

И. А. Кузнецова

**Основы кинетической
теории полупроводников**

Ярославль
2015

Министерство образования и науки Российской Федерации
Ярославский государственный университет
им. П. Г. Демидова

И. А. Кузнецова

ОСНОВЫ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Учебное пособие

Рекомендовано

*Научно-методическим советом университета для студентов,
обучающихся по направлению подготовки магистратуры
Электроника и наноэлектроника*

Ярославль
ЯрГУ
2015

УДК 531.3+537.311.322

ББК В379.35я73

К 89

Рекомендовано

*Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного издания. План 2015 года*

Рецензенты:

И. И. Амиров, доктор физико-математических наук;
кафедра общей физики Военно-космической
академии им. А. Ф. Можайского (филиал, г. Ярославль);

Кузнецова, Ирина Александровна.

К 89 Основы кинетической теории полупроводников : учеб. пособие / И. А. Кузнецова ; Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. — Ярославль : ЯрГУ, 2015. — 116 с.

ISBN 978-5-8397-1050-4

В учебном пособии излагаются основы линейной теории стационарных явлений переноса в полупроводниках в квазиклассическом приближении. В предельных случаях вырожденного и невырожденного электронного газа проводится расчет кинетических коэффициентов для сферически-симметричной энергетической зоны. Отдельно рассматриваются размерные эффекты в тонких проволоках в переменном электрическом поле.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлению подготовки магистров 11.04.04 (210100.68) Электроника и нанoeлектроника (дисциплина «Физическая кинетика полупроводников»), очной формы обучения, а также для аспирантов физических факультетов университетов.

УДК 531.3+537.311.322

ББК В379.35я73

ISBN 978-5-8397-1050-4

© ЯрГУ, 2015

Оглавление

Введение	5
1. Статистика носителей заряда в металлах и полупроводниках	7
1.1. Функция распределения Ферми–Дирака	8
1.2. Сильно вырожденный электронный газ	10
1.3. Невырожденный электронный газ	13
2. Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в кристалле	15
2.1. Явления переноса и кинетическое уравнение Больцмана для невырожденного электронного газа	16
2.1.1. Уравнение Больцмана в приближении времени релаксации	22
2.1.2. Время релаксации при рассеянии носителей тока на ионах примеси	26
2.2. Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в кристалле	30
2.3. Условия применимости кинетического уравнения	35
3. Кинетические процессы (явления переноса) в полупроводниках	40
3.1. Определение неравновесной функции распределения для электронов проводимости в случае сферически-симметричной зоны	41
3.2. Электрический ток в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой	45
3.3. Электропроводность невырожденных полупроводников с простой зонной структурой	50
3.4. Гальваномагнитные явления в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой	54
3.4.1. Эффект Холла и магнетосопротивление в примесном полупроводнике n -типа проводимости	55
3.4.2. Эффект Холла и магнетосопротивление в полупроводниках со смешанной проводимостью	59
3.5. Термоэлектрические явления в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой	63

3.5.1.	Термоэлектродвижущая сила	63
3.5.2.	Эффект Томсона и эффект Пельтье	66
3.6.	Термомагнитные явления в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой	71
3.6.1.	Эффект Нернста-Эттингсгаузена в примесном полупроводнике n -типа проводимости	71
3.6.2.	Эффект Нернста-Эттингсгаузена в полупроводнике со смешанной проводимостью	74
3.7.	Явления переноса в полупроводниках с простой зоной при произвольном вырождении	75
3.7.1.	Электропроводность примесного полупроводника n -типа проводимости	78
3.7.2.	Термоэлектрические явления в примесных полупроводниках n -типа проводимости	79
3.7.3.	Гальваномагнитные явления в примесных полупроводниках n -типа	80
3.7.4.	Термомагнитные явления	83
4.	Высокочастотная электропроводность тонкой цилиндрической проволоки из металла	85
4.1.	Уравнение Больцмана для вырожденного электронного газа в слабом переменном электрическом поле	86
4.1.1.	Граничные условия	89
4.1.2.	Неравновесная функция распределения	90
4.2.	Расчет проводимости	93
4.3.	Обсуждение результатов	96
5.	Высокочастотная электропроводность тонкой цилиндрической проволоки из металла в продольном магнитном поле	100
5.1.	Кинетическое уравнение и граничные условия	100
5.2.	Расчет проводимости	102
5.3.	Обсуждение результатов	106
	Заключение	110
	Приложения	111
	Литература	115

Введение

Кинетические явления, или процессы переноса, лежат в основе многих технических применений полупроводников. Общая причина этих эффектов заключается в том, что электроны проводимости при своем движении переносят связанные с ними физические величины: массу, электрический заряд, энергию и др. Вследствие этого, при определенных внешних воздействиях возникают направленные потоки указанных величин, приводящие к ряду электрических, магнитных и тепловых эффектов.

Кинетические свойства весьма чувствительны к законам дисперсии носителей тока и к природе взаимодействия носителей с различными дефектами кристаллической решетки. Поэтому многие традиционные методы исследования полупроводниковых веществ основываются на исследовании различных кинетических эффектов.

Настоящее пособие посвящено изложению линейной теории электронных явлений переноса в полупроводниках в квазиклассическом приближении. Рассматривается наиболее простой случай сферически-симметричной энергетической зоны. Подробно анализируются предельные случаи вырожденного и невырожденного электронного газа, что позволяет минимизировать математические выводы при расчете кинетических коэффициентов.

Пособие состоит из пяти глав. Статистике носителей заряда в полупроводниках посвящена первая глава. Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в кристалле, пределы его применимости и его решение в приближении времени релаксации рассматриваются во второй главе. Основную часть пособия составляет третья глава, в которой излагается стационарная кинетическая теория

наиболее важных явлений переноса: электропроводности, гальваномагнитных, термоэлектрических и термомагнитных явлений. В четвертой главе проводится описание классических размерных эффектов на примере расчета высокочастотной электропроводности тонкой цилиндрической проволоки, радиус которой сравним с длиной свободного пробега носителей заряда. Представлено решение кинетического уравнения Больцмана с учетом диффузно-зеркальных граничных условий для функции распределения. В пятой главе рассматривается высокочастотная электропроводность тонкой проволоки, помещенной в продольное магнитное поле. Приводится сравнение теоретически рассчитанного магнетосопротивления с экспериментальными данными.

1. Статистика носителей заряда в металлах и полупроводниках

Настоящая глава посвящена статистике свободных носителей заряда в металлах и полупроводниках, которые находятся в термодинамическом равновесии с колебаниями кристаллической решетки. Важной особенностью систем, находящихся в состоянии статистического (термодинамического) равновесия, является то, что их свойства не зависят от механизма взаимодействия, приводящего к этому равновесию. Механизмы взаимодействия свободных носителей заряда с колебаниями решетки или дефектами кристалла становятся существенно важными при рассмотрении неравновесных процессов, когда носители заряда движутся в кристалле под действием приложенных внешних полей: электрического, магнитного, температурного. Такие процессы, связанные с перемещением носителей заряда, называются *явлениями переноса* или *кинетическими явлениями*.

Наиболее простое описание неравновесных процессов возможно в случае, когда отклонение системы носителей заряда от равновесия мало. Это позволяет линеаризовать задачу и описывать систему носителей заряда неравновесной функцией распределения вида: $f = f_0 + f_1$, где f_0 – равновесная функция распределения Ферми–Дирака (нулевое приближение), f_1 – малая поправка (первое приближение), обеспечивается малостью внешнего воздействия. Выбор нулевого приближения, точнее выбор параметров (T – температуры, μ – химического потенциала) в функции Ферми–Дирака, определяется постановкой задачи.

1.1. Функция распределения Ферми–Дирака

В одноэлектронном приближении взаимодействие между электронами кристалла учитывается только посредством самосогласованного поля, в котором каждый электрон движется независимо от других. Со статистической точки зрения одноэлектронное приближение соответствует модели идеального газа. Вывод стандартных формул статистической механики выходит за рамки данного курса. Для дальнейшего восприятия теории кинетических явлений достаточно вспомнить, что в состоянии статистического равновесия идеальный газ электронов подчиняется квантовой статистике Ферми–Дирака. Согласно этой статистике среднее число электронов в определенном квантовом состоянии, характеризующемся тремя квантовыми числами k_x, k_y, k_z (составляющие волнового вектора \mathbf{k}), с энергией $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ при температуре T равно [1–3]

$$f_0(\mathcal{E}(\mathbf{k})) = \frac{1}{\exp\left\{\frac{\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mu}{k_0 T}\right\} + 1}. \quad (1.1)$$

Здесь μ – химический потенциал в расчете на один электрон, k_0 – постоянная Больцмана. Функция $f_0(\mathcal{E}(\mathbf{k}))$ называется *функцией распределения Ферми–Дирака*. В условиях термодинамического равновесия μ должен быть постоянен всюду в образце, а его величина, как будет показано ниже, определяется температурой T , эффективной массой электрона m^* и заданной концентрацией электронного газа n , т. е. $\mu = \mu(n, m^*, T)$. В зависимости от указанных параметров μ для электронного газа может принимать значения в интервале $-\infty < \mu < +\infty$.

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

Полное число электронов в объеме V равно

$$N = 2 \sum_k f_0(\mathcal{E}(\mathbf{k})), \quad (1.2)$$

где суммирование ведется по всем квантовым состояниям электрона в объеме V . Множитель 2 учитывает тот факт, что в каждом \mathbf{k} -состоянии могут находиться (в соответствии с принципом Паули) два электрона с противоположно направленными спинами.

Равенство (1.2) определяет химический потенциал μ как функцию концентрации электронов $n = N/V$, температуры T и эффективной массы m^* .

Стационарные состояния электронов в идеальном кристалле характеризуются волновым вектором \mathbf{k} и номером зоны [1–3]. При этом объем в зоне Бриллюэна, приходящийся на каждое значение \mathbf{k} , равен $(2\pi)^3/V$, где V – объем кристалла. Поэтому число квантовых состояний, соответствующих элементу объема в зоне Бриллюэна d^3k и рассчитанное на единицу объема кристалла, есть

$$2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3/V} \frac{1}{V} = 2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3}.$$

Учитывая вышесказанное, для концентрации электронов в зоне проводимости $n = N/V$ получим

$$n = 2 \int f_0(\mathcal{E}(\mathbf{k})) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (1.3)$$

Здесь суммирование заменено интегрированием, так как компоненты вектора \mathbf{k} в пределе одной зоны (проводимости) пробегают почти непрерывную последовательность значений. Для вычисления интеграла (1.3) необходимо знать закон дисперсии $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{k})$. В случае сферически-симметричной простой зонной структуры энергия электрона $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$, поэтому концентрация электронов будет иметь вид

$$\begin{aligned} n &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{\exp\left\{\frac{\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mu}{k_0 T}\right\} + 1} d^3k = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{\exp\left\{\frac{\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mu}{k_0 T}\right\} + 1} = \\ &= \frac{\sqrt{2} m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\mathcal{E}^{1/2} d\mathcal{E}}{\exp\frac{\mathcal{E} - \mu}{k_0 T} + 1} = \frac{\sqrt{2} (m^* k_0 T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^{x-z} + 1}, \quad (1.4) \end{aligned}$$

здесь выполнен переход к сферическим координатам в \mathbf{k} -пространстве (при этом зависимость $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$ не изменяется), затем использована замена переменной интегрирования $x = \mathcal{E}/k_0 T$ и введен параметр $z = \mu/k_0 T$. Это выражение определяет μ как функцию n , T , m^* .

Интеграл, стоящий в правой части (1.4), не сводится к элементарным функциям от z . Выражение вида

$$\mathcal{F}(z) = \int_0^{\infty} \frac{x^n dx}{e^{x-z} + 1} \quad (1.5)$$

часто встречается в электронной теории кристаллов, его называют интегралом Ферми [2].

Рассмотрим два важных предельных случая, когда интеграл Ферми (1.5) существенно упрощается и может быть вычислен аналитически. Эти предельные случаи обычно отдельно рассматриваются в электронной теории кристаллов, в частности в кинетических процессах.

1.2. Сильно вырожденный электронный газ

Электронный газ называется *вырожденным*, если выполняется условие $\mu \gg k_0T$ ($z \gg 1$). Ниже будет показано, что этот случай реализуется в хороших металлах, у которых концентрация электронов проводимости $n \approx 10^{22} \text{см}^{-3}$. Очевидно, что в этом случае функция распределения Ферми–Дирака (1.1) $f_0(\mathcal{E})$ имеет вид

$$f_0(\mathcal{E}) \approx \begin{cases} 1, & \mathcal{E} \ll \mu \\ 0, & \mathcal{E} \gg \mu. \end{cases}$$

Крутой спад $f_0(\mathcal{E})$ происходит вблизи точки $\mathcal{E} = \mu$ в интервале шириной порядка k_0T .

Функции $f_0(\mathcal{E})$ и $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right)$ схематически изображены на рис. 1.1. Чем ниже температура, тем производная $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right)$ ближе к дельта-функции. Действительно, $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right)$ отлична от нуля только вблизи точки $\mathcal{E} = \mu$ и

$$\int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right) d\mathcal{E} = -\int_0^{\infty} df_0 = f_0(0) - f_0(\infty) = 1,$$

так как $f_0(0) = 1$, $f_0(\infty) = 0$.

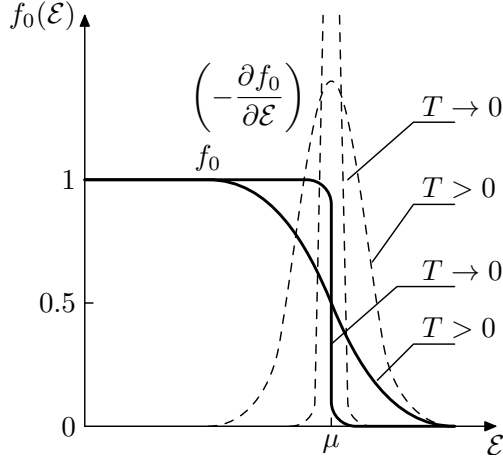


Рис. 1.1. Функция распределения Ферми-Дирака: штриховой линией показана производная функции распределения (без соблюдения масштаба)

Следовательно, $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) = \delta(\varepsilon - \mu_0)$, где μ_0 – значение μ при $T = 0$.

Для вычисления интеграла (1.4) в случае сильного вырождения выполним предварительно вычисление интеграла ($\chi(\varepsilon)$ – произвольная функция):

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^{\infty} \chi(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\infty} f_0(\varepsilon) d\varphi(\varepsilon) = \\
 &= f_0(\varepsilon)\varphi(\varepsilon)\Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \varphi(\varepsilon) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) d\varepsilon = -\varphi(0) + \int_0^{\infty} \varphi(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) d\varepsilon,
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

где при интегрировании по частям выполнено преобразование $\chi(\varepsilon)d\varepsilon = d\varphi(\varepsilon)$. Как будет видно ниже, $\varphi(0) = 0$ для всех прак-

тических случаев, поэтому

$$I = \int_0^{\infty} \varphi(\mathcal{E}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) d\mathcal{E}. \quad (1.7)$$

Используем этот интеграл для вычисления (1.4) в приближении, когда $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \approx \delta(\mathcal{E} - \mu_0)$. Так как в (1.4)

$$\chi(\mathcal{E}) = \frac{\sqrt{2} m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \mathcal{E}^{1/2},$$

то

$$\varphi = \frac{\sqrt{2} m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} \mathcal{E}^{3/2}.$$

Таким образом,

$$n = \frac{\sqrt{2} m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} \int_0^{\infty} \mathcal{E}^{3/2} \delta(\mathcal{E} - \mu_0) d\mathcal{E} = \frac{(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \mu_0^{3/2}, \quad (1.8)$$

откуда выразим химический потенциал

$$\mu_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m^*} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (1.9)$$

Нетрудно показать, что выражение (1.9) совпадает с максимальной кинетической энергией электронов \mathcal{E}_0 идеального ферми-газа при абсолютном нуле температуры (приложение 1).

В следующем приближении (приложение 2) химический потенциал имеет вид

$$\mu = \mu_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_0 T}{\mu_0} \right)^2 \right]. \quad (1.9a)$$

С учетом (1.9) условие сильного вырождения можно записать в виде

$$\frac{\mu_0}{k_0 T} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m^* k_0 T} \gg 1. \quad (1.10)$$

Как следует из вида функции распределения $f_0(\mathcal{E})$, условие вырождения (1.10) носит экспоненциальный характер, т. е. $\exp(\mu_0/k_0 T) \gg$

1, поэтому если $(\mu_0/k_0T) \approx 5 \div 7$, то вырождение можно считать сильным.

Из (1.10) видно, что вырождению способствует высокая концентрация n , малая эффективная масса m^* и низкая температура T . Для типичного металла с $n \approx 10^{22} \text{см}^{-3}$, $m^* \approx 10^{-27} \text{г}$ при комнатной температуре $\exp(\mu_0/k_0T) \approx 10^2$, т. е. вырождение можно считать очень сильным. Более того, свободные электроны в металле остаются сильно вырожденными вплоть до его температуры плавления.

1.3. Невырожденный электронный газ

В предыдущем параграфе был рассмотрен случай положительного химического потенциала μ , удовлетворяющего условию вырождения $\exp(\mu/k_0T) \gg 1$. В настоящем параграфе исследуем противоположный случай отрицательного химического потенциала, удовлетворяющего неравенству $\exp(-\mu/k_0T) \gg 1$. В этом случае электронный газ называется *невырожденным*, а функция распределения Ферми–Дирака (1.1) переходит в классическое распределение Максвелла–Больцмана:

$$f_0(\mathcal{E}) = \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/k_0T} + 1} \approx e^{\mu/k_0T} e^{-\mathcal{E}/k_0T} = A e^{-\mathcal{E}/k_0T}, \quad (1.11)$$

где $A = e^{\mu/k_0T}$ – нормировочная константа. Тогда концентрация электронов в зоне проводимости, согласно (1.4), равна

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{4\pi^3} \int A e^{-\mathcal{E}/k_0T} d^3k = \frac{1}{4\pi^3} A \int_0^\infty e^{-\hbar^2 k^2 / (2m^* k_0T)} 4\pi k^2 dk = \\ &= \frac{(2\pi m^* k_0T)^{3/2}}{4\pi^3 \hbar^3} A. \end{aligned} \quad (1.12)$$

При вычислении интеграла сначала был выполнен переход к сферической системе координат, после чего интеграл (1.12) был сведен к интегралу Пуассона с помощью дифференцирования по

параметру $\alpha = \hbar^2/(2m_n^*k_0T)$:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-\alpha k^2} k^2 dk &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_0^{\infty} e^{-\alpha k^2} dk = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha k^2} dk = \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{1/2}} \right) = \frac{1}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}}. \end{aligned}$$

Из формулы (1.12) следует:

$$A = e^{\mu/k_0T} = \frac{4\pi^3 \hbar^3 n}{(2\pi m^* k_0 T)^{3/2}}, \quad (1.13)$$

$$\mu = k_0 T \ln \left[\frac{4\pi^3 \hbar^3 n}{(2\pi m^* k_0 T)^{3/2}} \right]. \quad (1.14)$$

Из (1.14) видно, что, в противоположность вырожденному электронному газу, химический потенциал μ довольно сильно зависит от температуры.

Функцию распределения (1.11) с учетом (1.13) можно записать в следующем виде

$$f_0(\mathcal{E}) = \frac{4\pi^3 \hbar^3 n}{(2\pi m^* k_0 T)^{3/2}} e^{-\mathcal{E}/k_0 T}. \quad (1.15)$$

Критерий применимости классической статистики представим в экспоненциальном виде:

$$\exp \left(-\frac{\mu}{k_0 T} \right) = \frac{1}{A} = \frac{(2\pi m^* k_0 T)^{3/2}}{4\pi^3 \hbar^3 n} \gg 1. \quad (1.16)$$

Из (1.16) видно, что применению классической статистики способствует малая концентрация n , высокая температура T и большая эффективная масса m^* . Так, для полупроводника с $n \approx 10^{17} \text{см}^{-3}$, $m^* \approx 10^{-27} \text{г}$ при комнатной температуре $1/A \approx 300$, т. е. критерий (1.16) выполняется с избытком. Граничное значение концентрации, соответствующее $1/A \approx 1$, равно $n \approx 10^{19} \text{см}^{-3}$.

2. Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в кристалле

Для описания движения электронов самым простым приближением является пренебрежение всеми видами взаимодействий: кулоновским взаимодействием электронов друг с другом, взаимодействием электронов с положительным фооном (ионная решетка). Каждый электрон независим от всех остальных и подвержен влиянию только внешних сил.

Несмотря на такие грубые приближения, *модель невзаимодействующих свободных электронов* дает возможность рассмотреть многие явления. Обоснование этой модели можно найти в книгах [1–3, 4]. Взаимодействие электронов с периодическим полем решетки (включая усредненное электрон-электронное взаимодействие приближения Хартри–Фока) может быть во многих случаях учтено введением эффективной массы m^* . Проблема движения электронов при одновременном воздействии на них внешних сил и потенциала решетки может быть сведена к модели, в которой «квазиэлектрон» с неизменной массой m^* движется под действием внешних сил.

Здесь не будут оцениваться границы применимости такой модели (для этого см. [1–3, 4]), однако два примера можно привести: электроны проводимости в одновалентных металлах и во многих полупроводниках. Значения эффективных масс для металлов несколько выше массы свободного электрона (Na: $1,22m$; Li: $2,3m$). У полупроводников они могут быть существенно меньше m (InSb: $0,01m$). Однако, с другой точки зрения, в двух приведенных примерах электронный газ существенно отличается один от другого. В параграфе 1.3 предыдущей главы говорилось, что в полупроводниках

концентрация электронов проводимости существенно меньше, чем в металлах, и при некоторых условиях электроны проводимости (и дырки) ведут себя как газ невзаимодействующих частиц, подчиняющийся классической статистике Больцмана. Электронный газ же в металлах «вырожден». Из-за высокой концентрации электронного газа в металлах при расчете числа состояний, заполненных электронами, надо пользоваться принципом Паули и, следовательно, статистикой Ферми–Дирака. К этому мы перейдем в следующих двух параграфах.

