A., Nozieres P., Rigaux C.— In: Proc. of 12th Intern. Conf. on Phys. of Semiconductors.— Stuttgart, 1974, p. 1162.
33. Kohn W.— Solid State Physics, v. 5, New York, 1957.
34. Gelmont B. L., Dyakonov M. I., Ivanov-Omskii V. I., Kolomiets B. T., Ogorodnikov V. K., Smekalova K. P.— In: Proc. of 11th Intern. Conf. on Phys. of Semicond.— Warszawa, 1972, v. 2, p. 931.
35. Гельмонт Б. Л., Иванов-Омский В. И., Цидильковский И. М.— УФН, 1976, т. 120, с. 337.
36. Брандт Н. Б., Белоусова О. Н., Бовина Л. А., Стафеев В. И., Пономарев Я. Г.— ЖЭТФ, 1974, т. 66, с. 330.
37. Ohtsuki O., Veda R., Shinohara K., Veda Y., Narita S.— Japan J. Appl. Phys., 1971, v. 10, p. 1476.

К главе 3

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.— М.: Наука, 1982.
2. Jan J.— Solid State Phys., 1957, v. 5, p. 1.
3. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников.— 2-е изд.— М.: Наука, 1978.
4. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел.— М.: ИЛ, 1956.
5. Бонч-Бруевич В. Л., Калашиников С. Г. Физика полупроводников.— М.: Наука, 1977.
6. Аскеров Б. М. Кинетические эффекты в полупроводниках.— Л.: Наука, 1970.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика.— М.: Наука, 1974.
8. Шифф Л. Квантовая механика.— М.: ИЛ, 1957.
9. Займан Дж. Принципы теории твердого тела.— М.: Мир, 1974.
10. Бларт Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах.— М.: Мир, 1971.
11. Зеегер К. Физика полупроводников.— М.: Мир, 1977.
12. Конузэл Э. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях.— М.: Мир, 1970.
13. Давыдов Б. Н., Шмушкевич И. М.— УФН, 1940, т. 24, с. 21; ЖЭТФ, 1940, т. 10, с. 1043.
14. Seitz F.— Phys. Rev., 1948, v. 73, p. 549.
15. Radcliffe J. M.— Proc. Phys. Soc. London, 1955, v. A 68, p. 675.
16. Shockley W., Bardeen J.— Phys. Rev., 1950, v. 77, p. 407.
17. Howarth D. J., Sondheimer E. H.— Proc. Roy. Soc., 1953, v. A 219, p. 53.
18. Ehrenrich H. J.— Phys. Chem. Solids, 1957, v. 2, p. 131.
19. Conwell E. M., Weisskopf V. F.— Phys. Rev., 1950, v. 77, p. 388.
20. Brooks H.— Phys. Rev., 1951, v. 83 A, p. 879;
Brooks H.— Advances in Electronics and Electron Phys., 1955, v. 7, p. 87;
Mansfield R.— Proc. Phys. Soc., 1956, v. B 69, p. 79.
21. Erginsoy C.— Phys. Rev., 1950, v. 79, p. 1013.
22. Askerov B. M., Gashimzade F. M.— Phys. Stat. Sol., 1965, v. 10, p. 621.
23. Гринберг А. А.— ФТП, 1978, т. 12, с. 657.
24. Ансельм А. И., Аскеров Б. М.— ФТТ, 1961, т. 3, с. 3672.
25. Bloch F.— Z. Physik; 1928, Bd. 52, S. 555; 1930, Bd. 59, S. 208.
26. Bardeen J., Shockley W.— Phys. Rev., 1950, v. 80, p. 72; 1950, v. 77, p. 407.
27. Radcliffe J. M.— Proc. Phys. Soc. London, 1955, v. A 68, p. 675.
28. Бир Г. А., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках.— М.: Наука 1972.
29. Meijer H. J. G., Polder D.— Physica, 1953, v. 19, p. 255.