2.1. Явления переноса и кинетическое уравнение Больцмана для невырожденного электронного газа

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

Если величины, описывающие явления переноса, – плотность электрического тока, тепловой поток, напряженность электрического поля и т. д., – не зависят от времени, то процесс называется *стационарным*. Здесь мы будем рассматривать только стационарные явления переноса.

В классическом приближении электроны проводимости рассматриваются как идеальный газ (невырожденный электронный газ), который в состоянии термодинамического равновесия описывается равновесной функцией распределения Больцмана $f_0(\varepsilon) = \exp((\mu - \varepsilon)/k_0T)$, где $\varepsilon = mv^2/2 + U(x, y, z)$ – полная энергия ($U(x, y, z)$ – потенциальная энергия); m – масса электрона; v – скорость электрона. Химический потенциал μ в рассматриваемом классическом случае является отрицательным и удовлетворяет условию: $\exp(-\mu/k_0T) \gg 1$. Аналогично для электронов в неравновесном состоянии можно ввести неравновесную функцию распределения $f(v_x, v_y, v_z, x, y, z, t)$, тогда число электронов в момент времени t в окрестности точки \mathbf{r} в объеме $d^3r = dx dy dz$, со скоростями, лежащими между v_x и $v_x + dv_x$,

v_y и $v_y + dv_y$, v_z и $v_z + dv_z$, определяется выражением

$$f(v_x, v_y, v_z, x, y, z, t)dv_x dv_y dv_z dx dy dz = f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)d^3v d^3r. \quad (2.1)$$

Отметим, что одновременное задание координат и скоростей электронов справедливо только в классическом случае.

В зависимости от того, каким именно образом нарушено термодинамическое равновесие в системе носителей заряда, функция распределения может иметь различный вид. По этой причине целесообразно искать не универсальное выражение для самой функции распределения $f(v_x, v_y, v_z, x, y, z, t)$, а универсальное уравнение, из которого она определяется и которое отражает как реальные физические условия, так и свойства материала. В рамках классической кинетической теории газов такая задача была поставлена и решена Л. Больцманом; в дальнейшем его метод был обобщен А. Зоммерфельдом на вырожденный электронный газ. Уравнение, полученное Больцманом, называется кинетическим. Метод расчета кинетических коэффициентов, основанный на его использовании, является основным и эффективным средством в теории явлений переноса.

Выведем уравнение, которому удовлетворяет функция $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$. Рассмотрим движение электронов в обычном (геометрическом) пространстве и в скоростном пространстве \mathbf{v} -векторов. Введем понятие \mathbf{v} -электрона, который имеет значение скорости в окрестности точки \mathbf{v} в объеме $d^3v = dv_x dv_y dv_z$ скоростного пространства \mathbf{v} -векторов. На рис. 2.1 представлен элемент объема $d^3r = dx dy dz$. Рассмотрим изменение числа \mathbf{v} -электронов внутри этого объема за счет прихода электронов сквозь левую грань $dydz$ и ухода сквозь правую грань $dydz$ (считаем, что $v_x > 0$).

Число \mathbf{v} -электронов, пришедших в объем через левую грань за время dt , равно

$$dN_1 = f(\mathbf{v}, x, y, z, t)d^3v dy dz v_x dt,$$

число \mathbf{v} -электронов, ушедших из объема через правую грань за время dt , равно

$$dN_2 = f(\mathbf{v}, x + dx, y, z, t)d^3v dy dz v_x dt.$$

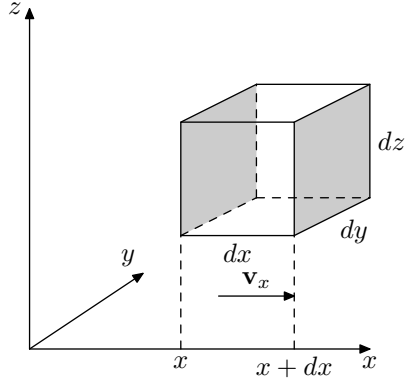


Рис. 2.1. Элемент объема в прямоугольной системе координат

Увеличение числа \mathbf{v} -электронов в объеме d^3r за время dt равно

$$\begin{aligned}
 dN &= dN_1 - dN_2 = [f(\mathbf{v}, x, y, z, t) - f(\mathbf{v}, x+dx, y, z, t)] d^3v dy dz v_x dt = \\
 &= -v_x [f(\mathbf{v}, x+dx, y, z, t) - f(\mathbf{v}, x, y, z, t)] d^3v dy dz dt = \\
 &= -v_x \frac{\partial f}{\partial x} dx dy dz d^3v dt.
 \end{aligned}$$

В общем случае произвольного направления движения \mathbf{v} -электронов их увеличение в объеме d^3r за время dt (за счет движения электронов сквозь все 6 граней объема d^3r) составляет величину, равную

$$\begin{aligned}
 - \left(v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} \right) d^3v d^3r dt = \\
 = -(\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f) d^3v d^3r dt = -\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} d^3v d^3r dt. \quad (2.2)
 \end{aligned}$$

Это изменение количества электронов обусловлено процессами переноса, происходящими в результате диффузии носителей заряда при наличии градиента их концентрации или градиента температуры. (Знак «-» означает, что движение происходит в сторону уменьшения концентрации или температуры.) Аналогично можно рассмотреть изменение числа \mathbf{v} -электронов в объеме $d^3v = dv_x dv_y dv_z$

за время dt в результате их «движения» в \mathbf{v} -пространстве со «скоростями» $\dot{v}_x, \dot{v}_y, \dot{v}_z$. Увеличение числа \mathbf{v} -электронов при движении в \mathbf{v} -пространстве за время dt равно

$$-(\dot{\mathbf{v}}\nabla_{\mathbf{v}}f)d^3vd^3rdt = -\dot{\mathbf{v}}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}d^3vd^3rdt = -\frac{1}{m}(\mathbf{F}\nabla_{\mathbf{v}}f)d^3vd^3rdt, \quad (2.3)$$

так как ускорение $\dot{\mathbf{v}} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{m}\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$, где $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ – сила, действующая на электрон в точке \mathbf{r} в момент t , обусловленная наличием электрического и магнитного полей.

Кроме того, число \mathbf{v} -электронов изменяется в результате столкновений электронов с колебаниями кристаллической решетки (фононами) и дефектами кристалла. Можно считать, что размер области локального нарушения периодичности поля кристаллической решетки составляет $\sim 10^{-7}$ см (несколько периодов кристаллической решетки). Средняя тепловая скорость движения электронов $\langle v \rangle \sim 10^7$ см/с, следовательно, время взаимодействия электрона со структурными нарушениями кристалла $\sim 10^{-14}$ с. За это время координата электрона не может существенно измениться, зато сильно меняется его скорость. Этот процесс аналогичен удару в механике, поэтому он получил название *столкновения*, или *соударения*. При соударении происходит изменение числа электронов, движущихся в данном направлении, поэтому процессы столкновения называют также процессами *рассеяния*. Каждое столкновение \mathbf{v} -электрона из-за резкого изменения скорости уводит его из объема d^3v .

Пусть $W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')d^3v'$ – вероятность в единицу времени электрона со скоростью \mathbf{v} рассеяться и перейти в \mathbf{v}' -электрон, принадлежащий элементу объема скоростного пространства $d^3v' = dv'_x dv'_y dv'_z$. Поскольку при столкновении имеет место кратковременное взаимодействие, которое не вызывает заметного изменения координаты, то в рассматриваемом случае собственно вероятность $W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ не будет зависеть от \mathbf{r} и \mathbf{r}' .

Полное число \mathbf{v} -электронов, уходящих за время dt из скоростного объема d^3v в результате столкновений в обычном пространственном объеме d^3r , равно

$$-\int_{\mathbf{v}'} [f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)d^3vd^3rW(\mathbf{v}, \mathbf{v}')dt] d^3v',$$

где интегрирование ведется по всем значениям скорости \mathbf{v}' .

Кроме того, число \mathbf{v} -электронов в элементе скоростного объема d^3v будет возрастать за счет превращений всевозможных \mathbf{v}' -электронов в \mathbf{v} -электроны в результате столкновений (в том же объеме d^3r). Это возрастание числа \mathbf{v} -электронов за время dt равно

$$\int_{\mathbf{v}'} [f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t) d^3v d^3r W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) dt] d^3v',$$

где интегрирование ведется по всем значениям скорости \mathbf{v}' .

В итоге возрастание числа \mathbf{v} -электронов за время dt из-за столкновений в объеме d^3r равно

$$d^3v d^3r dt \int_{\mathbf{v}'} [f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t) W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')] d^3v'. \quad (2.4)$$

С другой стороны, возрастание числа \mathbf{v} -электронов в объеме d^3r за время от t до $t + dt$ составляет величину

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t + dt) d^3v d^3r - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d^3v d^3r = \frac{\partial f}{\partial t} d^3v d^3r dt. \quad (2.5)$$

Это изменение числа электронов, обусловленное их движением за счет диффузии, действия на них внешней силы и наличия процессов рассеяния, равно сумме выражений (2.2), (2.3) и (2.4). После сокращения на $d^3v d^3r dt$ получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= -(\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f) - \frac{1}{m} (\mathbf{F} \nabla_{\mathbf{v}} f) + \\ &+ \int_{\mathbf{v}'} [f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t) W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')] d^3v'. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Это уравнение называется *кинетическим уравнением Больцмана*.

Так называемый *полевой* член

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{пол}} = -(\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f) - \frac{1}{m} (\mathbf{F} \nabla_{\mathbf{v}} f) \quad (2.7)$$

определяет скорость изменения функции распределения f под действием внешних полей (электрических, магнитных, температурных), приводящих к непрерывному движению электронов в \mathbf{r} - и \mathbf{v} -пространстве.

Скорость изменения функции распределения в результате рассеяния носителей заряда учитывает *столкновительный* член, или так называемый *интеграл столкновений*:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = \int_{\mathbf{v}'} [f(\mathbf{v}', \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')] d^3v'. \quad (2.8)$$

Кинетическое уравнение (2.6) с учетом (2.7) и (2.8) можно записать в символическом виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}}. \quad (2.9)$$

Так как в правой части (2.6) стоит интеграл от неизвестной функции $f(\mathbf{v}, \mathbf{r})$, то кинетическое уравнение Больцмана является интегро-дифференциальным уравнением; математическая задача о его решении становится определенной, если заданы граничные условия. Это, однако, удобно делать применительно к тому или иному конкретному случаю. Решение уравнения Больцмана с учетом диффузных граничных условий будет рассмотрено в главе 4 при вычислении высокочастотной проводимости тонких цилиндрических проволок.

На носители заряда действуют, с одной стороны, внешние силы, стремящиеся упорядочить движение, и, с другой стороны, столкновения, стремящиеся разупорядочить их движение. В стационарном состоянии эти процессы компенсируют друг друга и

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0,$$

или

$$\mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}f + \frac{1}{m}\mathbf{F}\nabla_{\mathbf{v}}f = \int_{\mathbf{v}'} [f(\mathbf{v}', \mathbf{r})W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f(\mathbf{v}, \mathbf{r})W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')] d^3v'. \quad (2.10)$$

В общем случае даже для стационарных процессов решение кинетического уравнения является очень сложной задачей. Для решения уравнения, конечно, необходимо знать силу \mathbf{F} и вероятность перехода $W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$.

2.1.1. Уравнение Больцмана в приближении времени релаксации

В равновесном случае для невырожденного электронного газа функция распределения $f = f_0(\epsilon) = \exp(\frac{\mu - \epsilon}{k_0 T})$, где полная энергия $\epsilon = \mathcal{E} + U$, т. е. равна сумме кинетической энергии $\mathcal{E} = \frac{mv^2}{2}$ и потенциальной энергии $U(\mathbf{r})$. Покажем, что в этом случае левая часть уравнения (2.10) равна нулю:

$$\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f_0(\mathcal{E} + U) = \frac{1}{k_0 T} f_0 \mathbf{v} (-\nabla_{\mathbf{r}} U) = \frac{1}{k_0 T} f_0(\mathbf{v} \mathbf{F}),$$

$$\frac{1}{m} \mathbf{F} \nabla_{\mathbf{v}} f_0(\mathcal{E} + U) = -\frac{1}{m} \mathbf{F} \frac{m \mathbf{v}}{k_0 T} f_0 = -\frac{1}{k_0 T} f_0(\mathbf{v} \mathbf{F}).$$

Таким образом, сумма полученных выражений, входящих в левую часть (2.10), равна нулю.

В дальнейшем мы будем рассматривать упругие столкновения электронов, при которых меняется только направление скорости, но не ее абсолютная величина; так что если после столкновения скорость равна \mathbf{v}' , то $v' = v$ и, следовательно, $\mathcal{E} = \mathcal{E}'$ и $\epsilon = \epsilon'$. С учетом сказанного запишем правую часть уравнения (2.10), т. е. интеграл столкновений:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ст}} &= \int [f_0(\epsilon') W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - f_0(\epsilon) W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')] d^3 v' = \\ &= f_0(\epsilon) \int [W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) - W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')] d^3 v' = 0. \end{aligned} \quad (2.11)$$

При произвольном \mathbf{v} интеграл (2.11) может равняться нулю только в случае

$$W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) = W(\mathbf{v}, \mathbf{v}'). \quad (2.12)$$

Последнее равенство есть следствие общего принципа детального равновесия, согласно которому вероятности прямого и обратного

процессов одинаковы. В квантовой механике равенство (2.12) является прямым следствием ее законов.

В линейном приближении функцию распределения представим в виде

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = f_0(\epsilon) + f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t), \quad (2.12)$$

где f_1 – неравновесная поправка к функции распределения f_0 . Если на электроны действует только электрическое поле \mathbf{E} , направленное вдоль оси x , то, как будет показано ниже, f_1 может быть представлена в виде

$$f_1 = -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathcal{E}) v_x, \quad (2.14)$$

где $\chi(\mathcal{E})$ – некоторая функция энергии $\mathcal{E} = \frac{m}{2}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$. Множитель $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right)$ выделяется для удобства дальнейших расчетов. Подставляя (2.14) в (2.8), считая столкновения упругими ($\mathcal{E} = \mathcal{E}'$) и учитывая равенство (2.12), получим

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = -f_1 \int W(\mathbf{v}, \mathbf{v}') \left(1 - \frac{v'_x}{v_x}\right) d^3 v'. \quad (2.15)$$

В случае упругого рассеяния

$$W(\mathbf{v}, \mathbf{v}') = W_0(v, \theta) \delta(v - v'), \quad (2.16)$$

где θ – угол между направлением скоростей \mathbf{v} и \mathbf{v}' , $\delta(v - v')$ – дельта-функция Дирака, которая учитывает, что при рассеянии $v = v'$.

Выбирая \mathbf{v} в качестве полярной оси в пространстве скоростей \mathbf{v}' , как это показано на рис. 2.2, для элемента объема $d^3 v'$ имеем

$$d^3 v' = v'^2 \sin \theta dv' d\theta d\varphi = v'^2 dv' d\Omega, \quad (2.17)$$

где θ и φ – полярный и азимутальный углы, определяющие направление вектора \mathbf{v}' , а $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ – телесный угол в направлении \mathbf{v}' . Ось x совпадает с направлением электрического поля \mathbf{E} . Для проекций v'_x и v_x справедливо

$$v'_x = v' \cos \alpha = v' \cos \alpha, \quad v_x = v \cos \psi, \quad (2.18)$$

где α – угол между векторами \mathbf{v}' и \mathbf{E} , а ψ – угол между \mathbf{v} и \mathbf{E} .

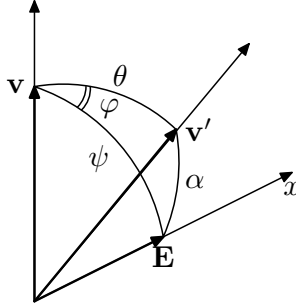


Рис. 2.2. Координатные оси в пространстве скоростей \mathbf{v}'

Из сферической тригонометрии следует, что

$$\cos \alpha = \cos \psi \cos \theta + \sin \psi \sin \theta \cos \varphi. \quad (2.19)$$

Подставляя (2.16)–(2.19) в (2.15), получим

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{СТ}} = -f_1 \int W(\theta)(1 - \cos \theta) d\Omega, \quad (2.20)$$

где $W(\theta)d\Omega = v^2 W_0(v, \theta) d\Omega$ – вероятность упругого рассеяния за одну секунду электрона со скоростью v в телесный угол $d\Omega$. Так как интеграл в (2.15) имеет размерность, обратную времени, то можно ввести *время релаксации* τ , положив

$$\frac{1}{\tau} = \int W(\theta)(1 - \cos \theta) d\Omega. \quad (2.21)$$

Время релаксации зависит только от скорости электрона v (или его энергии \mathcal{E}) и механизма рассеяния. Из (2.20) и (2.21) следует, что

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{СТ}} = -\frac{f_1}{\tau} = -\frac{f - f_0}{\tau}. \quad (2.22)$$

Смысл времени релаксации можно выяснить, рассматривая установление статистического равновесия в однородной системе. Пусть в начальный момент времени $t = 0$ на систему, описываемую неравновесной функцией распределения f , перестали действовать внешние возмущения (поля выключили) и полевой член обращается в

нуль. В результате процессов соударения система перейдет в равновесное состояние, описываемое равновесной функцией распределения f_0 . Из (2.9) и (2.22) следует

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{СТ}} = \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau}. \quad (2.23)$$

Интегрируя последнее равенство, получим

$$(f - f_0) = (f - f_0)_{t=0} e^{-t/\tau}. \quad (2.24)$$

Из (2.24) видно, что τ есть время, в течение которого разность $(f - f_0)$ при выключении внешнего поля уменьшается в e раз. Так как стремление к равновесию в системе происходит в результате столкновений электронов с колебаниями решетки или дефектами кристалла и при этом достаточно нескольких столкновений, чтобы система пришла к равновесному состоянию, то время релаксации τ имеет порядок *времени свободного пробега* электрона. Тогда средняя длина свободного пробега λ может быть определена как

$$\lambda = v\tau. \quad (2.25)$$

Отметим, что введение времени релаксации существенно упрощает решение уравнения Больцмана. Такое описание справедливо в случаях, когда поправка к равновесной функции распределения $f_1 \ll f_0$, поэтому с точностью до величин первого порядка малости (т. е. f_1) можно в левую часть уравнения (2.10) подставить вместо f равновесную функцию f_0 . К примеру, при наличии только электрического поля \mathbf{E} (направлено по оси x) из (2.10) и (2.22) получим

$$f_1 = \frac{e}{m} E \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \tau = -eE \frac{f_0}{k_0 T} \tau v_x. \quad (2.26)$$

Видно, что f_1 действительно имеет вид (2.14).

Если известна функция распределения f , то можно найти любую макроскопическую величину, например плотность тока

$$\mathbf{j} = -e \int \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}) \mathbf{v} d^3v \quad (2.27)$$

или ее составляющую вдоль оси x

$$j_x = -e \int \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{v}, \mathbf{r}) v_x d^3v. \quad (2.28)$$

Поскольку $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}) = f_0(\mathcal{E}) + f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r})$, а $f_0(\mathcal{E})$ – четная функция v_x (зависит от v_x^2), то интеграл по dv_x от $f_0(\mathcal{E})v_x$ равен нулю и (2.28) имеет вид

$$j_x = -e \int \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r}) v_x d^3v.$$

Таким образом, если известно время релаксации τ , то функция f_1 при наличии только одного электрического поля определена (2.26), что позволяет найти плотность тока (2.27).

2.1.2. Время релаксации при рассеянии носителей тока на ионах 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. В настоящем параграфе в качестве примера вычислим время релаксации по формуле (2.21) для электронов (дырок), сталкивающихся (рассеивающихся) с примесными ионами, распределенными с постоянной средней плотностью по объему проводника (вычисление времен релаксации для других механизмов рассеяния можно найти в [1–2]). В соответствии с законами классической механики рассмотрим движение дырки в кулоновском поле донора с потенциальной энергией

$$U(r) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon r}. \quad (2.29)$$

Здесь e – элементарный заряд, ε_0 – электрическая постоянная, ε – диэлектрическая постоянная среды.

Можно показать, что дырка движется по гиперболе и ее «прицельное расстояние» b равно [5]

$$b = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon mv^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}, \quad (2.30)$$

где θ – угол рассеяния дырки (рис. 2.3). Выражение (2.30) справедливо и в случае рассеяния электрона на доноре, когда потенциальная энергия взаимодействия равна выражению (2.29) со знаком минус. Отметим, что в этом случае движение по гиперболе имеет место при условии, когда полная энергия электрона $mv^2/2 + U(r) > 0$.

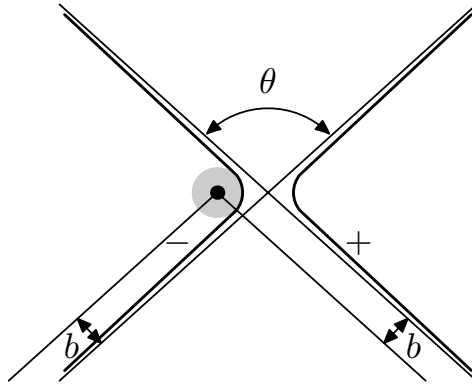


Рис. 2.3. Траектории дырки и электрона (правая и левая ветви гиперболы соответственно) при движении в кулоновском поле донора

Дифференциальное эффективное сечение рассеяния $\sigma(\theta)$ по определению равно

$$\sigma(\theta)d\Omega = \frac{dN_\theta}{N_0}, \quad (2.31)$$

где dN_θ – число электронов, отклоненных на угол θ в телесный угол $d\Omega$ в единицу времени, N_0 – число электронов, упавших на площадку единичной площади, перпендикулярную направлению движения за то же время. Дифференциальное эффективное сечение $\sigma(\theta)$ имеет размерность площади (м^2).

Все частицы, движущиеся параллельно оси x и падающие на кольцо площадью $2\pi b db$, отклоняются на угол θ в пределах телесного угла $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$, где связь между $|b|$ и $d\theta$ определяется из (2.30).

Из (2.31) следует, что

$$\sigma(\theta)2\pi \sin \theta d\theta = 2\pi b |db|. \quad (2.32)$$

Из (2.30) найдем db :

$$db = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon mv^2} \frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}} d\theta. \quad (2.33)$$

Из выражений (2.32), (2.30) и (2.33) получим формулу Резерфорда

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}, \quad (2.34)$$

используемую им при изучении рассеяния α -частиц на ядрах тяжелых элементов.

Определим интегральное сечение как

$$\sigma = \int \sigma(\theta) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin\theta d\theta, \quad (2.35)$$

т. е. как полное число частиц в расчете на единичную плотность потока падающих частиц.

Подставив в (2.35) дифференциальное сечение (2.31) и проинтегрировав, получим, что интегральное сечение σ равно бесконечности. В самом деле, интеграл по θ расходится на нижнем пределе при $\theta = 0$:

$$\int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{\sin^4(\theta/2)} = -\frac{2}{\sin^2(\theta/2)} \Big|_0^\pi = -2 + \infty = \infty.$$

Этот результат является специфической особенностью кулоновского потенциала (2.29) и обуславливается медленностью его убывания. Ниже будет сказано, каким образом устраняют подобную расходимость.

Установим связь между $\sigma(\theta)$ и вероятностью $W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$, которая при упругом рассеянии зависит от угла θ между скоростями \mathbf{v} и \mathbf{v}' и их абсолютными значениями. Пусть в объеме V имеется кулоновский центр и N электронов, движущихся по всем направлениям со скоростями v . В единицу времени (1 с) на этот центр упадет поток электронов, равный $(N/V)v$ (для электронов каждого направления выберем площадку единичной площади (1 м²), перпендикулярную направлению их движения). Полное число электронов, рассеянных в единицу времени (1 с) на угол между θ и $\theta + d\theta$, равно $(N/V)v\sigma(\theta)d\Omega$.

С другой стороны, это же число электронов равно $NW(\theta)d\Omega$. Таким образом,

$$W(\theta) = v\sigma(\theta)/V. \quad (2.36)$$

Видно, что правая часть (2.36) имеет размерность c^{-1} .

Подставив (2.36) в выражение (2.21) и заменяя $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$, получим

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi v}{V} \int \sigma(\theta)(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta. \quad (2.37)$$

Если в объеме имеется N независимо рассеивающих ионов, то

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi v n_I \int \sigma(\theta)(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad (2.38)$$

где $n_I = N_I/V$ – концентрация ионов.

Если в (2.38) подставить вместо $\sigma(\theta)$ выражение (2.34) и заменить $(1 - \cos \theta)$ и $\sin \theta$ соответственно на $2 \sin^2(\theta/2)$ и $2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2)$, то интеграл по θ будет иметь вид

$$\int_0^{\pi} \frac{(1 - \cos \theta) \sin \theta}{\sin^4(\theta/2)} d\theta = 8 \ln \left(\sin \frac{\theta}{2} \right) \Big|_0^{\pi} = 8(\ln 1 - \ln 0) = \infty,$$

т. е. логарифмически расходится на нижнем пределе при $\theta = 0$. Это обусловлено (так же как и для расходимости интегрального сечения σ) медленностью убывания кулоновского потенциала.

Расходимость выражения (2.38) может быть устранена, если в том или ином виде учесть поле, создаваемое остальными электронами проводимости, которые экранируют поля ионов и «обрезают» действие кулоновского потенциала. Самый простой подход состоит в следующем: сферу действия каждого рассеивающего центра ограничивают половиной среднего расстояния между ионами (более последовательный учет экранирования требует отказа от модели кулоновского потенциала и установления зависимости $U(r)$). Тогда наибольшее значение прицельного расстояния $b_{max} = n_I^{-1/3}/2$; а наименьшее значение угла θ_{min} определяется из формулы (2.30):

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta_{min}}{2} = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon m v^2}{n_I^{1/3} e^2}. \quad (2.39)$$

Из выражений (2.38) и (2.34) следует:

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi v n_I \left(\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon m v^2} \right)^2 \int_{\theta_{min}}^{\pi} \frac{(1 - \cos\theta) \sin\theta}{\sin^4(\theta/2)} d\theta.$$

Делая замену, аналогичную той, которая использовалась при вычислении интеграла (2.38) и учитывая равенство (2.39), получим

$$\frac{1}{\tau} = \frac{n_I e^4}{8\pi\varepsilon_0^2\varepsilon^2 m^2 v^3} \ln \left\{ 1 + \left[\frac{\varepsilon_0\varepsilon m v^2}{2e^2 n_I^{1/3}} \right]^2 \right\}. \quad (2.40)$$

Это выражение для времени релаксации τ при рассеянии носителей тока на ионах примеси часто называют *формулой Конвелл-Вейскопфа*.

Так как логарифм в (2.40) – медленно меняющаяся функция v , то практически время релаксации

$$\tau \sim v^3 \sim \mathcal{E}^{3/2}.$$

Используя выражения (2.40) и (2.26), можно по формуле (2.27) вычислить плотность тока, а следовательно, и удельную электропроводность.

2.2. Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в кристалле

В предыдущем параграфе предполагалось, что движение электронов подчиняется законам классической механики, поэтому их состояние описывалось в \mathbf{r} - и \mathbf{v} -пространствах и считалось, что

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{m} \mathbf{F}. \quad (2.41)$$

Последнее уравнение применимо и в квазиклассическом приближении, если энергия электрона $\mathcal{E} = \hbar^2 k^2 / 2m^* = m^* v^2 / 2$, где скорость $\mathbf{v} = \hbar \mathbf{k} / m^*$ (такая же, как в случае свободного электрона с импульсом $p = \hbar k$), k – волновой вектор.

Таким образом, если энергия электрона \mathcal{E} имеет приведенный выше вид, то применимы все формулы предыдущего параграфа при замене m на m^* .

В общем случае произвольного закона дисперсии \mathcal{E} скорость электрона в кристалле уже не равна $\hbar\mathbf{k}/m^*$, а определяется выражением [1–4]:

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (2.42)$$

(так называемая *групповая скорость волнового пакета*). Поэтому возникает вопрос: какой вид имеет уравнение Больцмана (2.10) в этом случае?

В квазиклассическом приближении мы не будем учитывать квантование энергии электрона (например, в магнитном поле) – квантовый характер задачи проявляется в своеобразии закона дисперсии $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ электронов проводимости и в их статистике. Между столкновениями электрон (по предположению) движется по классической траектории со скоростью (2.42). При квазиклассическом рассмотрении не учитываются межзонные переходы, вызванные внешними полями. Этот эффект имеет квантовую природу. Однако многозонный характер электронного энергетического спектра проявляется при суммировании по состояниям и при расчете вероятностей различных состояний. Последнее учитывается при конкретной формулировке интеграла столкновений.

Волновой вектор электрона, характеризующий его квантовое состояние, удовлетворяет в квазиклассическом приближении уравнению

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{F}. \quad (2.43)$$

Рассматривая электроны в \mathbf{r} и \mathbf{k} -пространстве, введем функцию распределения $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$, так что

$$2f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \frac{d^3k}{4\pi^3} \quad (2.44)$$

равно числу электронов в момент времени t в точке \mathbf{r} в единице объема (геометрического пространства) с составляющими волнового вектора от k_x до $k_x + dk_x$, от k_y до $k_y + dk_y$ и от k_z до $k_z + dk_z$ ($d^3k = dk_x dk_y dk_z$). Здесь учтено, что в соответствии с квантовой

статистикой число квантовых состояний в единице объема равно $d^3k/(2\pi)^3$, а также учтен принцип Паули, согласно которому в каждом квантовом состоянии могут находиться два электрона с противоположно направленными спинами.

В состоянии статистического равновесия электронный газ описывается функцией распределения Ферми–Дирака (1.1):

$$f_0(\mathbf{k}) = f_0(\mathcal{E}(\mathbf{k})) = \frac{1}{\exp\left\{\frac{\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mu}{k_0 T}\right\} + 1}. \quad (2.45)$$

Так как вместо соотношения (2.41) для электронов в кристалле в квазиклассическом приближении справедливо уравнение (2.43), то кинетическое уравнение (2.10), в случае когда на электрон действуют электрическое и магнитное поля \mathbf{E} и \mathbf{H} , имеет вид

$$\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + [\mathbf{v}\mathbf{B}]) \nabla_{\mathbf{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{СТ}}, \quad (2.46)$$

где \mathbf{v} определяется выражением (2.42). Столкновительный член $(\partial f / \partial t)_{\text{СТ}}$ может быть выражен аналогично тому, как это было сделано в предыдущем параграфе. Пусть $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ – вероятность электрону в единицу времени перейти из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' , тогда аналогично (2.8)

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{СТ}} = & \int \{ W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})] - \\ & - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')] \} \frac{d^3 k'}{4\pi^3}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

где учтен принцип Паули, т. е. вероятность перехода $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ положена пропорциональной $[1 - f(\mathbf{k}')]$ (вероятности того, что состояние \mathbf{k}' свободно).

Из принципа детального равновесия следует, что в статистическом равновесии потоки электронов $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ и обратный $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$ должны быть равны

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

Используя явный вид функции распределения Ферми–Дирака (2.45), получим

$$W(\mathbf{k}', \mathbf{k})e^{\mathcal{E}/k_0T} = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')e^{\mathcal{E}'/k_0T}. \quad (2.48)$$

При упругом рассеянии энергия электрона не меняется, т. е. $\mathcal{E} = \mathcal{E}'$ и

$$W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (2.49)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} &= \int \{W(\mathbf{k}', \mathbf{k})f(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')f(\mathbf{k})\} \frac{d^3k'}{4\pi^3} = \\ &= \int W(\mathbf{k}', \mathbf{k})\{f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})\} \frac{d^3k'}{4\pi^3}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

т. е. столкновительный член получается таким же, как и без учета принципа Паули. Это связано с тем, что при учете принципа Паули увеличивается на одну и ту же величину как число электронов, переходящих из состояния \mathbf{k} в \mathbf{k}' , так и обратно из \mathbf{k}' в \mathbf{k} .

Если отклонение от равновесия мало, неравновесная функция распределения может быть представлена в виде

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathcal{E}) + f_1(\mathbf{k}), \quad (2.51)$$

где $f_1(\mathbf{k})$ – неравновесная добавка, подлежащая определению. В следующей главе будет показано, что в случае сферически-симметричной зоны, когда энергия электронов \mathcal{E} зависит от абсолютной величины волнового вектора $k = |\mathbf{k}|$ и время релаксации τ зависит только от \mathcal{E} , функция $f_1(\mathbf{k})$ при наличии электрического и магнитного полей, а также градиента температуры имеет вид

$$f_1(\mathbf{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathcal{E}) \mathbf{k}, \quad (2.52)$$

где $\chi(\mathcal{E})$ – неизвестная векторная функция, зависящая от энергии электрона \mathcal{E} . Множитель $(\partial f_0/\partial \mathcal{E})$, тоже зависящий от энергии \mathcal{E} , введен для удобства выкладок.

Так как при упругом рассеянии $\mathcal{E} = \mathcal{E}'$, то

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k}) &= f_0(\mathcal{E}') - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}'} \chi(\mathcal{E}') \mathbf{k}' - f_0(\mathcal{E}) + \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathcal{E}) \mathbf{k} = \\
&= \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathcal{E}) \mathbf{k} \left[1 - \frac{k'_\chi}{k_\chi} \right] = f_1(\mathbf{k}) \frac{\Delta k_\chi}{k_\chi}, \tag{2.53}
\end{aligned}$$

где k_χ – проекция \mathbf{k} на вектор χ , а $\Delta k_\chi = k'_\chi - k_\chi$.
Из (2.50) и (2.53) следует:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{СТ}} = -f_1(\mathbf{k}) \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[1 - \frac{k'_\chi}{k_\chi} \right] \frac{d^3 k'}{4\pi^3}. \tag{2.54}$$

Аналогично предыдущей главе введем время релаксации τ :

$$\frac{1}{\tau} = \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[1 - \frac{k'_\chi}{k_\chi} \right] \frac{d^3 k'}{4\pi^3} = - \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta k_\chi}{k_\chi} \frac{d^3 k'}{4\pi^3}, \tag{2.55}$$

тогда (2.54) можно записать в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{СТ}} = - \frac{f_1(\mathbf{k})}{\tau} = - \frac{f - f_0}{\tau}. \tag{2.56}$$

Напомним, что выражение (2.55) для времени релаксации справедливо при выполнении следующих условий: малости отклонения от равновесия ($|f_1| = |f - f_0| \ll |f_0|$), изотропности энергии \mathcal{E} и рассеяния (2.49), а также упругости рассеяния $\mathcal{E} = \mathcal{E}'$. В тех случаях, когда одновременно выполняются эти условия, нахождение неравновесной функции распределения сводится к двум самостоятельным задачам: вычислению $\tau(k)$ из (2.55) и решению кинетического уравнения (2.46).

Если поверхности постоянной энергии электрона $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \text{const}$ не сферы, а эллипсоиды, то, строго говоря, необходимо учитывать анизотропию в рассеянии электронов. В этом случае время релаксации τ не скаляр, а тензор 2-го ранга (если его вообще можно ввести).

В случае сложного закона дисперсии $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ время релаксации вообще не удастся ввести, тогда теория кинетических явлений становится очень сложной.

2.3. Условия применимости кинетического уравнения

Из определения неравновесной функции распределения $f(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ и из вывода уравнения Больцмана (2.46) следует, что оно справедливо только в квазиклассическом случае, когда имеет место понятие траектории. Условие квазиклассичности [4] налагает ограничение на обобщенную силу – градиент электрохимического потенциала $-\nabla(\varphi - \mu/e)$, а также на величину индукции магнитного поля B и определяет предел применимости кинетического уравнения. Рассмотрим подробнее этот вопрос.

Из условия квазиклассичности следует, что свойства свободной системы могут быть рассмотрены в рамках классической механики, если длина волны частицы Λ_d мала по сравнению с характерными линейными размерами данной задачи L , т. е. $\Lambda_d \ll L$.

Если система не свободна, а на нее действует некоторая сила F , то условие квазиклассичности имеет вид [4]

$$\frac{\Lambda_d}{2\pi} \left| \frac{d\Lambda_d}{dx} \right| \ll \Lambda_d, \quad (2.57)$$

т. е. длина волны электрона Λ_d должна мало меняться на протяжении расстояний порядка ее самой.

Учитывая, что в случае простой сферически-симметричной зоны $p = \hbar k$, а $\Lambda_d = \hbar/p$, где p – импульс электрона, условие квазиклассичности может быть записано в виде

$$\frac{m^* \hbar}{p^3} |F| \ll 1, \quad (2.58)$$

здесь F – сила, действующая на электрон.

В общем случае, когда имеются динамическое (электрическое поле) и статическое (градиент температуры или концентрации) возмущения, сила F определяется градиентом электрохимического потенциала:

$$F = e\nabla(\varphi - \mu/e). \quad (2.59)$$

С учетом соотношений $\hbar/p = \Lambda_d$ и $p^2 \approx m^* \bar{\mathcal{E}}$ (2.58) переходит в условие применимости кинетического уравнения в общем виде

$$\Lambda_d |F| \ll \bar{\mathcal{E}}, \quad (2.60)$$

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

Из (2.60) для электрического поля E получим условие

$$eE\Lambda_d \ll \bar{\mathcal{E}}, \quad (2.61)$$

при котором применимо уравнение Больцмана. В невырожденных полупроводниках $\bar{\mathcal{E}} \approx k_0 T$, а в вырожденных полупроводниках $\bar{\mathcal{E}} \approx \mu_0$ (см.(1.9) и прил. 1). При $T = 100K$ и $\Lambda_d = 10^{-7}$ см для невырожденных полупроводников из (2.61) получим $E \ll 10^5$ В/см. Таким образом, кинетическое уравнение справедливо вплоть до очень сильных электрических полей.

Условие (2.60) с учетом (2.59) в случае неоднородных полупроводников определяет также и градиент химического потенциала

$$\frac{\partial \mu}{\partial x} \Lambda_d \ll \bar{\mathcal{E}}, \quad (2.62)$$

при котором справедливо кинетическое уравнение. Если неоднородность связана с наличием градиента температуры, то (2.62) имеет вид

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} \Lambda_d \nabla T \ll \bar{\mathcal{E}}. \quad (2.63)$$

Находя $\partial \mu / \partial T$ из (1.14) и (1.9), соответственно получим для невырожденного электронного газа

$$\left| \frac{\mu}{k_0 T} - \frac{3}{2} \right| \Lambda_d |\nabla T| \ll T \quad (2.64)$$

и для вырожденного электронного газа

$$\frac{k_0 T}{\mu_0} \Lambda_d |\nabla T| \ll T_0, \quad (2.65)$$

где $T_0 = \mu_0 / k_0$ – температура вырождения электронного газа. Условия, аналогичные (2.64)–(2.65), из (2.63) можно получить также и для градиента концентрации ∇n .

Теперь рассмотрим ограничения, налагаемые на величину индукции магнитного поля B , для применения кинетического уравнения. В однородном магнитном поле электрон, как известно, движется под действием силы $F = ev_{\perp}B$ по винтовой траектории с осью, параллельной магнитному полю, и радиусом круговой орбиты

$$R_0 = \frac{v_{\perp}}{\omega_c}, \quad (2.66)$$

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

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \quad (2.67)$$

есть циклическая частота вращения электрона в этой плоскости, которую называют циклотронной частотой.

Подставляя силу $F = ev_{\perp}B$ в общее условие (2.60) и учитывая $\Lambda_d \approx \hbar/m^*v_{\perp}$, получим критерий применимости кинетического уравнения в магнитном поле для невырожденных полупроводников

$$\hbar\omega_c \ll k_0T \quad \text{или} \quad \frac{e\hbar B}{m^*} \ll k_0T \quad (2.68)$$

и для вырожденных полупроводников

$$\hbar\omega_c \ll \mu_0 \quad \text{или} \quad \frac{e\hbar B}{m^*} \ll \mu_0. \quad (2.69)$$

Учитывая (2.66), легко показать, что эти условия могут быть переписаны в виде

$$R_0 \gg \Lambda_d. \quad (2.70)$$

В случае вырожденных полупроводников в (2.70) Λ_d следует заменить длиной волны для электронов на поверхности Ферми

$$\Lambda_0 \approx \frac{\hbar}{m^*v_0}.$$

Последнее неравенство является условием квазиклассичности: кинетическое уравнение применимо в магнитных полях, если длина волны много меньше радиуса циклотронной орбиты электрона R_0 .

Квантовомеханическое рассмотрение движения носителей заряда в магнитном поле показывает, что их движение в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, квантуется, причем

энергетическое расстояние между соседними дискретными уровнями (уровнями Ландау) равно $\hbar\omega_c$ [1, 4]. В магнитных полях, удовлетворяющих (2.68) или (2.69), квантование спектра становится несущественным. Такие магнитные поля называются 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 (2.68) и (2.69) могут не выполняться, а иметь место $\hbar\omega_c \geq k_0T$ или $\hbar\omega_c \geq \mu_0$, 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.

Имеется еще одно условие, ограничивающее область применимости кинетического уравнения (2.46), связанное с процессом рассеяния носителей заряда на различных дефектах решетки. Если через Δt обозначить продолжительность рассеяния (время столкновения с дефектами), то, согласно принципу неопределенности ($\Delta\mathcal{E}\Delta t \geq \hbar$), в энергии появляется неопределенность $\Delta\mathcal{E} \geq \hbar/\Delta t$. Пользоваться функцией распределения, которая должна сильно меняться в интервале энергий порядка k_0T , можно только в том случае, если $\Delta\mathcal{E} < k_0T$. 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 интеграла столкновений (2.54) предполагается, что взаимодействие носителей заряда 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). В результате приходим к неравенству

$$\tau \gg \frac{\hbar}{k_0T}, \quad (2.71)$$

которое есть условие малости продолжительности столкновения по сравнению со временем между двумя последовательными столкно-

вениями.

Поскольку подвижность электронов $\mu_n = e\tau/m^*$, то критерий (2.71) можно представить в следующем виде:

$$\mu_n \gg \frac{e\hbar}{m^*k_0T}. \quad (2.72)$$

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

Критерий (2.71) можно записать и в другом виде. Если умножить обе части (2.71) на среднюю скорость носителей заряда \bar{v} и учесть, что $k_0T/\bar{v} = \bar{p}$, а $\hbar/\bar{p} \approx \Lambda_d$, то получим

$$\bar{\lambda} \gg \Lambda_d, \quad (2.73)$$

где $\bar{\lambda} = \bar{v}\bar{\tau}$ – средняя длина свободного пробега электронов (2.25).

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

3. Кинетические процессы (явления переноса) в полупроводниках

Практическое применение полупроводников основано на использовании их в качестве проводников электронного и дырочного токов, т. е. на явлениях переноса. В современных установках, использующих полупроводниковые материалы, наряду с электрическими и магнитными полями широко применяются градиенты температуры и градиенты концентрации носителей заряда. Это обуславливает практическую потребность изучения всех разнообразных кинетических процессов: электро- и теплопроводности, гальваномангнитных и термоэлектрических явлений и т. д.

При изучении кинетических явлений возникает большое число разнообразных случаев. Основные из них связаны с тем, что:

1) велико число самих эффектов, поэтому мы рассмотрим только главнейшие из них (электропроводность, эффект Холла, магнетосопротивление, термоэлектродвижущая сила, эффекты Томсона и Пельтье);

2) возможно наличие нескольких сортов носителей заряда (электроны, дырки, тяжелые и легкие дырки);

3) существуют различные механизмы рассеяния носителей заряда: колебания атомной решетки, ионизованные и нейтральные примеси, колебания ионной решетки и т. д.;

4) при описании явлений переноса необходимо различать случаи вырожденного и невырожденного состояний электронного газа;

5) большое значение имеет характер зависимости энергии электрона (дырки) от волнового вектора \mathbf{k} (поверхности постоянной энергии могут быть сферами, эллипсоидами, гофрированными поверхностями и т. д.).