30. Ehrenreich H.—J. Phys. Chem. Solids, 1959, v. 9, p. 129.
31. Алиев Т. А., Гашимзаде Ф. М.—Изв. АН АзССР: Сер. физ.-мат. и техн. наук, 1970, № 4, с. 98.
32. Zawadzki W. and Szymanska W.—Phys. Stat. Sol. (b), 1971, v. 45, p. 415.
33. Rode D. L.—Phys. Rev., 1970, v. B 2, p. 1021. 1971, v. 3, p. 3287.
34. Равич Ю. И., Морговский Л. Я.—ФТП, 1969, т. 3, с. 1528.
35. Szymanska W., Boguslawski P. and Zawadzki W.—Phys. Stat. Sol. (b), 1974, v. 65, p. 641.
36. Szymanska W. and Dielt T.—J. Phys. Chem. Solids, 1978, v. 39, p. 1025.
37. Zawadzki W.—Advances in Physics, 1974, v. 23, p. 435.
38. Vassel M. O., Ganguly A. K. and Conwell E. M.—Phys. Rev., 1970, v. B2, p. 948.
39. Boguslawski P.—Phys. Stat. Sol. (b), 1975, v. 70, p. 53.
40. Гаитмакер В. Ф., Левинсон И. Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках.—М.: Наука, 1984.

К главе 4

1. Писаренко Н. Л.—Изв. АН СССР: Сер. физ., 1941, № 5, с. 417.
2. Давыдов Б. И., Шмушкевич И. М.—УФН, 1940, т. 24, с. 21.
3. Wright R.—Proc. Phys. Soc., 1951, v. A64, p. 984.
4. Madelung O.—Zs. Naturforsch, 1954, Bd. 9a, S. 667.
5. Образцов Ю. Н.—ЖТФ, 1955, т. 25, с. 995.
6. Manfield R.—Proc. Phys. Soc., 1957, v. B70, p. 240.
7. Басс Ф. Г., Цидильковский И. М.—ЖТФ, 1954, т. 24, с. 1834.
8. Ансельм А. И.—ЖТФ, 1952, т. 22, с. 1146.
9. Басс Ф. Г., Цидильковский И. М.—ЖЭТФ, 1955, т. 28, с. 312; 1956, т. 31, с. 672.
10. Sondheimer E.—Proc. Roy. Soc., 1948, v. A 193, p. 484.
11. Аскеров Б. М.—ФТТ, 1966, т. 3, с. 3595, 3667.
12. Ансельм А. И., Клячкин В. И.—ЖЭТФ, 1952, т. 22, с. 297.
13. Kolodziejczak J.—Acta Phys. Polon., 1962, v. 21, p. 637.
14. Zawadzki W.—Phys. Stat. Sol., 1963, v. 3, p. p. 692, 1421; 1964, v. 6, p. 419.
15. Askerov B. M., Gashimzade F. M.—Phys. Stat. Sol., 1967, v. 21, p. K155.
16. Аскеров Б. М. Кинетические эффекты в полупроводниках.—Л.: Наука, 1970.
17. Kolodziejczak J., Sosnovski L.—Acta Phys. Polon., 1962, v. 21, p. 399.
18. Андреев А. А.—ФТТ, 1966, т. 8, с. 2818; Андреев А. А., Радионов В. Н.—ФТП, 1967, т. 1, с. 183.
19. Айрапетянц С. В., Виноградов М. Н., Дубровская И. Н., Коломоец Н. В., Руднак И. М.—ФТТ, 1966, т. 8, с. 1334.
20. Алиев С. А., Коренблит Л. Л., Шалыт С. С.—ФТТ, 1966, т. 8, с. 705.
21. Муждаба В. М., Шалыт С. С.—ФТТ, 1966, т. 8, с. 3727.
22. Шалыт С. С., Муждаба В. М., Галецкая А. Д.—ФТТ, 1968, т. 8, с. 1277.
23. Равич Ю. И., Смирнов И. А., Тихонов В. В.—ФТП, 1967, т. 1, с. 206.
24. Займан Дж. Электроны и фононы.—М.: ИЛ, 1962.
25. Займан Дж. Принципы теории твердого тела.—М.: Мир, 1974.
26. Мойжес Б. Я., Равич Ю. И.—ФТП, 1967, т. 1, с. 188.
27. Смирнов И. А., Тамарченко В. И. Электронная теплопроводность в металлах и полупроводниках.—Л.: Наука, 1977.
28. Rutley E. H. The Hall effect and related phenomena.—London, 1960, p. 88.
29. Гуревич В. Л., Фирсов Ю. А.—ЖЭТФ, 1961, т. 40, с. 199.
30. Frühlich H., Mott N. F.—Proc. Roy. Soc., 1939, v. A 171, p. 496.
31. Lewis V. F., Sondheimer E. H.—Proc. Roy. Soc., 1955, v. A 227, p. 241.
32. Половинкин В. Г., Скок Э. М.—ФТП, 1974, т. 8, с. 1134.
33. Эпштейн Э. М.—Письма в ЖЭТФ, 1975, т. 22, с. 172; Изв. вузов: Физика, 1976, № 2, с. 116.
34. Малевич В. Л., Эпштейн Э. М.—ФНТ, 1976, т. 2, с. 1026.
35. Willarson R. K., Harman T. C., Beer A. C.—Phys. Rev., 1954, v. 96, p. 1512.
36. Мочан И. В., Образцов Ю. Н., Крылова Т. В.—ЖТФ, 1957, т. 27, с. 242.
37. Пикус Г. Е.—ЖТФ, 1957, т. 27, с. 1606.

38. *Ehrenreich H. E., Overhauser A. O.*— Phys. Rev., 1956, v. 104, p. p. 331, 649.
39. *Бир Г. Л., Пикус Г. Е.*— ФТТ, 1960, т. 2, с. 2287.
40. *Бир Г. Л., Нормантас Е., Пикус Г. Е.*— ФТТ, 1962, т. 4, с. 1180.
41. *Lawaetz P.*— Phys. Rev., 1968, v. 174, p. 867.
42. *Гашимаде Ф. М., Сеид-Раева С. М.* Изв. АН АзССР: Сер. физ.-мат. и техн. наук, 1974, № 4, с. 415.
43. *Гуревич Л. Э.*— ЖЭТФ, 1946, т. 16, с. 416.
44. *Гуревич В. Л., Образцов Ю. Н.*— ЖЭТФ, 1957, т. 32, с. 390.
45. *Parrot J.*— Proc. Phys. Soc., 1958, v. 71, p. 82; 1957, v. B70, p. 590.
46. *Аскеров Б. М.*— ФТП, 1982, т. 16, с. 2083.
47. *Herring C.*— Phys. Rev., 1954, v. 95, p. 954.
48. *Landau L. D., Румер Ю. Б.*— Phys. Zs. USSR, 1937, Bd. 11, S. 18.
49. *Simons S.*— Proc. Phys. Soc., 1964, v. 83, p. 749.

К главе 5

1. *Abeles B., Meiboom S.*— Phys. Rev., 1954, v. 95, p. 31.
2. *Shibuya M.*— Phys. Rev., 1954, v. 95, p. 1385.
3. *Gold L., Roth L. M.*— Phys. Rev., 1956, v. 103, p. 61.
4. *Perring C., Voght E.*— Phys. Rev., 1956, v. 101, p. 944; *Херринг К., Фогт Э.*— В сб.: Проблемы физики полупроводников/Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича.— М.: ИЛ, 1957, с. 567.
5. *Drable J. R., Wolfe R.*— Proc. Phys. Soc., 1956, v. B69, p. 1101.
6. *Drable J. R.*— Proc. Phys. Soc., 1958, v. 72, p. 380.
7. *Цидильковский И. М., Шираковский В. П.*— ФММ, 1960, т. 9, с. 321.
8. *Коренблиг И. Я.*— ФТТ, 1960, т. 2, с. 3083; 1962, т. 4, с. 168.
9. *Ансельм А. И.* Введение в теорию полупроводников.— М.: Наука, 1978.
10. *Гашимаде Ф. М.*— Изв. АН АзССР: Сер. физ.-мат. и техн. наук, 1963, № 6, с. 83.
11. *Аскеров Б. М.*— Изв. АН АзССР: Сер. физ.-мат. и техн. наук, 1964, № 2, с. 89; 1964, № 4, с. 89; 1970, № 4, с. 24.
12. *Аскеров Б. М.* Кинетические эффекты в полупроводниках.— Л.: Наука, 1970.
13. *Аскеров Б. М., Кулиев Б. И., Исмаилов И. А., Абдулкадыров В. А.*— Ученые записки АГУ, Сер. физ.-мат. и техн. наук, 1971, № 3, с. 71.
14. *Самойлович А. Г., Коренблиг И. Я., Даховский И. В.*— ДАН СССР, 1961, т. 139, с. 355.
15. *Самойлович А. Г., Коренблиг И. Я., Даховский И. В., Искра В. Д.*— ФТТ, 1961, т. 3, с. 2939; 1961, т. 3, с. 3285.
16. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках/Под общей ред. И. П. Баранского.— Киев: Наукова думка, 1977.
17. *Ravich Yu. I., Efimova V. A., Tamarchenko V. I.*— Phys. Stat. Sol. (b), 1971, v. 43, p. 11.
18. *Чуенков В. А.*— ФТП, 1974, т. 8, с. 861; 1974, т. 8, с. 1865.
19. *Zukotynski S., Kolodziejczak I.*— Phys. Stat. Sol., 1963, v. 3, p. 990.
20. *Zukotynski S., Grynberg M.*— Phys. Stat. Sol., 1965, v. 9, p. 549.
21. *Гашимаде Ф. М., Надирзаде Р. С.*— ДАН АзССР, 1981, № 4, с. 34.