Мы ограничимся рассмотрением наиболее простого случая невырожденных полупроводников со сферически-симметричной зонной структурой.

3.1. Определение неравновесной функции распределения для электронов проводимости в случае сферически-симметричной зоны

В случае сферически-симметричной зоны энергия электрона

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(k) \quad (3.1)$$

зависит от абсолютной величины волнового вектора $k = |\mathbf{k}|$, т. е. поверхности постоянной энергии являются сферами.

Скорость электрона при произвольном законе дисперсии определяется выражением (2.42). В нашем случае эта формула преобразуется к виду

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}(k)}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}(k)}{\partial k} \frac{\mathbf{k}}{k} = u(k) \mathbf{k}, \quad (3.2)$$

где

$$u(k) = \frac{1}{\hbar k} \frac{\partial \mathcal{E}(k)}{\partial k}. \quad (3.3)$$

Таким образом, в этом случае $\mathbf{v} \parallel \mathbf{k}$. Положим в соответствии с выражениями (2.51) и (2.52) неравновесную функцию распределения в виде

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathcal{E}) + f_1(\mathbf{k}), \quad f_1(\mathbf{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \chi(\mathcal{E}) \mathbf{k}, \quad (3.4)$$

где равновесная функция распределения Ферми–Дирака $f_0(\mathcal{E})$ определяется формулой (1.1).

Мы будем рассматривать случай невырожденного электронного газа, который реализуется при условии $\exp(-\mu/k_0T) \gg 1$ (т. е. химический потенциал $\mu < 0$). В этом случае функция распределения

$$f_0(\mathcal{E}) = \frac{1}{\exp\left\{\frac{\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mu}{k_0T}\right\} + 1} \approx e^{-(\mathcal{E} - \mu)/k_0T} = A e^{-\mathcal{E}/k_0T}, \quad (3.5)$$

т. е. переходит в классическое распределение Максвелла–Больцмана с нормировочной константой $A = \exp(\mu/k_0T)$. Отметим, что применению классической статистики способствует малая концентрация

электронов n , высокая температура T и большая эффективная масса m^* . Для $n \approx 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $m^* \approx 10^{-27} \text{ г}$ при комнатной температуре $\exp(-\mu/k_0T) \approx 300$, т. е. условие невырождения выполняется с избытком.

Неравновесную добавку $f_1(\mathbf{k})$ определим из кинетического уравнения в приближении времени релаксации τ (см. (2.46), (2.56)):

$$\mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}f - \frac{e}{\hbar}(\mathbf{E} + [\mathbf{v}\mathbf{B}])\nabla_{\mathbf{k}}f = -\frac{f_1(\mathbf{k})}{\tau}. \quad (3.6)$$

Кинетическое уравнение будем решать в линейном по внешнему полю \mathbf{E} и градиенту температуры ∇T приближении. Для этого в левую часть уравнения подставим $f \approx f_0$ везде, кроме члена, содержащего магнитное поле \mathbf{B} (так как в приближении $f \approx f_0$ слагаемое, содержащее магнитное поле, исчезает). Таким образом,

$$\nabla_{\mathbf{r}}f \approx \nabla_{\mathbf{r}}f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial T}\nabla T + \frac{\partial f_0}{\partial \mu}\nabla \mu = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\left(\frac{\mu - \mathcal{E}}{T}\nabla T - \nabla \mu\right), \quad (3.7)$$

где учтено, что имеет место локальное термодинамическое равновесие, т. е. $T = T(\mathbf{r})$ и $\mu = \mu(\mathbf{r})$.

Покажем, что в приближении $f \approx f_0$ слагаемое, содержащее магнитное поле, обращается в нуль:

$$\nabla_{\mathbf{k}}f \approx \nabla_{\mathbf{k}}f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\hbar\mathbf{v}, \quad (3.8)$$

тогда

$$[\mathbf{v}\mathbf{B}]\nabla_{\mathbf{k}}f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\hbar[\mathbf{v}\mathbf{B}]\mathbf{v} = 0,$$

так как $[\mathbf{v}\mathbf{B}]\mathbf{v} = [\mathbf{v}\mathbf{v}]\mathbf{B} \equiv 0$.

Таким образом, чтобы учесть магнитное поле \mathbf{B} в кинетическом уравнении (3.6), нужно вычислить $\nabla_{\mathbf{k}}f$ в следующем приближении:

$$\nabla_{\mathbf{k}}f = \nabla_{\mathbf{k}}\left[f_0 - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\chi(\mathcal{E})\mathbf{k}\right] = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\hbar\mathbf{v} - (\chi\mathbf{k})\nabla_{\mathbf{k}}\left(\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\nabla_{\mathbf{k}}(\chi\mathbf{k}). \quad (3.9)$$

Так как

$$\nabla_{\mathbf{k}}\left(\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right) = \left(\frac{\partial^2 f_0}{\partial \mathcal{E}^2}\right)\nabla_{\mathbf{k}}\mathcal{E} = \left(\frac{\partial^2 f_0}{\partial \mathcal{E}^2}\right)\hbar\mathbf{v}, \quad (3.10)$$

то в (3.9) не только первое, но и второе слагаемое обращается в нуль при умножении на $[\mathbf{v}\mathbf{B}]$.

Для определения третьего слагаемого и правой части (3.9) вычислим составляющую $\nabla_{\mathbf{k}}(\chi\mathbf{k})$ по оси k_x :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial k_x}(\chi\mathbf{k}) &= \frac{\partial}{\partial k_x}(k_x\chi_x + k_y\chi_y + k_z\chi_z) = \chi_x + \left(k_x \frac{\partial\chi_x}{\partial k_x} + k_y \frac{\partial\chi_y}{\partial k_x} + k_z \frac{\partial\chi_z}{\partial k_x}\right) = \\ &= \chi_x + \left(k_x \frac{\partial\chi_x}{\partial\mathcal{E}} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial k_x} + k_y \frac{\partial\chi_y}{\partial\mathcal{E}} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial k_x} + k_z \frac{\partial\chi_z}{\partial\mathcal{E}} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial k_x}\right) = \\ &= \chi_x + \left(k_x \frac{\partial\chi_x}{\partial\mathcal{E}} + k_y \frac{\partial\chi_y}{\partial\mathcal{E}} + k_z \frac{\partial\chi_z}{\partial\mathcal{E}}\right) \hbar v_x.\end{aligned}$$

Таким образом,

$$\nabla_{\mathbf{k}}(\chi\mathbf{k}) = \chi + \left(k_x \frac{\partial\chi_x}{\partial\mathcal{E}} + k_y \frac{\partial\chi_y}{\partial\mathcal{E}} + k_z \frac{\partial\chi_z}{\partial\mathcal{E}}\right) \hbar \mathbf{v}. \quad (3.11)$$

Второе слагаемое в (3.11) аналогично предыдущему случаю при умножении на $[\mathbf{v}\mathbf{B}]$ дает ноль.

Подставляя (3.7)–(3.11) в (3.6) с учетом выражения (3.4) для $f_1(\mathbf{k})$ и соотношения $\mathbf{k} = \mathbf{v}/u(k)$, следующего из (3.2), получим

$$\frac{\partial f_0}{\partial\mathcal{E}} \left\{ \frac{\mu - \mathcal{E}}{T} \nabla T - \nabla\mu - e\mathbf{E} - \frac{e}{\hbar} [\mathbf{B}\chi] \right\} \mathbf{v} = \frac{1}{\tau(\mathcal{E})} \left(\frac{\partial f_0}{\partial\mathcal{E}} \right) \frac{1}{u(k)} \chi \mathbf{v}. \quad (3.12)$$

В левой части учтено циклическое свойство смешанного произведения $[\mathbf{v}\mathbf{H}]\chi = [\mathbf{H}\chi]\mathbf{v}$.

Так как \mathbf{v} произвольно, то из (3.12) для электронов проводимости, учитывая, что $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ (где $\varphi(\mathbf{r})$ – электростатический потенциал), получим

$$\chi_n(\mathcal{E}) = -\tau_n(\mathcal{E})u_n(k) \left\{ \frac{\mathcal{E} - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) - \frac{e}{\hbar} [\mathbf{B}\chi_n] \right\}. \quad (3.13)$$

Здесь и далее индекс n отмечает, что соответствующие величины относятся к электронам проводимости.

Поведение дырок со статистической точки зрения вполне эквивалентно поведению электронов, если приписать им энергию \mathcal{E}' и химический потенциал μ' :

$$\mathcal{E}' = \mathcal{E}'(k'), \quad (3.14)$$

$$\mu' = -\mathcal{E}_G - \mu, \quad (3.15)$$

где \mathcal{E}_G – ширина запрещенной зоны. Ранее мы условились все энергии отсчитывать от нулевого уровня, совпадающего с нижним краем зоны проводимости, поэтому для дырок (соответствующие величины обозначены индексом p) вместо (3.13) получим

$$\chi_p(\mathcal{E}') = -\tau_p(\mathcal{E}')u_p(k') \left\{ \frac{\mathcal{E}' + \mathcal{E}_G + \mu}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) + \frac{e}{\hbar} [\mathbf{B}\chi_p] \right\}, \quad (3.16)$$

здесь по сравнению с (3.13) для положительных дырок изменен знак заряда.

Если магнитное поле отсутствует, то выражения (3.13) и (3.16) непосредственно определяют χ_n и χ_p , при наличии магнитного поля соответствующие выражения должны быть решены относительно χ_n и χ_p . Определение χ_n и χ_p сводится к решению векторного уравнения вида

$$\mathbf{x} = \mathbf{a} + [\mathbf{b}\mathbf{x}]. \quad (3.17)$$

Умножим (3.17) на \mathbf{b} скалярно:

$$(\mathbf{b}\mathbf{x}) = (\mathbf{b}\mathbf{a}) + \mathbf{b}[\mathbf{b}\mathbf{x}] = (\mathbf{b}\mathbf{a}). \quad (3.18)$$

Теперь умножим (3.17) на \mathbf{b} векторно:

$$\begin{aligned} [\mathbf{b}\mathbf{x}] &= [\mathbf{b}\mathbf{a}] + [\mathbf{b}[\mathbf{b}\mathbf{x}]] = [\mathbf{b}\mathbf{a}] + \mathbf{b}(\mathbf{b}\mathbf{x}) - \mathbf{x}(\mathbf{b}\mathbf{b}) = \\ &= [\mathbf{b}\mathbf{a}] + \mathbf{b}(\mathbf{b}\mathbf{a}) - \mathbf{x}b^2, \end{aligned} \quad (3.19)$$

здесь раскрыто двойное векторное произведение и учтено (3.18). Выражение (3.19) подставим в (3.17) и выразим \mathbf{x} :

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{a} + [\mathbf{b}\mathbf{a}] + \mathbf{b}(\mathbf{b}\mathbf{a})}{1 + b^2}. \quad (3.20)$$

Если использовать (3.20), то векторные функции χ_n и χ_p будут

определяться выражениями:

$$\begin{aligned} \chi_n = & -\tau_n u_n \times \\ & \times \frac{\left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right\} + \frac{e\tau_n u_n}{\hbar} \left[\mathbf{B} \left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right\} \right]}{1 + \left(\frac{e\tau_n u_n}{\hbar} \mathbf{B} \right)^2} + \\ & + \frac{\left(\frac{e\tau_n u_n}{\hbar} \right)^2 \left(\left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right\} \mathbf{B} \right) \mathbf{B}}{1 + \left(\frac{e\tau_n u_n}{\hbar} \mathbf{B} \right)^2}, \quad (3.21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_p = & -\tau_p u_p \times \\ & \times \frac{\left\{ \frac{\varepsilon' + \varepsilon_G + \mu}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right\} - \frac{e\tau_p u_p}{\hbar} \left[\mathbf{B} \left\{ \frac{\varepsilon' + \varepsilon_G + \mu}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right\} \right]}{1 + \left(\frac{e\tau_p u_p}{\hbar} \mathbf{B} \right)^2} + \\ & + \frac{\left(\frac{e\tau_p u_p}{\hbar} \right)^2 \left(\left\{ \frac{\varepsilon' + \varepsilon_G + \mu}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right\} \mathbf{B} \right) \mathbf{B}}{1 + \left(\frac{e\tau_p u_p}{\hbar} \mathbf{B} \right)^2}. \quad (3.22) \end{aligned}$$

Эти сложные выражения значительно упрощаются в частных случаях, например когда магнитное поле \mathbf{B} равно нулю или когда градиент температуры $\nabla T = 0$ и т. п.

3.2. Электрический ток в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой

Число электронов в момент времени t в точке \mathbf{r} в единице объема кристалла с составляющими волнового вектора от k_x до $k_x + dk_x$, от k_y до $k_y + dk_y$ и от k_z до $k_z + dk_z$ ($d^3k = dk_x dk_y dk_z$) с учетом принципа Паули (см. (2.44)) равно:

$$dn = 2f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \frac{d^3k}{4\pi^3}. \quad (3.23)$$

Эти электроны, двигаясь со скоростью \mathbf{v} , создают плотность тока:

$$d\mathbf{j} = -e\mathbf{v}f(\mathbf{k}) \frac{d^3k}{4\pi^3}. \quad (3.24)$$

Если в полупроводнике имеются два типа носителей заряда, то полная плотность тока является суммой электронной и дырочной составляющих:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p = -\frac{e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}_n f^{(n)}(\mathbf{k}) d^3k + \frac{e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}_p f^{(p)}(\mathbf{k}') d^3k'. \quad (3.25)$$

Здесь индексы n и p , как обычно, отмечают величины, относящиеся к электронам и дыркам соответственно. Интегралы в (3.25) берутся, строго говоря, по одной зоне Бриллюэна (зоне проводимости для электронов и валентной зоне для дырок). Однако, в силу быстрого убывания функции распределения с увеличением энергии электрона, часто бывает возможно распространить их на все бесконечное \mathbf{k} - или \mathbf{k}' -пространство.

Отметим, что если в (3.25) подставить равновесную функцию распределения $f_0(\mathcal{E})$ (1.1), то аналогично (2.27) для электронной составляющей тока получим

$$\mathbf{j}_n = -\frac{e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}_n f_0(\mathbf{k}) d^3k = 0, \quad (3.26)$$

так как $f_0(\mathcal{E}(k))$ – четная функция k_x , а произведение $v_x f_0(\mathcal{E}) = u_n(k) k_x f_0(\mathcal{E})$ – нечетная функция (3.3), интегрирование которой в симметричных пределах дает нуль. Дырочная составляющая тока по той же причине равна нулю. Таким образом $\mathbf{j} = 0$, это означает, что при термодинамическом равновесии в веществе тока нет.

Будем считать, что неравновесная функция распределения имеет вид (3.4), тогда электронная составляющая плотности тока (3.35) равна

$$\mathbf{j}_n = -\frac{e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}_n f_1^{(n)}(\mathbf{k}) d^3k = -\frac{e}{4\pi^3} \int \left[-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} u_n(k) \right] (\chi_n \mathbf{k}) \mathbf{k} d^3k, \quad (3.27)$$

где учтено соотношение (3.3), а векторная функция χ_n определяется выражением (3.21).

Интеграл, стоящий в (3.27) в сферических координатах (полярная ось $z \parallel \chi_n$), равен

$$\int \left[-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} u_n(k) \right] \chi_n k \cos \theta \times \\ \times \{ \mathbf{i}_0 k \sin \theta \cos \varphi + \mathbf{j}_0 k \sin \theta \sin \varphi + \mathbf{k}_0 k \cos \theta \} k^2 dk \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Здесь $\mathbf{i}_0, \mathbf{j}_0, \mathbf{k}_0$ – единичные векторы, направленные вдоль осей x, y, z . При интегрировании по φ от 0 до 2π первое и второе слагаемые в фигурных скобках дают нуль, поэтому интегрирование по φ и θ дает

$$\int_0^{2\varphi} d\varphi \int_0^{\varphi} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{4\pi}{3}.$$

Таким образом, для плотности тока (3.27) получим

$$\mathbf{j}_n = -\frac{e}{3\pi^2} \int_0^{\infty} \left[-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} u_n(k) \right] \chi_n(k) k^4 dk. \quad (3.28)$$

Для тока, создаваемого дырками, в этом выражении надо заменить $-e$ на e , f_0 – на равновесную функцию распределения дырок и χ_n на χ_p (3.22).

В случае простой зоны энергия электрона имеет вид

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}, \quad (3.29)$$

поэтому, как это следует из (3.3),

$$u_n = \frac{1}{\hbar k} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} = \frac{\hbar}{m_n^*} \quad (3.30)$$

и аналогично для дырок.

Отметим, что (3.29) и (3.30) справедливо, когда $\mathcal{E}(k)$ – однородная квадратичная функция составляющих волнового вектора k_x, k_y, k_z . Для сферической энергетической зоны, рассмотренной в предыдущем параграфе, может возникать и более сложная ситуация: в случае нестандартной сферической зоны энергия электронов $\mathcal{E}(k)$ зависит от абсолютной величины волнового вектора \mathbf{k} , а в

остальном произвольна. Тогда нужно пользоваться соотношениями (3.2) и (3.3).

Для электронов с учетом (3.30) положим

$$\chi_n = -\frac{\hbar e}{m_n^*} \chi_n^*, \quad (3.31)$$

где χ_n равно (3.21), тогда

$$\chi_n^* = \frac{\tau_n \mathbf{P}_n + \gamma_n \tau_n^2 [\mathbf{B} \mathbf{P}_n] + \gamma_n^2 \tau_n^3 (\mathbf{B} \mathbf{P}_n) \mathbf{B}}{1 + (\gamma_n \tau_n B)^2}, \quad (3.32)$$

где введены обозначения

$$\mathbf{P}_n = \frac{\mathcal{E} - \mu}{eT} \nabla T + \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) \quad (3.33)$$

и

$$\gamma_n = \frac{e}{m_n^*}. \quad (3.34)$$

Равновесная концентрация электронов в зоне проводимости для невырожденного полупроводника с простой зонной структурой согласно формуле (1.12) равна

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{4\pi^3} \int e^{-(\mathcal{E}-\mu)/k_0 T} d^3 k = \frac{1}{4\pi^3} e^{\mu/k_0 T} \int_0^\infty e^{-\hbar^2 k^2 / (2m_n^* k_0 T)} 4\pi k^2 dk = \\ &= N_n e^{\mu/k_0 T}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Здесь введена эффективная плотность состояний N_n в зоне проводимости, равная

$$N_n = 2 \left(\frac{m_n^* k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (3.36)$$

Вычислим электрический ток, создаваемый «полем» χ_n , равным (3.31). Для невырожденного полупроводника, как это следует из (3.5), с учетом (3.35) производная функции Ферми–Дирака имеет вид

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} = -\frac{1}{k_0 T} e^{-(\mathcal{E}-\mu)/k_0 T} = -\frac{1}{k_0 T} \frac{n}{N_n} e^{-\mathcal{E}/k_0 T}. \quad (3.37)$$

Подставим это выражение в интеграл (3.28), переходя в нем посредством (3.29) от переменной интегрирования k к $x = \mathcal{E}/k_0T$, и тогда, учитывая (3.30), (3.36) и (3.37), получим

$$\mathbf{j}_n = \frac{ne^2}{m_n^*} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \chi_n^* e^{-x} x^{3/2} dx. \quad (3.38)$$

Удобно ввести следующий символ усреднения:

$$\langle \chi_n^* \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \chi_n^* e^{-x} x^{3/2} dx. \quad (3.39)$$

Если $\mathbf{g} = const$, то

$$\langle \mathbf{g} \rangle = \mathbf{g} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{3/2} dx = \mathbf{g} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \mathbf{g}, \quad (3.40)$$

где было использовано свойство Γ -функции:

$$\Gamma\left(\frac{2m+1}{2}\right) = \frac{(2m-1)!!}{2^m} \sqrt{\pi}, \quad (3.41)$$

где $m=1, 2, 3, \dots$ – целое число. Таким образом, плотность тока представим в виде

$$\mathbf{j}_n = \frac{ne^2}{m_n^*} \langle \chi_n^* \rangle. \quad (3.42)$$

Электрический ток, обусловленный дырками, вычисляется аналогично. Если ввести для дырок вектор χ_p^* , связанный с χ_p (3.22) соотношением

$$\chi_p = \frac{\hbar e}{m_p^*} \chi_p^*, \quad (3.43)$$

то

$$\chi_p^* = \frac{\tau_p \mathbf{P}_p - \gamma_p \tau_p^2 [\mathbf{B} \mathbf{P}_p] + \gamma_p^2 \tau_p^3 (\mathbf{B} \mathbf{P}_p) \mathbf{B}}{1 + (\gamma_p \tau_p B)^2}, \quad (3.44)$$

где введены обозначения

$$\mathbf{P}_p = -\frac{\mathcal{E}' + \mathcal{E}_G + \mu}{eT} \nabla T + \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) \quad (3.45)$$

и

$$\gamma_p = \frac{e}{m_p^*}. \quad (3.46)$$

Так как для дырок интеграл (3.28) имеет противоположный знак, а связь между χ_p и χ_p^* (3.43) не содержит знак минус, подобно (3.31), то плотность тока аналогично (3.42) имеет вид

$$\mathbf{j}_p = \frac{pe^2}{m_p^*} \langle \chi_p^* \rangle, \quad (3.47)$$

где p – равновесная концентрация дырок для невырожденного полупроводника с простой зонной структурой, которая вычисляется через функцию распределения дырок аналогично интегралу (3.35) с учетом (3.14), (3.15) и имеет вид

$$p = 2 \left(\frac{m_p^* k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(\mathcal{E}_G + \mu)/k_0 T} = N_p e^{-(\mathcal{E}_G + \mu)/k_0 T}, \quad (3.48)$$

где

$$N_p = 2 \left(\frac{m_p^* k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (3.49)$$

Общий ток, обусловленный электронами и дырками, равен

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p = \frac{ne^2}{m_n^*} \langle \chi_n^* \rangle + \frac{pe^2}{m_p^*} \langle \chi_p^* \rangle, \quad (3.50)$$

где χ_n^* и χ_p^* равны (3.32) и (3.44) соответственно.