К главе 6

1. *Landau L.*— Zs. Phys., 1930, Bd. 64, S. 629.
2. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика.— М.: Наука, 1974, с. 522.
3. *Bowers R., Yafet Y.*— Phys. Rev., 1959, v. 115, p. 1165.
4. *Askerov B. M., Gashimzade F. M.*— Phys. Stat. Sol., 1966, v. 18, p. 667.
5. *Lax V., Roth Laura M.; Zwerdling S.*— J. Phys. Chem. Sol., 1959, v. 8, p. 311.
6. *Румер Ю. Б., Рыбкин М. Ш.* Термодинамика, статистическая физика и кинетика.— М.: Наука, 1977, с. 267.

7. Ансельм А. И., Аскеров Б. М.—ФТТ, 1960, т. 2, с. 2821.
8. Yafet Y., Keyes R. W., Adams E. N.—J. Phys. Chem. Sol., 1956, v. 1, p. 137.
9. Putley E. N.—J. Phys. Chem. Sol., 1961, v. 22, p. 241.
10. Брандт Н. Б., Чудинов С. М. Электронная структура металлов.—М.: Изд-во МГУ, 1973, с. 196.
11. Titeica S.—Ann. Phys., 1935, Bd. 22, S. 128.
21. Schubnikov L. W., de Haas W. I.—Commun—Kemerlingh Onnes Lab., 1930, v. v. 207, 207a, 210a, 210b.
13. Давыдов Б., Померанчук Н.—ЖЭТФ, 1939, т. 9, с. 1924.
14. Adas E. N., Holdstein T. D.—J. Phys. Chem. Sol., 1959, v. 10, p. 254; В сб.: Вопросы квантовой теории необратимых процессов/Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича.—М.: ИЛ, 1961, с. 255.
15. Kubo R., Hasegawa H., Hashitsume N.—J. Phys. Soc. Japan, 1959, v. 14, p. 56; в сб. Вопросы квантовой теории необратимых процессов/Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича.—М.: ИЛ, 1961, с. 89.
16. Askerov B. M., Gashimzade F. M.—Phys. Stat. Sol., 1965, v. 10, p. 621.
17. Гуревич В. Л., Фирсов Ю. А.—ЖЭТФ, 1964, т. 47, с. 734.
18. Скобов В. Г.—ЖЭТФ, 1959, т. 37, с. 1467; т. 38, с. 1304.
19. Kubo R.—J. Phys. Soc. Japan, 1957, v. 12, p. 570; в сб.: Вопросы квантовой теории необратимых процессов/Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича.—М.: ИЛ, 1961, с. 39.
20. Шалыт С. С., Эфрос А. Л.—ФТТ, 1962, т. 4, с. 1233.
21. Гуревич Л. Э., Эфрос А. Л.—ЖЭТФ, 1962, т. 43, с. 561.
22. Аскеров Б. М., Гашизмаде Ф. М.—Письма в ЖЭТФ, 1966, т. 3, с. 350.
23. Frederikse H. P. R., Holser W. R.—Phys. Rev., 1957, v. 108, p. 1136.
24. Broom R.—Proc. Phys. Soc., 1958, v. 71, p. 470.
25. Бреслер М. С., Парфеньев Р. В., Шалыт С. С.—ФТТ, 1965, т. 7, с. 1266.
26. Амирханов Х. Н., Баширов Р. Н.—ФТТ, 1966, т. 8, с. 2189.
27. Frederikse H. P. R., Holster W. R.—Phys. Rev., 1958, v. 110, p. 880.
28. Sladek R. I.—Phys. Rev., 1958, v. 110, p. 817.
29. Амирханов Х. Н., Баширов Р. Н., Закиев Ю. Э.—ЖЭТФ, 1961, т. 41, с. 1699.
30. Bresler M. S., Redko N. A., Shalyt S. S.—Phys. Stat. Sol., 1966, v. 15, p. 745.
31. Закиев Ю. Э.—ФТТ, 1966, т. 8, с. 1974.
32. Амирханов Х. И., Баширов Р. Н.—ФТП, 1967, т. 1, с. 667.
33. Whitsett C. R.—Phys. Rev., 1965, v. 138, p. 829.
34. Баширов Р. Н., Гаджиев Р. М.—ФТП, 1967, т. 1, с. 443.
35. Бреслер М. С., Алиев С. А., Шалыт С. С.—ФТТ, 1967, т. 9, с. 2746.
36. Амирханов Х. И., Баширов Р. Н.—Письма в ЖЭТФ, 1965, т. 1, с. 17.
37. Гуревич В. Л., Фирсов Ю. А.—ЖЭТФ, 1961, т. 40, с. 199; 1961, т. 41, с. 512.
38. Argues P. N., Roth L. M.—Phys. Chem. Sol., 1959, v. 12, p. 89.
39. Эфрос А. Л.—ФТТ, 1961, т. 3, с. 2848.
40. Клингер М. И.—ФТТ, 1961, т. 3, с. 1342.
41. Гуревич В. Л., Фирсов Ю. А., Эфрос А. Л.—ФТТ, 1962, т. 4, с. 1813.
42. Askerov B. M., Gashimzade F. M.—Phys. Stat. Sol., 1968, v. 28, p. 783.
43. Argues P. N., Roth L. M.—Phys. Chem. Sol., 1959, v. 12, p. 89.
44. Puri S. M., Geball T. H.—Bull. Amer. Phys. Soc., 1963, v. 8, p. 309.
45. Шалыт С. С., Парфеньев Р. В., Муждаба В. М.—ФТТ, 1964, т. 6, с. 647.
46. Парфеньев Р. В., Шалыт С. С., Муждаба В. М.—ЖЭТФ, 1964, т. 47, с. 444.
47. Firsov Yu. A., Gurevich V. L., Parfeniev R. V., Shalyt S. S.—Phys. Rev. Lett., 1964, v. 12, p. 660.
48. Павлов С. Т., Фирсов Ю. А.—ФТТ, 1965, т. 7, с. 2634.
49. Павлов С. Т., Фирсов Ю. А.—ЖЭТФ, 1965, т. 49, с. 1664.
50. Павлов С. Т., Парфеньев Р. В., Фирсов Ю. А., Шалыт С. С.—ЖЭТФ, 1965, т. 48, с. 1565.
51. Мошовец Д. В., Парфеньев Р. В., Шалыт С. С.—ЖЭТФ, 1964, т. 47, с. 2007.
52. Цидильковский И. М., Аксельрод М. М., Соколов В. И.—ФТТ, 1965, т. 7, с. 316.