3.3. Электропроводность невырожденных полупроводников с простой зонной структурой

Рассмотрим электрический ток в однородном электронном полупроводнике в отсутствие градиента температуры и магнитного поля ($\nabla T = 0$, $\nabla \mu = 0$, $\mathbf{B} = 0$). В этом случае

$$\chi_n^* = \tau_n \mathbf{P}_n = \tau_n (-\nabla \phi) = \tau_n \mathbf{E}, \quad (3.51)$$

где \mathbf{E} – напряженность электрического поля. Из (3.42) и (3.51) следует, что

$$\mathbf{j}_n = \frac{ne^2}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle \mathbf{E} = \sigma_n \mathbf{E}, \quad (3.52)$$

где σ_n – удельная электропроводность. Отсюда следует, что подвижность электронов μ_n имеет вид

$$\mu_n = \frac{\sigma_n}{en} = \frac{e}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle. \quad (3.53)$$

Таким образом, для вычисления электропроводности и подвижности носителей заряда необходимо знать время релаксации τ_n (2.55), которое определяется механизмом рассеяния носителей заряда. Время релаксации при рассеянии носителей заряда на ионах примеси было получено в разделе 2.1.1. Вычисление времени релаксации для других механизмов рассеяния в случае простой зоны можно найти в литературе [1, 2].

Если время релаксации τ_n от энергии \mathcal{E} не зависит, как это имеет место, например, в ионных полупроводниках при низких температурах [2], то символ усреднения в соответствии с (3.40) можно опустить, тогда

$$\sigma_n = \frac{ne^2}{m_n^*} \tau_n, \quad (3.54)$$

$$\mu_n = \frac{e}{m_n^*} \tau_n. \quad (3.55)$$

Если ввести среднюю дрейфовую скорость носителей тока $\mathbf{v}_{др}$, положив по определению

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} = en \mathbf{v}_{др},$$

то из сравнения с (3.53) следует

$$\mu = v_{др} / E,$$

т. е. подвижность численно равна дрейфовой скорости (но имеет другую размерность) при напряженности электрического поля E , равной единице.

В [2] показано, что в ряде механизмов рассеяния время релаксации зависит от энергии по степенному закону, где показатель степени r имеет различные значения для разных механизмов рассеяния:

$$\tau_n = a\mathcal{E}^r = a(k_0T)^r x^r = \tau_0 x^r, \quad (3.56)$$

где $x = \mathcal{E}/(k_0T)$, параметр $\tau_0 = a(k_0T)^r$ – от энергии не зависит. Тогда из (3.56) и (3.39) следует

$$\langle \tau_n \rangle = \tau_0 \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{5}{2} + r\right), \quad (3.57)$$

где использована Γ -функция, которая определяется равенством

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} x^{z-1} e^{-x} dx. \quad (3.58)$$

Из [2] следует, что для различных механизмов рассеяния электронов время релаксации имеет следующий вид:

а) при расейнии на акустических колебаниях в атомном полупроводнике

$$\tau_n \sim T^{-3/2} x^{-1/2}; \quad (3.59a)$$

б) при расейнии на ионах примеси

$$\tau_n \sim T^{3/2} x^{3/2}; \quad (3.59б)$$

в) при расейнии на оптических колебаниях в ионных кристаллах при температуре выше температуры Дебая

$$\tau_n \sim T^{-1/2} x^{1/2}; \quad (3.59в)$$

г) при расейнии на оптических колебаниях в ионных кристаллах при температуре ниже температуры Дебая

$$\tau_n \sim \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0T}\right). \quad (3.59г)$$

Подставив (3.59а)–(3.59г) в (3.53) и используя (3.57), получим:

$$а) \quad \mu_n \sim T^{-3/2}; \quad (3.60a)$$

$$\text{б)} \quad \mu_n \sim T^{3/2}; \quad (3.60\text{б})$$

$$\text{в)} \quad \mu_n \sim T^{-1/2}; \quad (3.60\text{в})$$

$$\text{г)} \quad \mu_n \sim \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_0T}\right). \quad (3.60\text{г})$$

Отметим, что если одновременно действуют несколько механизмов рассеяния, то результирующее время релаксации при упругом рассеянии определяется по формуле

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i}, \quad (3.61)$$

где τ_i – время релаксации, определяемое i -м механизмом рассеяния.

Зависимость, близкая к (3.60а), наблюдается у $n - Ge$: $\mu_n \sim T^{-1,66}$ ($100^\circ C < T < 280^\circ C$); однако для $p - Ge$ $\mu_p \sim T^{-2,33}$ (в том же интервале температур). Для электронного и дырочного кремния $\mu_n \sim T^{-2,6}$ ($300^\circ C < T < 400^\circ C$) и $\mu_p \sim T^{-2,3}$ ($150^\circ C < T < 400^\circ C$). Такие отступления от теории, которая для полупроводников с ковалентными связями приводит к закону $\mu \sim T^{-3/2}$, объясняются различными причинами: дополнительным рассеянием на оптических колебаниях решетки, междолинными переходами электронов при их рассеянии и непараболичностью зоны, т. е. зависимостью эффективной массы электрона от его энергии.

При понижении температуры доминирующим механизмом рассеяния становится рассеяние на ионах примеси, которое приводит к зависимости (3.60б): $\mu \sim T^{3/2}$. Этот переход наблюдается на опыте, например, у $n - Ge$.

В ряде случаев существенны одновременно несколько различных механизмов рассеяния. Например, подвижность, обусловленная взаимодействием с акустическими колебаниями, убывает при возрастании температуры как $T^{-3/2}$, а подвижность, связанная с рассеяниями на ионах примеси, возрастает как $T^{3/2}$. Поэтому при высоких и низких температурах можно соответственно пренебречь рассеянием на ионах примеси или взаимодействием с акустическими фононами, однако в промежуточной области температур будут существенны оба механизма рассеяния. Все выведенные выше формулы останутся справедливыми, если вместо τ подставлять его эффективное значение, определяемое выражением (3.61).

3.4. Гальваномагнитные явления в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой

Гальваномагнитными называют явления, связанные с прохождением электрического тока при одновременном действии электрического поля \mathbf{E} и магнитного поля \mathbf{B} .

Теоретическое описание может быть проведено для произвольного магнитного поля, однако в этом случае кинетические коэффициенты не выражаются через элементарные функции. Поэтому рассмотрим предельные случаи слабого и сильного магнитных полей. Будем называть магнитное поле слабым, если безразмерный параметр, входящий в χ_n (3.21) и в χ_p (3.22), удовлетворяет условию

$$\frac{e\tau}{m^*}B = \gamma\tau B \approx \mu B \ll 1, \quad (3.62)$$

здесь подвижность $\mu \approx e\tau/m^*$, где τ – соответствующим образом усредненное время релаксации (или просто время релаксации, если оно не зависит от энергии).

Критерий (3.62) может быть выражен более наглядно. Из уравнения движения свободного электрона в магнитном поле выразим циклотронную частоту $\omega_c = eB/m^*$ и радиус круговой орбиты $R_0 = v/\omega_c = vt^*/(eB)$. Учитывая эти соотношения, а также то, что длина свободного пробега электрона $\lambda = vt$, для критерия (3.62) получим следующее соотношение:

$$\frac{e\tau}{m^*}B = \omega_c\tau = \frac{\lambda}{R_0} \ll 1. \quad (3.63)$$

Таким образом, магнитное поле будем считать слабым, если длина свободного пробега электрона λ много меньше радиуса его круговой орбиты R_0 в магнитном поле или время свободного пробега τ много меньше $1/\omega_c = T_c/(2\pi)$, где T_c – период обращения электрона по орбите.

3.4.1. Эффект Холла и магнетосопротивление в примесном полупроводнике n -типа проводимости

Рассмотрим примесной полупроводник, например, n -типа проводимости. Для упрощения записи индекс n у всех величин в этом разделе опустим. В изотермических условиях

$$\mathbf{P} = \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) = \mathbf{E}, \quad (3.64)$$

как и в случае (3.51).

Пусть магнитное поле \mathbf{B} перпендикулярно электрическому \mathbf{E} , тогда согласно (3.32)

$$\chi^* = \frac{\tau \mathbf{E} + \gamma \tau^2 [\mathbf{B}\mathbf{P}]}{1 + (\gamma \tau B)^2}. \quad (3.65)$$

Плотность тока (3.42) с учетом (3.65) будет иметь вид

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau \mathbf{E} + \gamma \tau^2 [\mathbf{B}\mathbf{P}]}{1 + (\gamma \tau B)^2} \right\rangle. \quad (3.66)$$

Направим магнитное поле по оси z , а электрическое – в плоскости xy , распишем $[\mathbf{B}\mathbf{E}] = -(BE_y)\mathbf{i}_0 + (BE_x)\mathbf{j}_0$, тогда получим

$$j_x = a_1 E_x - a_2 E_y, \quad (3.67)$$

$$j_y = a_2 E_x + a_1 E_y, \quad (3.68)$$

где

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + (\gamma \tau B)^2} \right\rangle, \quad (3.69)$$

$$a_2 = \frac{ne^2}{m^*} (\gamma B) \left\langle \frac{\tau^2}{1 + (\gamma \tau B)^2} \right\rangle. \quad (3.70)$$

Эффект Холла заключается в возникновении электрического поля, перпендикулярного току \mathbf{j} и магнитному полю B , которое также перпендикулярно току. Если ток течет вдоль оси x так, что $j_x = j$ и $j_y = 0$, то, исключая из уравнений (3.67)–(3.68) E_x , получим

$$E_y = -\frac{a_2}{a_1^2 + a_2^2} j = RBj, \quad (3.71)$$

где, по определению, R – постоянная Холла:

$$R = -\frac{a_2}{(a_1^2 + a_2^2)B}. \quad (3.72)$$

В отсутствие магнитного поля ток $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E} = \mathbf{E}/\rho$, где σ и ρ – удельные электропроводность и сопротивление. При действии магнитного поля $\mathbf{B} \parallel z$ направление тока $\mathbf{j} \parallel x$ не совпадает с направлением электрического поля \mathbf{E} , поэтому возникает удельное сопротивление в магнитном поле, или *магнетосопротивление* $\rho_B = E_x/j = E_x/j_x$. Изменение сопротивления в магнитном поле имеет вид

$$\frac{\rho_B - \rho}{\rho} \equiv \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{E_x}{\rho j_x} - 1 = \frac{\sigma E_x}{j_x} - 1. \quad (3.73)$$

Так как мы считали, что ток течет вдоль оси x , то в уравнениях (3.67) и (3.68) положим $j_y = 0$, определим из них E_x и подставим в (3.73):

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\sigma a_1}{a_1^2 + a_2^2} - 1. \quad (3.74)$$

Если τ от энергии не зависит (например, в ионных полупроводниках при низких температурах), то символ усреднения в (3.69) и (3.70) можно опустить. Тогда при любом магнитном поле

$$R = -\frac{1}{en}, \quad (3.75)$$

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = 0. \quad (3.76)$$

Для τ , зависящего от энергии электрона \mathcal{E} , рассмотрим случаи слабого и сильного магнитных полей.

Слабые магнитные поля. Критерий слабого магнитного поля определен условием (3.62): $\gamma\tau B \ll 1$. В линейном приближении по магнитному полю, т. е. удерживая в разложении в ряд по B члены не выше первой степени, получим

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \langle \tau \rangle, \quad a_2 = \frac{ne^2}{m^*} (\gamma B) \langle \tau^2 \rangle. \quad (3.77)$$

В квадратичном приближении, т. е. удерживая в разложении по B члены порядка B^2 , будем иметь

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \{ \langle \tau \rangle - (\gamma B)^2 \langle \tau^3 \rangle \}, \quad a_2 = \frac{ne^2}{m^*} (\gamma B) \langle \tau^2 \rangle. \quad (3.78)$$

Из (3.72) и (3.74) следует, что с учетом (3.77) и (3.78) в линейном приближении по B для постоянной Холла R и в квадратичном для $\Delta\rho/\rho$ (так как в линейном приближении по B $\Delta\rho/\rho = 0$)

$$R = - \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \frac{1}{en}, \quad (3.79)$$

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \left(\frac{eB}{m^*} \right)^2 \frac{\langle \tau^3 \rangle \langle \tau \rangle - \langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau^2 \rangle}. \quad (3.80)$$

Если τ от энергии не зависит, то R (3.79) и $\Delta\rho/\rho$ (3.80) переходят в выражения (3.75), (3.76).

Если τ зависит от энергии по степенному закону (3.56), то, используя символ усреднения (3.39), можно вычислить численные коэффициенты в (3.79) и (3.80) для различных механизмов рассеяния (3.59а)–(3.59г):

а)

$$R = - \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en}, \quad \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{9\pi}{16} \left[1 - \frac{\pi}{4} \right] (\mu_n B)^2; \quad (3.81а)$$

б)

$$R = - \frac{315\pi}{512} \frac{1}{en}, \quad \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{15\pi}{8} \left[1 - \frac{6615\pi}{32768} \right] (\mu_n B)^2; \quad (3.81б)$$

в)

$$R = - \frac{45\pi}{128} \frac{1}{en}, \quad \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{27\pi}{64} \left[1 - \frac{75\pi}{256} \right] (\mu_n B)^2; \quad (3.81в)$$

г) см. (3.75), (3.76).

Здесь отношение $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ выражено через подвижность μ_n с учетом (3.53). Из полученных выражений видно, что в слабых полях $\frac{\Delta\rho}{\rho} \sim$

B^2 . Из (3.79) следует, что

$$|R|\sigma = |R|ne\mu = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \mu. \quad (3.82)$$

В случае носителей одного знака измерение R позволяет определить их концентрацию (формула (3.79)), а измерение R и σ — их подвижность μ_n .

Угол Θ между направлением тока \mathbf{j} и направлением поля \mathbf{E} называют *углом Холла*:

$$\operatorname{tg} \Theta \approx \Theta = \left| \frac{E_y}{E_x} \right| = \left| \frac{a_2}{a_1} \right| = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle} \frac{eB}{m^*} = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \mu_n B, \quad (3.83)$$

откуда видно, что в слабых полях $\Theta \approx \mu B \ll 1$.

Сильные магнитные поля. Магнитное поле будем считать сильным, если безразмерный параметр, входящий в χ_n (3.21) и в χ_p (3.22) удовлетворяет условию

$$\gamma \tau B \approx \mu_n B \gg 1, \quad (3.84)$$

что противоположно критерию слабого магнитного поля (3.62). При этом, однако, необходимо сделать важное ограничение. Чтобы используемый нами классический способ описания был применим, необходимо, чтобы кванты энергии $\hbar\omega_c$ были малы по сравнению со средней энергией теплового движения k_0T . Поэтому под сильными полями будем понимать такие поля, которые, с одной стороны, удовлетворяют условию (3.84), а с другой стороны, подчиняются условию (см. (2.68), (2.69)):

$$\frac{\hbar\omega_c}{k_0T} \gg 1.$$

Пренебрегая единицей по сравнению с $(\gamma\tau B)^2$, из (3.69) и (3.70) получим

$$a_1 = \frac{ne^2}{m^*} \frac{1}{(\gamma B)^2} \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle; \quad a_2 = \frac{ne^2}{m^*} \frac{1}{\gamma B}. \quad (3.85)$$

Отметим, что в этом случае разложение проводится по обратным степеням магнитного поля $1/B$. Отношение

$$\frac{a_1}{a_2} = \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle \frac{1}{\gamma B} \gg 1, \quad (3.86)$$

поэтому $a_1^2 + a_2^2 \approx a_2^2$. Учитывая условие (3.86) и используя приближение (3.85), из (3.72) и (3.74) получим

$$R = -\frac{1}{en}, \quad (3.87)$$

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \langle \tau \rangle \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle - 1. \quad (3.88)$$

Видно, что в случае сильных магнитных полей постоянная Холла R не зависит от механизма рассеяния, а магнетосопротивление $\Delta\rho/\rho$ достигает насыщения (т. е. не зависит от индукции магнитного поля B).

Для различных механизмов рассеяния (3.59а)–(3.59г) магнетосопротивление $\Delta\rho/\rho$ имеет вид:

$$\text{а) } \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{32}{9\pi} - 1; \quad \text{б) } \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{32}{3\pi} - 1; \quad (3.89)$$

$$\text{в) } \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{32}{9\pi} - 1; \quad \text{г) } \frac{\Delta\rho}{\rho} = 0.$$

Выше мы полагали, что магнитное поле $\mathbf{B} \perp \mathbf{E}$. Если рассмотреть случай $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$, то в полупроводнике со сферически-симметричной зоной магнитное поле не будет оказывать влияние на явления переноса. Действительно, если $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$, то $\mathbf{P} = \mathbf{E}$ (3.33) и из (3.32) следует

$$\chi^* = \frac{\tau\mathbf{E} + \gamma^2\tau^3B^2\mathbf{E}}{1 + (\gamma\tau B)^2} = \tau\mathbf{E},$$

т. е. магнитное поле не влияет на ток. Следовательно, в этом случае эффект Холла и магнетосопротивление равны нулю.

3.4.2. Эффект Холла и магнетосопротивление в полупроводниках со смешанной проводимостью

В изотермических условиях $\nabla T = 0$ и из (3.33) и (3.45) следует, что $\mathbf{P}_n = \mathbf{P}_p = \mathbf{E}$, как и в случае (3.64). Если $\mathbf{B} \perp \mathbf{E}$, то χ_n^* равно (3.65):

$$\chi_n^* = \frac{\tau_n\mathbf{E} + \gamma_n\tau_n^2[\mathbf{B}\mathbf{P}_n]}{1 + (\gamma_n\tau_n B)^2}, \quad (3.90)$$

а χ_p^* , как следует из (3.44), равно

$$\chi_p^* = \frac{\tau_p \mathbf{E} - \gamma_p \tau_p^2 [\mathbf{B} \mathbf{P}_p]}{1 + (\gamma_p \tau_p B)^2}. \quad (3.91)$$

Плотность электрического тока определяется выражением (3.50):

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p = \frac{ne^2}{m_n^*} \langle \chi_n^* \rangle + \frac{pe^2}{m_p^*} \langle \chi_p^* \rangle. \quad (3.92)$$

Направив магнитное поле \mathbf{B} по оси z , а электрическое \mathbf{E} в плоскости xy , из (3.92), (3.90) и (3.91) получим уравнения (3.67), (3.68), в которых параметры a_1 и a_2 имеют вид:

$$a_1 = \frac{ne^2}{m_n^*} \left\langle \frac{\tau_n}{1 + (\gamma_n \tau_n B)^2} \right\rangle + \frac{pe^2}{m_p^*} \left\langle \frac{\tau_p}{1 + (\gamma_p \tau_p B)^2} \right\rangle, \quad (3.93)$$

$$a_2 = \frac{ne^2}{m_n^*} (\gamma_n B) \left\langle \frac{\tau_n^2}{1 + (\gamma_n \tau_n B)^2} \right\rangle + \frac{pe^2}{m_p^*} (\gamma_p B) \left\langle \frac{\tau_p^2}{1 + (\gamma_p \tau_p B)^2} \right\rangle. \quad (3.94)$$

Аналогично предыдущему пункту рассмотрим случаи слабого и сильного магнитных полей.

Слабые магнитные поля. Магнитное поле считаем слабым, если одновременно выполняются условия: $\gamma_n \tau_n B \ll 1$ и $\gamma_p \tau_p B \ll 1$. Определяя a_1 и a_2 и отношение $a_2/(a_1^2 + a_2^2)$ с точностью до первой степени малости по магнитному полю B , для постоянной Холла из (3.72) получим следующее выражение:

$$R = -\frac{a_2}{(a_1^2 + a_2^2)B} = -\frac{1}{e} \frac{n \frac{e^2}{m_n^{*2}} \langle \tau_n^2 \rangle - p \frac{e^2}{m_p^{*2}} \langle \tau_p^2 \rangle}{\left[n \frac{e}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle + p \frac{e}{m_p^*} \langle \tau_p \rangle \right]^2}. \quad (3.95)$$

В случае примесного полупроводника $p = 0$ (или $n = 0$) и (3.95) переходит в (3.79).

Используя (3.53), можно выразить R через подвижности μ_n и μ_p :

$$R = -\frac{1}{e} \frac{\frac{\langle \tau_n^2 \rangle}{\langle \tau_n \rangle^2} n \mu_n^2 + \frac{\langle \tau_p^2 \rangle}{\langle \tau_p \rangle^2} p \mu_p^2}{[n \mu_n + p \mu_p]^2}. \quad (3.96)$$

Если, например, электроны и дырки рассеиваются на акустических колебаниях (3.59а), то

$$\frac{\langle \tau_n^2 \rangle}{\langle \tau_n \rangle^2} = \frac{\langle \tau_p^2 \rangle}{\langle \tau_p \rangle^2} = \frac{8\pi}{3} \quad (3.97)$$

и

$$R = -\frac{8\pi}{3e} \frac{n\mu_n^2 + p\mu_p^2}{(n\mu_n + p\mu_p)^2}. \quad (3.98)$$

Если для собственного полупроводника $n = p$, то

$$R = -\frac{8\pi}{3e} \frac{\mu_n^2 + \mu_p^2}{(\mu_n + \mu_p)^2}. \quad (3.99)$$

Из последнего выражения видно, что если $\mu_n \approx \mu_p$, то постоянная Холла R мала.