53. Поморцев Р. В., Пономарев А. И., Харус Г. И., Цидильковский И. М.— ЖЭТФ, 1968, т. 54, с. 1347.
54. Ганцевич С. В., Гуревич В. Л.— ФТТ, 1964, т. 6, с. 2871.
55. Луцкий В. И., Журнов А. А., Елинсон М. И.— ФТТ, 1965, т. 7, с. 521.
56. Соколов В. И., Цидильковский И. М.— ФТП, 1967, т. 1, с. 835.
57. Глаузман Н. Г., Цидильковский И. М.— ФТТ, 1968, т. 10, с. 3128.
58. Ансельм А. И., Аскеров В. М.— ФТТ, 1961, т. 3, с. 3668; 1960, т. 2, с. 2310.
59. Ансельм А. И., Образцов Ю. Н., Тарханян Р. Г.— ФТТ, 1965, т. 7, с. 2837.
60. Образцов Ю. Н.— ФТТ, 1964, т. 6, с. 414; 1965, т. 7, с. 573.
61. Ансельм А. И., Образцов Ю. Н., Тарханян Р. Г.— ФТТ, 1964, т. 6, с. 3620.
62. Львов В. С.— ФТТ, 1965, т. 7, с. 1680.
63. Зырянов П. С., Силин В. П.— ЖЭТФ, 1964, т. 46, с. 537.
64. Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В.— ЖЭТФ, 1965, т. 48, с. 204.
65. Зырянов П. С., Силин В. П.— ФММ, 1964, т. 17, с. 934.
66. Пелетминский С. В., Барьяхтар В. Г.— ФТТ, 1965, т. 7, с. 446.
67. Пелетминский С. В.— ФТТ, 1965, т. 7, с. 2666.
68. Образцов Ю. Н.— ФТТ, 1966, т. 8, с. 426.
69. Зырянов П. С., Гусева Г. И.— УФН, 1968, т. 95, с. 565.
70. Зырянов П. С., Клинггер М. И. Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках.— М.: Наука, 1976, с. 480.
71. Аскеров В. М.— Тезисы докладов на XI Всесоюзной конференции по теории полупроводников, г. Ужгород, 1983.
72. Аскеров В. М.— ДАН АзССР, 1983, т. 39, № 5, с. 25.
73. Ансельм А. И., Аскеров В. М.— ФТТ, 1967, т. 9, с. 31.
74. Аскеров В. М.— ФТП, 1970, т. 4, с. 800.
75. Агаева Р. Г., Аскеров В. М., Гашимаде Ф. М.— ФТТ, 1971, т. 13, с. 2063.
76. Аскеров В. М., Эминов Р. Ф.— Изв. АН АзССР: Сер. физ.-мат. и техн. наук, 1973, № 1, с. 123.
77. Aгаева R. G., Askerov V. M., Eminov R. F.— Phys. Stat. Sol., 1975, v. 69, p. K63.
78. Цендин К. Д., Эфрос А. Л.— ФТТ, 1966, т. 8, с. 378.
79. Аскеров В. М., Эминов Р. Ф.— ФТП, 1974, т. 8, с. 950.
80. Ансельм А. И., Тарханян Р. Г.— ФТТ, 1964, т. 6, с. 3357.
81. Дричко И. Л., Мочан И. В.— ФТТ, 1964, т. 6, с. 1902.
82. Rigi S. M., Geball T. H.— Phys. Rev., 1964, v. A 136, p. 1767.
83. Бреслер М. С., Парфеньев Р. В., Шалыт С. С.— ФТТ, 1966, т. 8, с. 1776.
84. Шалыт С. С., Парфеньев Р. В., Бреслер М. С.— ЖЭТФ, 1965, т. 48, с. 1212.
85. Образцов Ю. Н.— ФТТ, 1968, т. 8, с. 1772.
86. Бреслер М. С., Парфеньев Р. В., Редько Н. А., Шалыт С. С.— Письма в ЖЭТФ, 1966, т. 4, с. 348.
87. Гаджиалиев М. М., Гаджиева Р. М.— Изв. вузов: Физика, 1978, № 10, с. 135.

К главе 7

1. Чопра К. Л. Электрические явления в тонких пленках.— М.: Мир, 1972.
2. Кравченко А. Ф., Мигин В. В., Скок Э. М. Явления переноса в полупроводниковых пленках.— Новосибир.: Наука, Сиб. отд., 1979.
3. Ларсон Д. К. Размерные эффекты в электропроводности тонких металлических пленок и проволок.— В кн.: Физика тонких пленок.— М.: Мир, 1973, т. 6.
4. Комчик Ю. Ф. Физика металлических пленок.— М.: Мир, 1979.
5. Чамберс Р. Явления переноса. Поверхностные и размерные эффекты.— В кн.: Физика металлов, т. 1. Электроны.— М.: Мир, 1972.
6. Раишба Э. П., Грибников Э. С., Кравченко А. Ф.— УФН, 1976, т. 119, с. 3.
7. Тавгер Б. А., Демидовский В. Н.— УФН, 1968, т. 96, с. 61.
8. Санджирский В. В.— ЖЭТФ, 1967, т. 52, с. 158.
9. Fuch K.— Proc. Camb. Phil. Soc., 1938, v. 34, p. 100.
10. Sondheimer E. H.— Phys. Rev., 1950, v. 80, p. 401.
11. Lucas M. S. P.— J. Appl. Phys., 1965, v. 35, p. 1632.
12. Кулиев В. И., Фигарова С. Р.— Изв. вузов: Физика, 1977, № 3, 86.