Вычисления магнетосопротивления $\Delta\rho/\rho$ (3.74) в линейном приближении по магнитному полю дают нуль, поэтому необходимо определить a_1 и a_2 и затем $\Delta\rho/\rho$ в квадратичном приближении по B . В результате довольно громоздких, но элементарных вычислений получим

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{1}{\sigma^2} & \left\{ \left(\frac{ne^2}{m_n^*} \right)^2 (\gamma_n B)^2 \left[\langle \tau_n \rangle \langle \tau_n^3 \rangle - \langle \tau_n^2 \rangle^2 \right] + \right. \\ & + \left(\frac{pe^2}{m_p^*} \right)^2 (\gamma_p B)^2 \left[\langle \tau_p \rangle \langle \tau_p^3 \rangle - \langle \tau_p^2 \rangle^2 \right] + \\ & \left. + \left(\frac{ne^2}{m_n^*} \right) \left(\frac{pe^2}{m_p^*} \right) \left[(\gamma_p B)^2 \langle \tau_n \rangle \langle \tau_p^3 \rangle + (\gamma_n B)^2 \langle \tau_p \rangle \langle \tau_n^3 \rangle \right] \right\}. \quad (3.100) \end{aligned}$$

Отметим, что в слабом магнитном поле $\Delta\rho/\rho \sim B^2$. Для примесного полупроводника ($p = 0$) из (3.100) получим (3.80). Общие формулы для различных механизмов рассеяния в силу их громоздкости приводить не будем.

Сильные магнитные поля. Магнитное поле будем считать сильным, если $\gamma_n \tau_n B \gg 1$ и $\gamma_p \tau_p B \gg 1$. В этом случае разложение

проводится по обратным степеням магнитного поля $1/B$. В приближении $1/B^2$ из (3.93) и (3.94) следует:

$$a_1 = \frac{nm_n^*}{B^2} \left\langle \frac{1}{\tau_n} \right\rangle + \frac{pm_p^*}{B^2} \left\langle \frac{1}{\tau_p} \right\rangle, \quad (3.101)$$

$$a_2 = (n-p) \frac{e}{B}. \quad (3.102)$$

Если $n \neq p$, то $\frac{a_1}{a_2} \approx \frac{1}{\gamma B} \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle \gg 1$, поэтому $a_1^2 + a_2^2 \approx a_1^2$. Постоянная Холла (3.72) имеет вид

$$R = -\frac{a_2}{(a_1^2 + a_2^2)B} = -\frac{1}{a_2 B} = -\frac{1}{e(n-p)}. \quad (3.103)$$

Магнетосопротивление (3.74) равно

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\sigma a_1}{a_2} - 1 = \frac{\sigma \left[nm_n^* \left\langle \frac{1}{\tau_n} \right\rangle + pm_p^* \left\langle \frac{1}{\tau_p} \right\rangle \right]}{e^2(n-p)^2} - 1, \quad (3.104)$$

т. е. достигает насыщения. Для примесного полупроводника ($p = 0$) выражение (3.104) переходит в (3.88).

Случай $n = p$ требует отдельного рассмотрения. На первый взгляд может показаться, что постоянная Холла (3.72) равна нулю, поскольку $a_2 = 0$ (3.102), а $a_1 \neq 0$ (3.101). Однако в приближении $1/B^2$ не только $a_2 = 0$, но и $(a_1^2 + a_2^2)B \sim 1/B^3 \approx 0$, поэтому для определения R необходимо вычислить a_2 и $(a_1^2 + a_2^2)B$ с точностью до $1/B^3$. В этом случае

$$a_2 = -\frac{n}{eB^3} \left[m_n^{*2} \left\langle \frac{1}{\tau_n^2} \right\rangle - m_p^{*2} \left\langle \frac{1}{\tau_p^2} \right\rangle \right]. \quad (3.105)$$

Используя (3.105) и (3.101), для постоянной Холла в приближении $1/B^3$ получим

$$R = -\frac{a_2}{(a_1^2 + a_2^2)B} = -\frac{1}{en} \frac{m_p^{*2} \left\langle \frac{1}{\tau_p^2} \right\rangle - m_n^{*2} \left\langle \frac{1}{\tau_n^2} \right\rangle}{\left[m_p^* \left\langle \frac{1}{\tau_p} \right\rangle + m_n^* \left\langle \frac{1}{\tau_n} \right\rangle \right]^2}. \quad (3.106)$$

Магнетосопротивление (3.74) в сильном магнитном поле при $n = p$ можно вычислить в приближении $1/B^2$, когда $a_2 = 0$, а a_1 определено выражением (3.101):

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\rho}{\rho} &= \frac{\sigma}{a_1} - 1 = \frac{\sigma B^2}{n \left[m_n^* \left\langle \frac{1}{\tau_n} \right\rangle + m_p^* \left\langle \frac{1}{\tau_p} \right\rangle \right]} - 1 = \\ &= e^2 B^2 \frac{\frac{1}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle + \frac{1}{m_p^*} \langle \tau_p \rangle}{m_n^* \left\langle \frac{1}{\tau_n} \right\rangle + m_p^* \left\langle \frac{1}{\tau_p} \right\rangle}. \end{aligned} \quad (3.107)$$

Здесь мы пренебрегли единицей по сравнению с первым слагаемым, кроме того, учли, что при $n = p$ электропроводность имеет вид

$$\sigma = ne^2 \left[\frac{1}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle + \frac{1}{m_p^*} \langle \tau_p \rangle \right].$$

Из (3.107) видно, что в сильном магнитном поле при $n = p$ магнетосопротивление $\Delta\rho/\rho \sim B^2$, как и в случае слабого магнитного поля. Напомним, что символы усреднения, входящие в (3.106) и (3.107), для различных механизмов рассеяния вычисляются по формуле (3.39). Соответствующие расчеты упрощаются, если электроны и дырки рассеиваются по одинаковому закону.

3.5. Термоэлектрические явления в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой

Явления, возникающие в полупроводниках при наличии градиента температуры ∇T , называются *термоэлектрическими*.

3.5.1. Термоэлектродвижущая сила

С повышением температуры средняя энергия, а часто и концентрация носителей заряда возрастают, поэтому наличие градиента температуры вызывает в направлении $-\nabla T$ поток свободных зарядов. В разомкнутой цепи в стационарном состоянии плотность тока $\mathbf{j} = 0$ во всех точках. Следовательно, возникшее электрическое поле \mathbf{E} вызывает в каждой точке полупроводника ток, компенсирующий

поток носителей заряда, созданный градиентом температуры ∇T . Возникающая при этом в цепи электродвижущая сила называется *термоэлектродвижущей силой* (*термоэдс*). В полупроводнике и электроны и дырки диффундируют от горячего конца к холодному, поэтому у собственного полупроводника термоэдс меньше, чем у примесного. В металлах концентрация электронов, а также их энергия практически не зависят от температуры, поэтому термоэдс у металлов мала по сравнению с полупроводниками.

Отметим, что термоэдс между точками 1 и 2 нельзя вычислять как линейный интеграл вида

$$\int_{(1)}^{(2)} E_l dl = - \int_{(1)}^{(2)} \nabla_l \varphi dl = \varphi_1 - \varphi_2, \quad (3.108)$$

где φ – электростатический потенциал, так как на границе металла и полупроводника существует контактная разность потенциалов, зависящая от температуры. Таким образом, показания приборов отметят и контактную разность потенциалов. Чтобы учесть этот эффект, интеграл (3.108) нужно вычислять не от $\nabla \varphi$, а от $\nabla(\mu/e - \varphi)$, где $(\mu/e - \varphi)$ – полный химический потенциал, учитывающий внешнее электрическое поле \mathbf{E} . Это связано с тем, что полный химический потенциал не меняется при прохождении контакта, если соблюдаются условия: температуры металла и полупроводника на контакте одинаковы, образцы вблизи границы находятся в статическом равновесии.

В отсутствие магнитного поля ($\mathbf{B} = 0$) при наличии градиента температуры ($\nabla T \neq 0$, $\nabla \mu \neq 0$) из (3.32) получим

$$\begin{aligned} \chi_n^* &= \tau_n \mathbf{P}_n = \tau_n \frac{\mathcal{E} - \mu}{eT} \nabla T + \tau_n \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) = \\ &= \frac{k_0}{e} \left[x - \frac{\mu}{k_0 T} \right] \tau_n \nabla T + \tau_n \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right), \end{aligned} \quad (3.109)$$

где $x = \mathcal{E}/k_0 T$. Из (3.42) следует, что электрический ток, созданный неравновесным распределением электронов (3.109), равен

$$\mathbf{j}_n = \frac{ne^2}{m_n^*} \langle \chi_n^* \rangle = \frac{ne^2}{m_n^*} \left\{ \frac{k_0}{e} \left[\langle \tau_n x \rangle - \frac{\mu}{k_0 T} \langle \tau_n \rangle \right] \nabla T + \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) \langle \tau_n \rangle \right\} =$$

$$= n e \mu_n \left\{ \frac{k_0}{e} \left(g_n - \frac{\mu}{k_0 T} \right) \nabla T + \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) \right\}, \quad (3.110)$$

где подвижность электронов μ_n определяется выражением (3.53), а символ

$$g_n = \frac{\langle \tau_n x \rangle}{\langle \tau_n \rangle}. \quad (3.111)$$

Если время релаксации $\tau_n \sim \mathcal{E}^r$, то

$$g_n = \frac{\Gamma(r + 7/2)}{\Gamma(r + 5/2)} = r + \frac{5}{2}. \quad (3.112)$$

В случае четырех механизмов рассеяния (3.59а)–(3.59г) величина g_n равна:

$$\text{а) } g_n = 2; \quad \text{б) } g_n = 4; \quad \text{в) } g_n = 3; \quad \text{г) } g_n = 2, 5. \quad (3.113)$$

Дифференциальная термоэдс α для разомкнутой цепи определяется соотношением

$$\alpha = \frac{|\nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right)|}{|\nabla T|}.$$

Из (3.111) при $\mathbf{j}_n = 0$ для α получим:

$$\alpha = \frac{k_0}{e} \left(g_n - \frac{\mu}{k_0 T} \right) = \frac{k_0}{e} \left[g_n + \ln \frac{N_n}{n} \right], \quad (3.114)$$

где $\mu/k_0 T$ выражено через N_n и n с учетом (3.35) и (3.36).

Для дырок, как это следует из (3.44) и (3.45),

$$\boldsymbol{\chi}_p^* = \tau_p \mathbf{P}_p = -\tau_p \frac{\mathcal{E}' + \mathcal{E}_G + \mu}{eT} \nabla T + \tau_p \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right). \quad (3.115)$$

Подставляя это выражение в (3.47) для электрического тока, обусловленного дырками, получим

$$\mathbf{j}_p = \frac{p e^2}{m_p^*} \langle \boldsymbol{\chi}_p^* \rangle = -p e \mu_p \left\{ \frac{k_0}{e} \left(g_p + \frac{\mathcal{E}_G + \mu}{k_0 T} \right) \nabla T - \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) \right\}, \quad (3.116)$$

где g_p аналогично (3.112).

Полный ток определяется выражением

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p = ne\mu_n \left\{ \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) + \frac{k_0}{e} \left(g_n - \frac{\mu}{k_0 T} \right) \nabla T \right\} + \\ + pe\mu_p \left\{ \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) - \frac{k_0}{e} \left(g_p + \frac{\mathcal{E}_G + \mu}{k_0 T} \right) \nabla T \right\}. \quad (3.117)$$

Полагая полный ток $\mathbf{j} = 0$, для дифференциальной термоэдс α собственного полупроводника получим:

$$\alpha = \frac{|\nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right)|}{|\nabla T|} = \frac{k_0}{e} \left(g_p + \frac{\mathcal{E}_G + \mu}{k_0 T} \right) \times \\ \times \frac{1}{n\mu_n + p\mu_p} \left\{ n\mu_n \left(g_n - \frac{\mu}{k_0 T} \right) - p\mu_p \left(g_p + \frac{\mathcal{E}_G + \mu}{k_0 T} \right) \right\} = \\ = \frac{k_0}{e} \frac{1}{n\mu_n + p\mu_p} \left\{ n\mu_n \left(g_n + \ln \frac{N_n}{n} \right) - p\mu_p \left(g_p + \ln \frac{N_p}{p} \right) \right\}, \quad (3.118)$$

где N_p и p взято из (3.48), (3.49). Из (3.118) видно, что вклады, вносимые в термоэдс от электронов и дырок, входят с противоположными знаками, следовательно, термоэдс собственного полупроводника меньше, чем примесного.

3.5.2. Эффект Томсона и эффект Пельтье

Наряду с термоэдс существенный интерес представляют еще два термоэлектрических эффекта.

При наличии градиента температуры в проводнике при прохождении по нему тока наряду с теплом Джоуля, пропорциональным \mathbf{j}^2 , выделяется (поглощается) *тепло Томсона*, пропорциональное $(\mathbf{j}\nabla T)$.

Кроме того, при прохождении тока по неоднородному проводнику даже при $\nabla T = 0$ происходит выделение или поглощение тепла, так называемый *эффект Пельтье*. Это явление имеет место, например, при прохождении тока сквозь контакт полупроводника с металлом.

Для рассмотрения этих термоэлектрических явлений вычислим плотность потока энергии, переносимого электронами и дырками:

$$\mathbf{w} = \int f_1^{(n)}(\mathbf{k}) \{\mathcal{E} - e\varphi\} \mathbf{v}_n \frac{d^3k}{4\pi^3} + \int f_1^{(p)}(\mathbf{k}') \{\mathcal{E}' + \mathcal{E}_G + e\varphi\} \mathbf{v}_p \frac{d^3k'}{4\pi^3}. \quad (3.119)$$

Выражения, стоящие в фигурных скобках (3.119), наряду с кинетической содержит и потенциальную энергию электронов и дырок; слагаемое \mathcal{E}_G учитывает, что энергия дырки \mathcal{E}' отсчитывается не от нижнего края зоны проводимости, а от верхнего края валентной зоны.

Те слагаемые в фигурных скобках в (3.119), которые не зависят от \mathcal{E} и \mathcal{E}' , дают в \mathbf{w} составляющие, пропорциональные составляющим плотности тока \mathbf{j}_n и \mathbf{j}_p (см. (3.27)) с выражениями (3.109) и (3.115) для χ_n^* и χ_p^* . Слагаемые \mathcal{E} и \mathcal{E}' приводят к вычислению интегралов типа (3.39) от τx и τx^2 . В результате получим

$$\begin{aligned} \mathbf{w} = & \varphi \mathbf{j} + \frac{\mathcal{E}_G}{e} \mathbf{j}_p - \frac{gk_0T}{e} n\mu_n \left[\nabla(\mu - e\varphi) - \frac{\mu - hk_0T}{T} \nabla T \right] + \\ & + \frac{gk_0T}{e} p\mu_p \left[\nabla(\mu - e\varphi) - \frac{\mu + \mathcal{E}_G + hk_0T}{T} \nabla T \right], \end{aligned} \quad (3.120)$$

где \mathbf{j}_p и \mathbf{j} выражаются формулами (3.116) и (3.117) соответственно, а

$$h = \langle \tau x^2 \rangle / \langle \tau x \rangle. \quad (3.121)$$

Здесь мы предполагали, что электроны и дырки рассеиваются по одинаковому закону, т. е. $g_n = g_p = g$ и $h_n = h_p = h$, что обычно и имеет место. Подставим в (3.121) (в том числе и в \mathbf{j}_p) $\nabla(\frac{\mu}{e} - \varphi)$ из (3.117), затем, приведя полученные слагаемые к общему знаменателю, объединяя подобные члены при $n\mu_n$, $p\mu_p$ и их произведениях, получим в результате длинных, но элементарных алгебраических преобразований, что

$$\mathbf{w} = \left(\varphi - \frac{\mu}{e} \right) \mathbf{j} - \Pi \mathbf{j} - \varkappa \nabla T, \quad (3.122)$$

где коэффициент Пельтье Π определяется выражением

$$\Pi = T \frac{k_0}{e} \frac{1}{n\mu_n + p\mu_p} \left\{ n\mu_n \left(g - \frac{\mu}{k_0T} \right) - p\mu_p \left(g - \frac{\mu + \mathcal{E}_G}{k_0T} \right) \right\} \quad (3.123)$$

и коэффициент теплопроводности \varkappa имеет вид

$$\begin{aligned} \varkappa = n\mu_n(hg - g^2)\frac{k_0^2T}{e} + p\mu_p(hg - g^2)\frac{k_0^2T}{e} + \\ + \frac{n\mu_n p\mu_p}{n\mu_n + p\mu_p} \frac{(\mathcal{E}_G + 2gk_0T)^2}{eT}. \end{aligned} \quad (3.124)$$

Если время релаксации $\tau \sim \mathcal{E}^r$, то численное значение коэффициентов в (3.124) равно

$$hg - g^2 = g^2(h - g) = r + \frac{5}{2}, \quad (3.125)$$

т. е. совпадает с g (3.112). Для различных механизмов рассеяния (3.59a)–(3.9г) этот коэффициент равен (3.113).

Из (3.123) и (3.118) следует, что

$$\Pi = \alpha T. \quad (3.126)$$

Это так называемое *соотношение Томсона*, которое является следствием симметрии кинетических коэффициентов. Из (3.124) видно, что при смешанной проводимости наряду с теплом, переносимым электронами и дырками, часть теплопроводности обусловлена электронно-дырочными парами (слагаемое, пропорциональное произведению np в (3.124)). Передача тепла в этом случае осуществляется за счет выделения энергии при рекомбинации электронов и дырок на холодном конце, где их равновесная концентрация ниже, чем в нагретой части полупроводника. Если концентрации и подвижности для электронов и дырок одного порядка и $\mathcal{E}_G \gg k_0T$, то теплопроводность, обусловленная электронно-дырочными парами в $(\mathcal{E}_G/k_0T)^2$ раз больше теплопроводности электронов (дырок).

В полупроводниках нередко теплопроводность кристаллической решетки \varkappa_0 того же порядка, что и теплопроводность, обусловленная электронами (дырками). В этом случае правую часть (3.122) необходимо дополнить членом $-\varkappa_0 \nabla T$.

Для того чтобы получить ряд важных следствий из (3.122), возьмем дивергенцию от обеих частей (3.122) и учтем, что в стационарном состоянии $\operatorname{div} \mathbf{w} = \operatorname{div} \mathbf{j} = 0$, тогда

$$\operatorname{div} (-\varkappa \nabla T) = \operatorname{div} \left\{ \mathbf{j} \left[\Pi + \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) \right] \right\}. \quad (3.127)$$

Применим (3.127) к бесконечно малому цилиндру (рис. 3.1) с основаниями, параллельными границе между двумя проводниками: интегрируя (3.127) по объему, ограниченному поверхностью цилиндра и используя теорему Остроградского-Гаусса, получим

$$\oint_S (-\kappa \nabla T) d\mathbf{S} = \oint_S \mathbf{j} \left[\Pi + \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) \right] d\mathbf{S}. \quad (3.128)$$

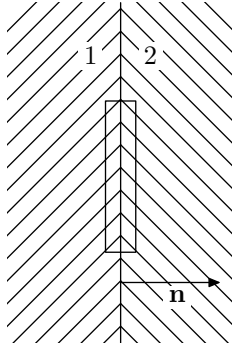


Рис. 3.1. Бесконечно малый цилиндр (в сечении) на границе двух проводящих сред с основаниями, параллельными границе

Предположим, что $\mathbf{j} \parallel \mathbf{n}$, где \mathbf{n} – нормаль к границе, направленная из проводника 1 в проводник 2 (рис. 3.1). Так как \mathbf{j} и $\left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right)$ на границе непрерывны, то $\oint_S \mathbf{j} \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) d\mathbf{S} = 0$ и из (3.128) получим

$$\kappa_1 \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_1 - \kappa_2 \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_2 = (\Pi_2 - \Pi_1) j. \quad (3.129)$$

Если $\left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_1$ и $\left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_2$ имеют разные знаки, то слева в (3.129) стоит сумма двух тепловых потоков, текущих в противоположные стороны от границы (или к границе), а справа – количество тепла, выделяющегося (или поглощающегося) в единицу времени на единице площади границы.

В случае границы полупроводника с металлом коэффициентом Пельтье для металла можно пренебречь.

Таким образом, выражение $(\Pi_2 - \Pi_1)j$ определяет выделение (поглощение) тепла за единицу времени на границе двух проводников при прохождении электрического тока.

Преобразуем выражение (3.127), воспользовавшись тождеством $\operatorname{div}(\psi \mathbf{a}) = \psi \operatorname{div} \mathbf{a} + \mathbf{a} \nabla \psi$:

$$\operatorname{div}(-\kappa \nabla T) = \mathbf{j} \left(\nabla \Pi + \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) \right). \quad (3.130)$$

Из (3.117) и (3.123) найдем

$$\mathbf{j} = \sigma \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) + \frac{\sigma \Pi}{T} \nabla T. \quad (3.131)$$

Выразим отсюда $\nabla(\mu/e - \varphi)$ и подставим в (3.130):

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(-\kappa \nabla T) &= \frac{j^2}{\sigma} + \mathbf{j} \left(\nabla \Pi - \frac{\Pi}{T} \nabla T \right) = \\ &= \frac{j^2}{\sigma} + \tau_T (\nabla T \mathbf{j}), \end{aligned} \quad (3.132)$$

где коэффициент Томсона τ_T может быть представлен в виде

$$\tau_T = T \frac{d}{dT} \frac{\Pi}{T} = T \frac{d\alpha}{dT}, \quad (3.133)$$

если воспользоваться соотношением (3.126).

Из (3.132) следует, что первое слагаемое в левой части равно теплу Джоуля j^2/σ , которое пропорционально квадрату силы тока, а второе слагаемое, пропорциональное первой степени силы тока $\tau_T(\nabla T \mathbf{j})$, есть тепло Томсона. Причем тепло Томсона, в зависимости от взаимной ориентации ∇T и \mathbf{j} , может как выделяться, так и поглощаться.

Для примесного полупроводника (n- или p-типа проводимости) коэффициент теплопроводности κ (3.124) существенно упрощается и имеет вид

$$\kappa = n\mu(hg - g^2) \frac{k_0^2 T}{e}. \quad (3.134)$$

Отношение коэффициента теплопроводности κ к удельной электропроводности $\sigma = ne\mu$ равно

$$\frac{\kappa}{\sigma} = (hg - g^2) \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 T = LT, \quad (3.135)$$

т. е. пропорционально абсолютной температуре T (закон *Видемана-Франца*). При степенной зависимости времени релаксации τ от энергии ($\tau \sim \mathcal{E}^r$) число Лоренца приводится к следующему выражению

$$L = (hg - g^2) \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 = \left(r + \frac{5}{2} \right) \left(\frac{k_0}{e} \right)^2. \quad (3.136)$$

Коэффициент $r + 5/2$ в числе Лоренца для различных механизмов рассеяния имеет значения (3.113). Коэффициент Пельтье (3.123) для примесного полупроводника также можно представить в более простом виде (в связи с ограниченным объемом пособия эти преобразования не приводятся).

3.6. Термомагнитные явления в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой

Если наряду с электрическим и магнитным полями в полупроводнике существует градиент температуры, то явления переноса в нем называются *термомагнитными*.

3.6.1. Эффект Нернста-Эттингсгаузена в примесном полупроводнике n -типа проводимости

Рассмотрим примесной полупроводник, например n -типа. В этом случае, как это следует из (3.33),

$$\mathbf{P} = \frac{\mathcal{E} - \mu}{eT} \nabla T + \nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right). \quad (3.137)$$

Здесь и далее в этом разделе индекс n для простоты записи опустим. Если магнитное поле \mathbf{B} перпендикулярно вектору \mathbf{P} , то для вектора χ^* получим

$$\chi^* = \frac{\tau \mathbf{P} + \gamma \tau^2 [\mathbf{B} \mathbf{P}]}{1 + (\gamma \tau B)^2}. \quad (3.138)$$

Направим магнитное поле по оси z , а векторы ∇T и $\nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right)$ – в плоскости xy . Составляющие тока по осям x и y аналогично (3.67),

(3.68) равны

$$j_x = a_1 \nabla_x \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) + b_1 \nabla_x T - a_2 \nabla_y \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) - b_2 \nabla_y T, \quad (3.139)$$

$$j_y = a_2 \nabla_x \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) + b_2 \nabla_x T + a_1 \nabla_y \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) + b_1 \nabla_y T, \quad (3.140)$$

где a_1 и a_2 равны (3.69) и (3.70), а

$$b_1 = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\left[\left(\frac{k_0}{e} \right) x - \frac{\mu}{eT} \right] \tau}{1 + (\gamma\tau B)^2} \right\rangle, \quad (3.141)$$

$$b_2 = \frac{ne^2}{m^*} (\gamma B) \left\langle \frac{\left[\left(\frac{k_0}{e} \right) x - \frac{\mu}{eT} \right] \tau^2}{1 + (\gamma\tau B)^2} \right\rangle. \quad (3.142)$$

Здесь, как и ранее, $x = \mathcal{E}/k_0 T$. Эффект Нернста-Эттингсгаузена (для краткости далее будем называть эффектом Нернста) заключается в возникновении поперечного поля $\nabla_y \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right)$ при токе $\mathbf{j} = 0$, но при $\nabla_x T \neq 0$. Для простоты рассмотрим изотермический эффект Нернста, для которого $\nabla_y T = 0$.

Полагая в уравнениях (3.139), (3.140) $j_x = j_y = \nabla_y T = 0$ и исключая из них $\nabla_x \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right)$, получим

$$\nabla_y \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) = E_y = -\frac{a_1 b_2 - a_2 b_1}{(a_1^2 + a_2^2)} \nabla_x T = -QB \nabla_x T, \quad (3.143)$$

где Q — постоянная Нернста:

$$Q = -\frac{a_1 b_2 - a_2 b_1}{(a_1^2 + a_2^2) B}. \quad (3.144)$$

Из выражений для коэффициентов a_1 , a_2 (3.69)–(3.70) и выражений для b_1 и b_2 (3.141)–(3.142) следует, что если время релаксации τ от энергии электронов \mathcal{E} не зависит, то постоянная Нернста $Q = 0$.

Далее рассмотрим эффект Нернста в слабых и сильных магнитных полях.

Случай слабого магнитного поля. Как и ранее, магнитное поле считаем слабым, если $\gamma\tau B \ll 1$. В линейном приближении по магнитному полю для коэффициентов a_1 и a_2 справедлива формула

(3.77), а коэффициенты b_1 (3.141) и b_2 (3.142) будут определяться выражениями

$$b_1 = \frac{ne^2}{m^*} \left\{ \left(\frac{k_0}{e} \right) \langle \tau x \rangle - \frac{\mu}{eT} \langle \tau \rangle \right\}, \quad (3.145)$$

$$b_2 = \frac{ne^2}{m^*} (\gamma B) \left\{ \left(\frac{k_0}{e} \right) \langle \tau^2 x \rangle - \frac{\mu}{eT} \langle \tau^2 \rangle \right\}, \quad (3.146)$$

тогда для постоянной Нернста получим

$$Q = \left(\frac{k_0}{e} \right) \frac{e}{m^*} \frac{\langle \tau \rangle \langle \tau^2 x \rangle - \langle \tau^2 \rangle \langle \tau x \rangle}{\langle \tau \rangle^2}. \quad (3.147)$$

Если τ имеет вид (3.56), то, учитывая (3.39) и используя свойства Г-функции, получим

$$Q = \left(\frac{k_0}{e} \right) \frac{e}{m^*} \tau_0 \frac{\Gamma(2r + \frac{5}{2})}{\Gamma(r + \frac{5}{2})} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{\Gamma(2r + \frac{5}{2})}{\Gamma^2(r + \frac{5}{2})} r \left(\frac{k_0}{e} \right) \mu_n. \quad (3.148)$$

Таким образом, можно определить постоянную Нернста для различных механизмов рассеяния (3.59а)–(3.59г). Видно, что знак Q совпадает со знаком показателя степени r , поэтому, если с изменением температуры один механизм рассеяния сменяется другим, Q может при этом изменить знак. Это обстоятельство широко используется на практике, так как экспериментальное определение только знака этого эффекта дает качественное представление о механизме рассеяния в данном полупроводнике. Отметим, что в металлах и вырожденных полупроводниках эффект Нернста ничтожен, поскольку для его существования необходимо наличие различных групп электронов, которые по-разному рассеиваются.

Случай сильного магнитного поля. В случае сильного магнитного поля $\gamma\tau B \gg 1$. Пренебрегая единицей по сравнению с $(\gamma\tau B^2)$, из (3.141) и (3.142) получим

$$b_1 = \frac{ne^2}{m^*} \left\{ \left(\frac{k_0}{e} \right) \left\langle \frac{\tau}{x} \right\rangle - \frac{\mu}{eT} \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle \right\}, \quad (3.149)$$

$$b_2 = \frac{ne^2}{m^*} (\gamma B) \left\{ \left(\frac{k_0}{e} \right) \langle x \rangle - \frac{\mu}{eT} \right\}. \quad (3.150)$$

Подставляя (3.149) и (3.77) в (3.144), в приближении $1/B^2$ получим

$$Q = \frac{1}{\gamma B^2} \left(\frac{k_0}{e} \right) \left\{ \langle x \rangle \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle - \left\langle \frac{x}{\tau} \right\rangle \right\}. \quad (3.151)$$

Из (3.40) следует, что $\langle x \rangle = 5/2$. Вычисляя символы усреднения согласно (3.39), можно получить постоянную Нернста для различных механизмов рассеяния.

3.6.2. Эффект Нернста-Эттингсгаузена в полупроводнике со смешанной проводимостью

Для полупроводников со смешанной проводимостью рассмотрим эффект Нернста только в слабом магнитном поле.

В линейном приближении по магнитному полю B коэффициенты a_1, a_2, b_1, b_2 , как следует из выражений (3.77) и (3.145) и (3.146), будут иметь вид

$$a_1 = \frac{ne^2}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle + \frac{pe^2}{m_p^*} \langle \tau_p \rangle; \quad (3.152)$$

$$a_2 = \frac{ne^2}{m_n^*} (\gamma_n B) \langle \tau_n^2 \rangle - \frac{pe^2}{m_p^*} (\gamma_p B) \langle \tau_p \rangle; \quad (3.153)$$

$$b_1 = \frac{ne^2}{m_n^*} \left[\left(\frac{k_0}{e} \right) \langle \tau_n x \rangle - \frac{\mu}{eT} \langle \tau_n \rangle \right] - \frac{pe^2}{m_p^*} \left[\left(\frac{k_0}{e} \right) \langle \tau_p x \rangle + \frac{\mathcal{E}_G + \mu}{eT} \langle \tau_p \rangle \right]; \quad (3.154)$$

$$b_2 = \frac{ne^2}{m_n^*} (\gamma_n B) \left\{ \left(\frac{k_0}{e} \right) \langle \tau_n^2 x \rangle - \frac{\mu}{eT} \langle \tau_n^2 \rangle \right\} + \frac{pe^2}{m_p^*} (\gamma_p B) \left\{ \left(\frac{k_0}{e} \right) \langle \tau_p^2 x \rangle + \frac{\mathcal{E}_G + \mu}{eT} \langle \tau_p^2 \rangle \right\}. \quad (3.155)$$

Для постоянной Нернста в линейном приближении по магнит-

ному полю B получим

$$\begin{aligned}
 Q = & -\frac{a_1 b_2 - a_2 b_1}{(a_1^2 + a_2^2)B} = \left[\frac{ne^2}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle + \frac{pe^2}{m_p^*} \langle \tau_p \rangle \right]^{-2} \times \\
 & \times \left\{ \left(\frac{ne^2}{m_n^*} \right)^2 \gamma_n \left(\frac{k_0}{e} \right) [\langle \tau_n^2 x \rangle \langle \tau_n \rangle - \langle \tau_n x \rangle \langle \tau_n^2 \rangle] + \right. \\
 & + \left(\frac{pe^2}{m_p^*} \right)^2 \gamma_p \left(\frac{k_0}{e} \right) [\langle \tau_p^2 x \rangle \langle \tau_p \rangle - \langle \tau_p x \rangle \langle \tau_p^2 \rangle] + \\
 & + \left(\frac{ne^2}{m_n^*} \right) \left(\frac{pe^2}{m_p^*} \right) \left[\gamma_p \left(\frac{k_0}{e} \right) (\langle \tau_p^2 x \rangle \langle \tau_n \rangle + \langle \tau_p^2 \rangle \langle \tau_n x \rangle) + \right. \\
 & + \gamma_n \left(\frac{k_0}{e} \right) (\langle \tau_n^2 x \rangle \langle \tau_p \rangle + \langle \tau_n^2 \rangle \langle \tau_p x \rangle) + \\
 & \left. \left. + \frac{\mathcal{E}_G}{eT} (\gamma_n \langle \tau_n^2 \rangle \langle \tau_p \rangle + \gamma_p \langle \tau_p^2 \rangle \langle \tau_n \rangle) \right] \right\}. \quad (3.156)
 \end{aligned}$$

Фигурная скобка в этом выражении состоит из трех слагаемых, пропорциональных n^2 , p^2 и np . Полагая концентрацию дырок $p = 0$, из (3.156) получим (3.147). Если τ_n и τ_p зависят от энергии по степенному закону, то все угловые скобки в (3.156) можно выразить через Γ -функции. Затем e/m_n^* и e/m_p^* можно выразить через соответствующие подвижности μ_n и μ_p (3.53).

3.7. Явления переноса в полупроводниках с простой зоной при произвольном вырождении

Выражение для плотности тока имеет вид (3.27). Заменяем в этом выражении u_n на соотношение (3.30) для простой зоны, векторную функцию χ_n на выражение (3.31) и перейдем в интеграле посредством (3.29) от переменной k к \mathcal{E} , тогда для плотности тока получим

$$\mathbf{j} = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \frac{m^{*1/2} e^2}{\hbar^3} \int_0^\infty \chi^*(\mathcal{E}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \mathcal{E}^{3/2} d\mathcal{E}. \quad (3.157)$$

Здесь и далее индекс n , относящийся к электронной составляющей, для простоты записи опущен. Запишем это выражение аналогично (3.42) в виде

$$\mathbf{j} = \frac{ne}{m^*} \langle \boldsymbol{\chi}^*(\mathcal{E}) \rangle, \quad (3.158)$$

где символ усреднения $\langle \dots \rangle$ имеет теперь следующий смысл:

$$\langle \boldsymbol{\chi}^* \rangle = \frac{1}{\mu_0^{3/2}} \int_0^\infty \boldsymbol{\chi}^*(\mathcal{E}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \mathcal{E}^{3/2} d\mathcal{E} = \frac{1}{z_0^{3/2}} \int_0^\infty \boldsymbol{\chi}^*(x) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{3/2} dx. \quad (3.159)$$

Здесь μ_0 —граничная энергия Ферми (1.9), $z_0 = \mu_0/k_0T$ и $x = \mathcal{E}/k_0T$. При произвольном вырождении равновесная функция распределения Ферми–Дирака имеет вид (1.1)

$$f_0(\mathcal{E}(\mathbf{k})) = \frac{1}{\exp \left\{ \frac{\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mu}{k_0T} \right\} + 1} = \frac{1}{e^{x-z} + 1}, \quad (3.160)$$

где $z = \mu/k_0T$. Выражение (3.159) является обобщением выражения (3.39), в которое переходит (3.159) в случае невырожденного электронного газа, для которого функция распределения Ферми–Дирака f_0 переходит в распределение Больцмана (3.5). Из (3.159) для случая, когда $\boldsymbol{\chi}^* = \mathbf{a} = \text{const}$, следует

$$\langle \mathbf{a} \rangle = \frac{1}{z_0^{3/2}} \int_0^\infty \mathbf{a} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{3/2} dx = \frac{\mathbf{a}}{z_0^{3/2}} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{3/2} dx. \quad (3.161)$$

Интеграл (3.161) берется по частям:

$$\langle \mathbf{a} \rangle = \frac{\mathbf{a}}{z_0^{3/2}} \left[x^{3/2} f_0(x) \Big|_0^\infty + \frac{3}{2} \int_0^\infty f_0(x) x^{1/2} dx \right] = \frac{\mathbf{a}}{z_0^{3/2}} \frac{3}{2} \int_0^\infty f_0(x) x^{1/2} dx.$$

Далее, учитывая условие нормировки (1.4) и соотношение (1.9), получим

$$\langle \mathbf{a} \rangle = \mathbf{a}. \quad (3.162)$$

Если время релаксации τ зависит от энергии по степенному закону (3.56) и рассматриваются только случаи сильного и слабого

магнитных полей, то усреднение в равенстве (3.159) всегда сводится к усреднению степеней энергии, т. е.

$$\langle \mathcal{E}^s \rangle = \mu_0^{-3/2} \int_0^\infty \mathcal{E}^{s+3/2} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) d\mathcal{E}, \quad (3.163)$$

или при переходе к переменной интегрирования $x = \mathcal{E}/k_0T$ и замене $z_0 = \mu_0/k_0T$ получим:

$$\langle x^s \rangle = z_0^{-3/2} \int_0^\infty x^{s+3/2} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) dx. \quad (3.164)$$

Если $k_0T/\mu_0 \ll 1$, то в первом (δ -функциональном) и во втором приближениях по вырождению интегралы (3.163) и (3.164) соответственно равны:

$$\langle \mathcal{E}^s \rangle = \mu_0^{-s}, \quad (3.165)$$

$$\langle \mathcal{E}^s \rangle = \mu_0^{-s} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{6} s \left(s + \frac{3}{2} \right) \left(\frac{k_0T}{\mu_0} \right)^2 \right\}, \quad (3.166)$$

здесь использована формула (6.5) приложения 2 и выражение для μ (1.9а).

Интегрируя по частям (3.164), получим

$$\langle x^s \rangle = z_0^{-3/2} (s + 3/2) \mathcal{F}_{s+1/2}(z), \quad (3.167)$$

где $z = \mu/k_0T$ и интеграл Ферми $\mathcal{F}_{s+1/2}(z)$ определяется равенством (1.5).

Плотность потока энергии может быть получена из выражения (3.157), если заменить под знаком интеграла заряд электрона $-e$ на его полную энергию $\mathcal{E} - e\varphi$, где φ – потенциал электростатического поля, действующего на электроны. Таким образом, плотность потока энергии имеет вид

$$\mathbf{w} = -\frac{ne}{m^*} \langle \chi^*(\mathcal{E} - e\varphi) \rangle = \frac{ne}{m^*} \langle \chi^* \mathcal{E} \rangle + \varphi \mathbf{j}. \quad (3.168)$$

Если электрический ток равен нулю, то \mathbf{w} равно первому слагаемому правой части (3.168).

3.7.1. Электропроводность примесного полупроводника n-типа проводимости

Определим электрический ток в отсутствие градиента температуры и магнитного поля из выражения (3.158), где χ^* , согласно (3.51), равен $\tau\mathbf{E}$. Таким образом,

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2}{m^*} \langle \tau \rangle \mathbf{E}, \quad (3.169)$$

отсюда электропроводность имеет вид

$$\sigma = \frac{ne^2}{m^*} \langle \tau \rangle. \quad (3.170)$$

Если время релаксации τ равно (3.56), то

$$\langle \tau \rangle = a \langle \mathcal{E}^r \rangle = a(k_0 T)^r \langle x^r \rangle. \quad (3.171)$$

Используя символ усреднения (7.167), при произвольном вырождении получим

$$\sigma = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \frac{e^2 m^{*1/2}}{\hbar^3} a(k_0 T)^{r+3/2} \left(r + \frac{3}{2} \right) \mathcal{F}_{r+1/2}(z), \quad (3.172)$$

где $z = \mu/k_0 T$ при $n = const$ определяется из выражения (1.4).

В случае сильного вырождения достаточно использовать первое приближение (3.165), тогда

$$\sigma = \frac{ne^2}{m^*} \tau(\mu_0), \quad (3.173)$$

где $\tau(\mu_0) = \tau(\mathcal{E}) \Big|_{\mathcal{E}=\mu_0}$.

Из выражения (3.157) видно, что из-за наличия под интегралом производной $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) \approx \delta(\mathcal{E} - \mu_0)$ в образовании тока принимают участие только электроны, расположенные в слое толщиной порядка $k_0 T$ вблизи поверхности Ферми $\mathcal{E} = \mu_0$. В самом деле, для других электронов $\delta(\mathcal{E} - \mu_0) \approx 0$. В силу этого при вырождении не вводят понятия подвижности электронов $\mu_n = \sigma/ne$ (см. (3.53)).

3.7.2. Термоэлектрические явления в примесных полупроводниках n-типа проводимости

Выражение для дифференциальной термоэдс (3.114) может быть преобразовано к виду

$$\alpha = \left(\frac{k_0}{e}\right) \left\{ \frac{\langle \tau x \rangle}{\langle \tau \rangle} - z \right\} = \left(\frac{k_0}{e}\right) \frac{1}{k_0 T} \left\{ \frac{\langle \tau \mathcal{E} \rangle}{\langle \tau \rangle} - \mu \right\}. \quad (3.174)$$

Если время релаксации τ равно (3.56), то при произвольном вырождении

$$\alpha = \left(\frac{k_0}{e}\right) \left\{ \frac{(r + 5/2)\mathcal{F}_{r+3/2}(z)}{(r + 3/2)\mathcal{F}_{r+1/2}(z)} - z \right\}. \quad (3.175)$$

Из равенства (3.174) непосредственно следует, что в первом приближении по вырождению $\alpha = 0$. Действительно, первое слагаемое в фигурных скобках (3.174), в δ -функциональном приближении, равно

$$\frac{\langle \tau \mathcal{E} \rangle}{\langle \tau \rangle} = \frac{\tau(\mu_0)\mu_0}{\tau(\mu_0)} = \mu_0$$

и, следовательно, сокращается со вторым слагаемым. Во втором приближении по вырождению, используя (3.167) и (1.9а), получим

$$\alpha = \frac{\pi^2}{3} \left(r + \frac{3}{2}\right) \left(\frac{k_0}{e}\right) \left(\frac{k_0 T}{\mu_0}\right). \quad (3.176)$$

Как следует из (3.59а)–(3.59г), для различных механизмов рассеяния r имеет разные значения. Для хороших металлов $r = 3/2$ [2].

Из (3.176) видно, что для металлов α существенно меньше, чем для невырожденных полупроводников, так как при сильном вырождении α имеет лишний множитель $(k_0 T/\mu_0)$, который при комнатной температуре для металлов $\approx 5 \cdot 10^{-3}$.

Подставляя в (3.134) выражение (3.53), (3.111) и (3.121), для коэффициента теплопроводности получим

$$\varkappa = \frac{n}{m^*} k_0^2 T \frac{\langle \tau \rangle \langle \tau x^2 \rangle - \langle \tau x \rangle^2}{\langle \tau \rangle} = \frac{n}{m^*} \frac{1}{T} \frac{\langle \tau \rangle \langle \tau \mathcal{E}^2 \rangle - \langle \tau \mathcal{E} \rangle^2}{\langle \tau \rangle}. \quad (3.177)$$

Аналогично тому, как это было сделано для α , можно легко показать, что коэффициент теплопроводности \varkappa в первом приближении по вырождению равен нулю. Во втором приближении по

вырождению при τ , равному (3.56), получим

$$\varkappa = \frac{\pi^2}{3} k_0^2 T \frac{n}{m^*} \tau(\mu_0), \quad (3.178)$$

где было использовано разложение (3.166). Отсюда и из (3.173) следует закон Видемана-Франца:

$$\frac{\varkappa}{\sigma} = LT, \quad (3.179)$$

где в случае сильного вырождения число Лоренца

$$L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 \quad (3.180)$$

не зависит от механизма рассеяния.