13. Гуревич В. Л.— ЖЭТФ, 1958, т. 35, с. 668.
14. Устинов В. В., Окулов В. И.— ФММ, 1978, т. 45, с. 1145.
15. Горкун Ю. Н.— УФЖ, 1973, т. 18, с. 742; 1971, т. 16, с. 657.
16. Аскеров Б. М., Кулиев Б. И., Фигарова С. Р.— ФТП, 1979, т. 13, с. 2233.
17. Кириченко О. В., Песчанский В. Г., Савельева С. Н.— ЖЭТФ, 1977, т. 67, с. 1451; ФНТ, 1978, т. 4, с. 180.
18. Кулиев Б. И.— ФТТ, 1982, т. 24, с. 1498.
19. Schriffer J. R.— Phys. Rev., 1955, v. 97, p. 641.
20. Green R. F.— J. Phys. Chem. Sol., 1960, v. 14, p. 291.
21. Баскин Э. М., Энгин М. В.— ФТП, 1974, т. 8, с. 64.
22. Пискер Т. Н., Сандожирский В. Б.— ЖЭТФ, 1969, т. 56, с. 1734.
23. Аскеров Б. М., Кулиев Б. И.— ФТП, 1981, т. 15, с. 149.
24. Sondheimer E. H.— Adv. in Phys., 1952, v. 1, p. 1.
25. Канер Э. Н.— ЖЭТФ, 1958, т. 34, с. 658.
26. Anderson J. C.— Adv. in Phys., 1970, v. 19, p. 311.
27. Полников В. Г., Рябошапко В. А.— ЖЭТФ, 1974, т. 67, с. 712.
28. Teller C. R., Tosser A. J., Hatid L.— J. Appl. Phys., 1980, v. 23, p. 357.
29. Павлов С. Д., Понев В. И.— ФНТ, 1979, т. 5, с. 123.
30. Полников В. Г.— ФТП, 1973, т. 7, с. 1957; 1975, т. 9, с. 741.
31. Аскеров Б. М., Кулиев Б. И., Фигарова С. Р.— Докл. АН АзССР, 1979, т. 35, с. 40.
32. Коллов В. А., Лидоренко Н. С., Нагаев Э. Л.— ФТТ, 1974, т. 16, с. 328; ЖЭТФ, Письма, 1973, т. 18, с. 469.
33. Аскеров Б. М., Кулиев Б. И., Фигарова С. Р.— ФТП, 1978, т. 12, с. 2120.
34. Аскеров Б. М., Кулиев Б. И., Фигарова С. Р.— ФТТ, 1980, т. 22, с. 2426.
35. Teller C. R., Tosser A. J., Hatid L.— Thin Solid Films, 1981, v. 76, p. 321.
36. Чаплик А. В., Энгин М. В.— ЖЭТФ, 1968, т. 53, с. 990.
37. Баскин Э. М., Энгин М. В.— ЖЭТФ, 1969, т. 57, с. 460.
38. Андреев А. Ф.— УФН, 1971, т. 205, с. 113.
39. Окулов В. И., Устинов В. В.— ЖЭТФ, 1974, т. 67, с. 1176.
40. Фальковский Л. А.— ЖЭТФ, 1979, т. 76, с. 1358.
41. Окулов В. И., Устинов В. В.— ФНТ, 1979, т. 5, с. 213.
42. Васько Ф. Т.— ЖЭТФ, 1980, т. 79, с. 953.
43. Фальковский Л. А.— ЖЭТФ, 1970, т. 58, с. 1830.
44. More Richard M.— J. Phys. C, 1975, v. 8, p. 3810.
45. Баскин Э. М., Энгин М. В.— ФТП, 1970, т. 4, с. 1973.
46. Аскеров Б. М., Арамян К. С., Кулиев Б. И.— ФНТ, 1981, т. 7, с. 675.
47. Chodgaonkar A. M., Bhoraskar V. N., Bhiday H. K., Tilli A. D.— J. Phys. Appl. Phys., 1978, v. 11, p. 1221.
48. Аскеров Б. М., Кулиев Б. И., Фигарова С. Р.— Изв. АН АзССР; Сер. физ.-мат. и техн. наук, 1978, № 4, с. 39.
49. Juretschke H. J.— J. Appl. Phys. 1966, v. 37, p. 435.
50. Chambers R. G.— Proc. Roy. Soc. London, 1950, v. A202, p. 378.
51. Dingle R. B.— Proc. Roy. Soc., 1950, v. A201, p. 545.
52. Askerov B. M., Kuliev B. I., Figarova S. R., Steinshraiber V. Ya.— Phys. Stat. Sol., 1978, v. 87, p. 103.
53. Аскеров Б. М., Кулиев Б. И., Штейншрайбер В. Я.— ФТП, 1983, т. 17, с. 1701.
54. Лидоренко Н. С., Гудков Л. А., Дашевский Э. М., Котельников В. А., Коломоец Н. В.— ДАН СССР, 1980, т. 250, с. 82.
55. Бонч-Бруевич В. Л., Калашиков С. Г. Физика полупроводников.— М.: Наука, 1977.
56. Ржанов А. В. Электронные процессы на поверхностях полупроводников.— М.: Наука, 1971.
57. Кулиев Б. И.— ФТП, 1983, т. 17, с. 1752.
58. Askerov B. M., Kuliev B. I., Figarova S. R.— Phys. Stat. Sol. (b) 1984, v. 121, p. 1.
59. Лифшиц И. М., Косевич А. М.— ДАН СССР, 1953, т. 91, с. 795.
60. Лифшиц И. М., Каганов М. И.— УФН, 1959, т. 69, т. 419; 1962, т. 78, с. 411; 1965, т. 87, с. 389.
61. Сандожирский В. Б.— ЖЭТФ, 1962, т. 43, с. 2309.

62. Сандомирский В. Б.—Радиотехника и электроника, 1962, т. 7, с. 1971.
63. Демитовский В. Я., Тавгер Б. А.—ФТТ, 1964, т. 6, с. 960.
64. Гладун А. Д., Рыжий В. И.—ЖЭТФ, 1969, т. 57, с. 978.
65. Романов А. А., Магарилл Л. И., Сардарян В. С.—ФТП, 1970, т. 4, с. 1262.
66. Рыжий В. И.—ФТП, 1969, т. 3, с. 1704.
67. Audo T.—J. Phys. Soc. Japan, 1974, v. 37, p. 1332.
68. Корнеев В. В.—ФТТ, 1977, т. 19, с. 357.
69. Блох М. Д., Тавгер Б. А.—ФММ, 1972, т. 34, с. 691.
70. Блох М. Д.—ФТТ, 1975, т. 17, с. 896.
71. Аскеров Б. М., Кулиев Б. И., Эминов Р. Ф.—ФНТ, 1977, т. 3, с. 344.
72. Луцкий В. Н.—ЖЭТФ, Письма, 1965, т. 2, с. 391.
73. Луцкий В. Н., Корнеев Д. Н., Елинсон М. И.—Письма в ЖЭТФ, 1966, т. 4, с. 267.
74. Огрин Ю. Ф., Луцкий В. Н., Арифова М. У., Ковалев В. И., Сандомирский В. Б., Елинсон М. И.—ЖЭТФ, 1967, т. 53, с. 1218.
75. Петросян В. И., Молин В. Н., Скрыпкина П. А.—ФТП, 1973, т. 7, с. 993.
76. Филагов О. Н., Карпович И. А.—Письма в ЖЭТФ, 1969, т. 10, с. 224.
77. Филагов О. Н., Карпович И. А.—ФТТ, 1968, т. 10, с. 2886; 1969, т. 11, с. 1637.
78. Румер Ю. Б., Рыбкин М. Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика.—М.: Наука, 1977.
79. Vezak V.—J. Phys. Chem. Solids, 1966, v. 27, p. 821.