При промежуточном вырождении \varkappa может быть выражено через интегралы Ферми, определяемые соотношением (1.5). В общем случае число Лоренца равно

$$L = \frac{(r+3/2)(r+5/2)\mathcal{F}_{r+1/2}\mathcal{F}_{r+5/2} - (r+5/2)^2\mathcal{F}_{r+3/2}^2}{(r+3/2)^2\mathcal{F}_{r+3/2}^2} \left(\frac{k_0}{e} \right)^2. \quad (3.181)$$

3.7.3. Гальваномагнитные явления в примесных полупроводниках n-типа

Как и в случае невырожденного электронного газа, рассмотренного ранее в параграфе 3.4, полагаем, что магнитное поле \mathbf{B} перпендикулярно электрическому полю \mathbf{E} и, следовательно, \mathbf{B} перпендикулярно вектору $\mathbf{P} = \tau\mathbf{E}$. При этом соотношения (3.67)–(3.70) остаются справедливыми, если под символом усреднения $\langle \dots \rangle$ понимать усреднение (3.159). Таким образом, формулы для постоянной Холла R и магнетосопротивления $\Delta\rho/\rho$, полученные в параграфе 3.4 для слабых и сильных магнитных полей, остаются в силе, если символ усреднения имеет вид (3.159).

Случай слабого магнитного поля. В этом случае, как и ранее, безразмерный параметр $\gamma\tau B \ll 1$. В линейном приближении по магнитному полю B постоянная Холла согласно (3.79) имеет вид

$$R = -\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \frac{1}{en}. \quad (3.182)$$

В первом приближении по вырождению

$$\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = \frac{\tau^2(\mu_0)}{(\tau(\mu_0))^2} = 1,$$

поэтому

$$R = -\frac{1}{en}. \quad (3.183)$$

В случае зависимости (3.56) для времени релаксации и промежуточного вырождения множитель $\langle \tau^2 \rangle / \langle \tau \rangle^2$ может быть выражен через интегралы Ферми (1.5).

Магнетосопротивление в квадратичном по магнитному полю приближении, согласно (3.80), имеет вид

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \left(\frac{eB}{m^*} \right)^2 \frac{\langle \tau^3 \rangle \langle \tau \rangle - \langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau^2 \rangle}. \quad (3.184)$$

В первом приближении по вырождению это выражение равно нулю. С физической точки зрения это означает, что магнетосопротивление возникает только тогда, когда имеются группы электронов с различной энергией, которые по-разному рассеиваются.

Во втором приближении по вырождению при степенной зависимости времени релаксации от энергии (3.56) получим:

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = C_0 B^2, \quad (3.185)$$

где

$$C_0 = \frac{\pi^2}{3} r^2 \left[\frac{e\tau(\mu_0)}{m^*} \right]^2 \left(\frac{k_0 T}{\mu_0} \right)^2. \quad (3.186)$$

В случае промежуточного вырождения величина $\Delta \rho / \rho$ (3.184) может быть выражена через интегралы Ферми (1.5).

Отметим, что в металлах, т. е. при сильном вырождении, в слабом магнитном поле $\Delta \rho / \rho$ от температуры не зависит, так как в этом случае $\tau(\mu_0)$ обратно пропорционально температуре [2].

Случай сильного магнитного поля. В случае сильного магнитного поля безразмерный параметр $\gamma\tau B \gg 1$. Постоянная Холла для сильных полей независимо от степени вырождения равна (3.183), что следует из (3.87). Магнетосопротивление согласно равенству (3.88) имеет вид

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \langle\tau\rangle \left\langle\frac{1}{\tau}\right\rangle - 1. \quad (3.187)$$

В первом приближении по вырождению $\frac{\Delta\rho}{\rho} = 0$, так как $\langle\tau\rangle \left\langle\frac{1}{\tau}\right\rangle = 1$. При степенной зависимости τ от энергии (3.56) во втором приближении по вырождению получим

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\pi^2}{3} r^2 \left(\frac{k_0 T}{\mu_0}\right)^2, \quad (3.188)$$

т. е. имеет место насыщение при $B \rightarrow \infty$. При сильных полях и вырождении величина насыщения $\Delta\rho/\rho \approx T^2$.

Произвольные магнитные поля. Рассмотрим сначала сильно вырожденный электронный газ. В этом случае магнетосопротивление $\Delta\rho/\rho$ может быть вычислено для произвольного магнитного поля. Во втором приближении по вырождению

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{C_0 B^2}{1 + (R\sigma B)^2}. \quad (3.189)$$

Здесь C_0 определена формулой (3.186), Постоянная Холла R – формулой (3.183), а электропроводность σ – выражением (3.173). Из (3.189) для больших магнитных полей получим

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_{B \rightarrow 0} = \frac{C_0}{(R\sigma)^2}, \quad (3.190)$$

что совпадает с выражением (3.188).

Следует отметить, что экспериментальные данные о магнетосопротивлении металлов плохо согласуются с формулой (3.189). При очень слабых магнитных полях $\Delta\rho/\rho$ действительно пропорционально B^2 , однако с ростом B возрастание $\Delta\rho/\rho$ становится пропорциональным B и к насыщению не стремится. Кроме того, наблюдаемые на опыте значения C_0 на несколько порядков больше

теоретических. Кроме того, на опыте не подтверждается и температурная зависимость $\Delta\rho/\rho$. Главная причина всех этих отличий, как отмечено в [2], заключается в сложной структуре энергетического спектра электронов.

В [4] построена теория гальваномагнитных явлений в металлах, учитывающая сложную форму поверхности Ферми ($\mathcal{E} = \mu_0$). Авторами [4] показано, что асимптотическое поведение компонент гальваномагнитного тензора в сильных магнитных полях существенно зависит от топологии поверхности Ферми, и в первую очередь от того, является ли поверхность Ферми открытой или закрытой, т. е. проходит она непрерывно через все \mathbf{k} -пространство или распадается на замкнутые поверхности, повторяющиеся в пространстве обратной решетки.

3.7.4. Термомагнитные явления

Из термомагнитных явлений рассмотрим только поперечный эффект Нернста. Так же, как и в случае гальваномагнитных явлений, общая структура уравнений (3.139)–(3.140) и выражений для коэффициентов b_1 и b_2 (3.141), (3.142) сохраняется при любой степени вырождения носителей тока, если только под символом усреднения $\langle \dots \rangle$ понимать усреднение (3.159). Это означает, что для постоянной Нернста Q можно воспользоваться выражением (3.144) и получить из него выражения для слабых и сильных магнитных полей.

Слабые магнитные поля. В слабых магнитных полях ($\gamma\tau B \ll 1$) постоянная Нернста имеет вид (3.147)

$$Q = \left(\frac{k_0}{e} \right) \frac{e}{m^*} \frac{\langle \tau \rangle \langle \tau^2 x \rangle - \langle \tau^2 \rangle \langle \tau x \rangle}{\langle \tau \rangle^2}. \quad (3.191)$$

Из этого выражения непосредственно следует, что в первом приближении по вырождению $Q = 0$. Это означает, что для того чтобы имел место эффект Нернста, необходимо наличие различных групп электронов, которые по-разному рассеиваются.

Если время релаксации τ от энергии не зависит, то Q также равно нулю. В случае степенной зависимости (3.56) во втором при-

ближении по вырождению

$$Q = \frac{\pi^3}{3} r \left(\frac{k_0}{e} \right) \left(\frac{e\tau(\mu_0)}{m^*} \right) \left(\frac{k_0 T}{\mu_0} \right), \quad (3.192)$$

где было использовано разложение (3.166).

Из (3.192) видно, что знак эффекта, так же как и в невырожденном случае, совпадает со знаком параметра r . Наличие множителя $k_0 T / \mu_0$ обуславливает малость эффекта. В промежуточной области вырождения Q может быть выражено через интегралы Ферми.

Сильные магнитные поля. В случае сильного магнитного поля ($\gamma\tau B \gg 1$) из выражения (3.151) следует, что в первом приближении по вырождению при степенной зависимости времени релаксации от энергии (3.56) постоянная Нернста будет иметь вид

$$Q = \frac{\pi^3}{3} r \left(\frac{k_0}{e} \right) \frac{m^*}{e\tau\mu_0 B^2} \left(\frac{k_0 T}{\mu_0} \right). \quad (3.193)$$

Для этого выражения остается справедливым все, что было сказано про (3.192).

Изменение термоэдс α в магнитном поле может быть рассмотрено аналогично предыдущему случаю.

4. Высокочастотная электропроводность тонкой цилиндрической проволоки из металла

Электрические свойства проводящих материалов, линейный размер которых R_0 сравним с длиной свободного пробега носителей заряда λ , существенно отличаются от свойств массивных образцов. Это отличие с классической точки зрения связано с тем, что в случае $R_0 \leq \lambda$ взаимодействие электронов с границей образца начинает оказывать заметное влияние на их отклик на внешние электромагнитные поля. Следствием этого являются особые физические свойства образца, например электропроводность обнаруживает нетривиальную зависимость от отношения R_0/λ [1].

В работе [6] подтверждается важный факт: удельное электрическое сопротивление тонких металлических проволок (при заданной температуре) зависит от геометрии проволок. В [6] непосредственно измерялось электрическое сопротивление тонких металлических проволок прямоугольного сечения.

В качестве аппарата, способного описывать отклик носителей заряда на электромагнитные поля с учетом их взаимодействия с границей образца, может быть использована стандартная кинетическая теория электропроводности. В этом случае ограничения на соотношение между длиной свободного пробега электронов и размером образца не накладываются (разумеется, предполагаем, что условия квазиклассичности, рассмотренные в параграфе 2.3, выполняются).

Решение задачи может быть получено для произвольного вырождения, однако математические преобразования при этом будут громоздкими и потеряют некоторую наглядность. Поэтому ограни-

чимся рассмотрением случая сильно вырожденного полупроводника или металла.

Заметим, что задачи о проводимости тонких проволок становятся особенно актуальными в связи с бурным развитием микроэлектроники, где такие проволоки широко используются. Новые явления, которые не имеют места в массивных образцах, могут служить источником дополнительных сведений об основных физических свойствах кристаллов.

4.1. Уравнение Больцмана для вырожденного электронного газа в слабом переменном электрическом поле

Рассмотрим задачу об электропроводности однородной цилиндрической металлической проволоки из немагнитного материала радиуса R_0 и длины L (считаем, что $R_0 \gg L$), к концам которой приложено переменное электрическое поле \mathbf{E} частоты ω , направленное вдоль оси цилиндра. Изменением электрического поля в пространстве, равно как и влиянием магнитного поля на поведение носителей заряда, будем пренебрегать.

Пространственным изменением напряженности электрического поля в рассматриваемой задаче можно пренебречь, если длина свободного пробега носителей заряда λ достаточно мала по сравнению с длиной волны электромагнитного поля $\lambda_k = 2\pi/k$. Типичные значения длины свободного пробега электронов λ во многих интересных полупроводниках и металлах при комнатных температурах составляют $10^{-8} \div 10^{-6}$ м. Таким образом, выбранная аппроксимация оправдана в довольно широком диапазоне длин волн.

Из выражения для силы Лоренца $\mathbf{F} = e(\mathbf{E} + [\mathbf{v}\mathbf{B}])$ следует, что ее магнитная составляющая мала, когда средняя скорость носителей заряда мала по сравнению со скоростью света c в пустоте [3]. Действительно, напряженности электрического и магнитного полей в электромагнитной волне связаны друг с другом. Так, в плоской волне они относятся как $\sqrt{\mu_0\mu}/\sqrt{\varepsilon_0\varepsilon}$, здесь ε_0 и μ_0 – электрическая и магнитная постоянные соответственно, ε и μ – значения электрической и магнитной проницаемости на соответствующей частоте. Таким образом, магнитное поле можно не учитывать, если выпол-

няется условие $vB/E \approx v\sqrt{\mu\varepsilon}/c \approx v\sqrt{\varepsilon}/c \ll 1$.

Скин-эффект не учитывается (предполагается, что $R_0 \ll \delta$ – глубины скин-слоя).

В рассматриваемых условиях кинетическое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}f + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\nabla_{\mathbf{k}}f = I_{\text{СТ}}, \quad (4.1)$$

где $I_{\text{СТ}}$ – интеграл столкновений (2.8).

Когда размеры образца намного больше длины свободного пробега, то число носителей тока, взаимодействующих с поверхностью, намного меньше общего числа носителей заряда, поэтому $I_{\text{СТ}}$ определяется рассеянием на различных дефектах в объеме или на фоновых. Если же размеры кристалла – порядка длины свободного пробега носителей заряда, то взаимодействие носителей с поверхностью становится существенным и его необходимо учитывать в интеграле столкновений. Предполагая независимость рассеяния носителей в объеме и на поверхности, правую часть уравнения (4.1) можно представить в виде [1]

$$I_{\text{СТ}} = I_0 + I_S, \quad (4.2)$$

где I_0 и I_S – интегралы столкновений, определяемые объемным и поверхностным рассеяниями, соответственно. Известно, что при выполнении определенных условий (см. разделы 2.1.1 и 2.2) можно ввести время релаксации для объемного рассеяния $\tau(\mathcal{E})$, т. е. интеграл I_0 можно представить в виде

$$I_0 = -\frac{f - f_0}{\tau(\mathcal{E})} = -\frac{f_1}{\tau(\mathcal{E})}, \quad (4.3)$$

где $f_1 = f - f_0$ – неравновесная часть функции распределения.

Что касается I_S , то его, вообще говоря, также надо записать через вероятность рассеяния на различных поверхностных дефектах, как (2.50), и выразить через время релаксации поверхностного рассеяния подобно (2.56). Однако такой подход приводит к сложному интегро-дифференциальному 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 (4.2) оставляют только интеграл объемного столкновения $I_{CT} = I_0$, а поверхностное рассеяние учитывают с помощью граничных условий, налагаемых на функцию распределения. О граничных условиях будет сказано ниже.

Периодическое электрическое поле удобно записать в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t), \quad (4.4)$$

где \mathbf{E}_0 – амплитуда напряженности электрического поля, а произвольная начальная фаза положена равной нулю.

Электрическое поле (4.4) воздействует на электроны проводимости и вызывает отклонение их функции распределения f от равновесной фермиевской f_0 (1.1):

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_0(\mathcal{E}) + f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}), \quad (4.5)$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор (начало координат выбирается на оси проволоки).

В случае простой сферически-симметричной зонной структуры энергия электронов проводимости имеет вид (см. (3.29), (3.30) и (3.2), (3.3))

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} = \frac{m^{*2} v^2}{2}.$$

Для равновесной функции распределения $f_0(\mathcal{E})$ далее используется ступенчатая аппроксимация (параграф 1.2):

$$f_0(\mathcal{E}) = \Theta(\mu - \mathcal{E}) = \begin{cases} 1, & 0 \leq \mathcal{E} \leq \mu, \\ 0, & \mathcal{E} > \mu, \end{cases}$$

где $\mu = \mathcal{E}_0 = m^* v_0^2 / 2$ – максимальная кинетическая энергия электрона на поверхности Ферми (см. параграф 1.2 и приложение 1).

С учетом (4.3) – (4.5) кинетическое уравнение (4.1) преобразуется к виду

$$-i\omega f_1 + \mathbf{v} \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} + e(\mathbf{v} \mathbf{E}) \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} = -\frac{f_1}{\tau}, \quad (4.6)$$

здесь также использованы соотношения (3.3), (3.8).

Отклонение $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, возникающее под действием электрического поля (4.4), от равновесной фер-

миевской $f_0(\mathcal{E})$ приводит к появлению внутри проволоки высокочастотного тока (см. (3.27), (3.29), (3.30)):

$$\mathbf{j} = 2e \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \int \mathbf{v} f_1 d^3v. \quad (4.7)$$

Таким образом, для нахождения тока (4.7) необходимо найти функцию распределения $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ как решение уравнения (4.6) с электрическим полем в виде (4.4).

4.1.1. Граничные условия

Однозначное решение поставленной задачи возможно при выборе граничного условия для неизвестной функции $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ на цилиндрической поверхности металлической проволоки.

Впервые зеркально-диффузные граничные условия к кинетическому уравнению для функции распределения молекул идеального газа, находящегося вблизи стенки, были предложены Максвеллом с помощью введения параметра зеркальности q , имеющего следующий смысл: коэффициент зеркальности показывает, что q -я часть молекул, падающих на стенку, отражается зеркально, следовательно, $(1 - q)$ -я часть молекул рассеивается стенкой диффузно, т. е. q есть вероятность того, что молекулы газа отразятся от стенки зеркально. Аналогичные диффузно-зеркальные граничные условия были предложены Фуксом [7] при решении кинетической задачи о проводимости в тонких пленках для функции распределения электронов: коэффициент зеркальности q определяется как вероятность зеркального отражения электронов от внутренней поверхности пленки. С учетом вышесказанного условие зеркально-диффузного отражения электронов от внутренней поверхности проволоки будет иметь следующий вид:

$$f_1(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp, \mathbf{v}_z) = q f_1(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}'_\perp, \mathbf{v}_z) \quad \text{при} \quad \begin{cases} \mathbf{r}_\perp = R_0, \\ \mathbf{r}_\perp \mathbf{v}_\perp < 0, \end{cases} \quad (4.8)$$

где \mathbf{r}_\perp и \mathbf{v}_\perp – соответственно компоненты радиус-вектора электрона и его скорости в плоскости, перпендикулярной оси симметрии проволоки; а

$$\mathbf{v}'_\perp = \mathbf{v}_\perp - \frac{2\mathbf{r}_\perp(\mathbf{r}_\perp \mathbf{v}_\perp)}{R_0^2}$$

– вектор скорости, в который при зеркальном отражении от внутренней поверхности проволоки в точке \mathbf{r}_\perp ($\mathbf{r}_\perp = R_0$) переходит вектор \mathbf{v}_\perp ; \mathbf{v}_z – составляющая скорости электрона вдоль оси симметрии проволоки; q – коэффициент зеркальности (вероятность зеркального отражения): $0 \leq q \leq 1$. При $q = 0$ получаем условие диффузного отражения электронов проводимости от внутренней поверхности металлической проволоки, а при $q = 1$ – условие чисто зеркального отражения. При значениях $q \neq 0$ и $q \neq 1$ получаем различные варианты смешанного (зеркально-диффузного) отражения электронов.

4.1.2. Неравновесная функция распределения

Кинетическое уравнение (4.6) решается методом характеристик [8]. Изменение f_1 вдоль траектории (характеристики)

$$d\mathbf{r} = \mathbf{v}dt \quad (4.9)$$

определяется уравнением

$$df_1 = - \left(\nu f_1 + e(\mathbf{v}\mathbf{E}) \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) dt, \quad (4.10)$$

где

$$\nu = \frac{1}{\tau} - i\omega \quad (4.11)$$

– комплексная частота рассеяния.

Граничное условие (4.8) позволяет проследить за изменением функции $f_1(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp, \mathbf{v}_z)$ вдоль зеркально отражающейся траектории. В точке отражения $t = t_n$ функция $f_1(t)$ испытывает скачок:

$$f_1(t_n + 0) = qf_1(t_n - 0). \quad (4.12)$$

Знак $+/-$ обозначает предел функции $f_1(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp, \mathbf{v}_z)$ в точке отражения t_n справа или слева по времени пролета.

При зеркальном отражении сохраняется угловой момент $[\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp] = [\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}'_\perp]$, поэтому на рассматриваемой траектории $[\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp] = const$. Кроме того сохраняется проекция скорости электрона на ось Z (см. ниже), поэтому величина $\mathbf{v}\mathbf{E}$ постоянна вдоль траектории.

Разность $t_n - t_{n-1}$ не зависит от номера n точки отражения:

$$t_n = nT + \text{const}, \quad n \in Z,$$

где T – время пролета электрона со скоростью \mathbf{v}_\perp от точки $\mathbf{r}_{(n-1)\perp}$ до точки $\mathbf{r}_{n\perp}$:

$$T = -\frac{2(\mathbf{v}_\perp \cdot \mathbf{r}_{n\perp})}{v_\perp^2}. \quad (4.13)$$

Решением уравнения (4.10) является функция

$$f_1 = C \exp(-\nu t') + A, \quad (4.14)$$

где

$$A = -e \frac{(\mathbf{v}\mathbf{E})}{\nu} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}};$$

C – константа интегрирования.

Параметр t' в выражении (4.14) имеет смысл времени движения электрона вдоль траектории от границы, на которой происходит отражение, до точки \mathbf{r}_\perp со скоростью \mathbf{v}_\perp . Проведем решение этого уравнения на интервале (t_{n-1}, t_n) для случая зеркального отражения электронов от внутренней поверхности проволоки.

В момент начала отсчета времени ($t' = 0$)

$$f_1(t_{n-1} + 0) = C + A,$$

отсюда выразим постоянную интегрирования C :

$$C = f_1(t_{n-1} + 0) - A.$$

Теперь получим связь между начальными значениями функции f_1 на двух соседних звеньях траектории. Поскольку $t_n - 0 = t_{n-1} + T$, то

$$\begin{aligned} f_1(t_n - 0) &= (f_1(t_{n-1} + 0) - A) \exp(-\nu T) + A = \\ &= A(1 - \exp(-\nu T)) + f_1(t_{n-1} + 0) \exp(-\nu T). \end{aligned}$$

Применяя условие (4.12), получаем

$$f_1(t_n + 0) = q \{A(1 - \exp(-\nu T)) + f_1(t_{n-1} + 0) \exp(-\nu T)\}.$$

Выражая затем с помощью этого рекуррентного соотношения $f_1(t_{n-1} + 0)$ через $f_1(t_{n-2} + 0)$ и т. д., приходим к выражению для $f_1(t_n + 0)$ через сумму бесконечной геометрической прогрессии со знаменателем $q \exp(-\nu T)$. Суммируя ее, имеем

$$f_1(t_n + 0) = \frac{qA(1 - \exp(-\nu T))}{1 - q \exp(-\nu T)}. \quad (4.15)$$

Чтобы найти конкретный вид решения уравнения (4.10), воспользуемся формулой (4.14) и начальным условием (4.15). Когда $t' = 0$,

$$\frac{qA(1 - \exp(-\nu T))}{1 - q \exp(-\nu T)} = C + A,$$

откуда

$$C = A \left\{ \frac{q(1 - \exp(-\nu T))}{1 - q \exp(-\nu T)} - 1 \right\} = A \left\{ \frac{q - 1}{1 - q \exp(-\nu T)} \right\}.$$

Таким образом, для функции $f_1(t')$ получим

$$f_1(t') = A \left\{ \frac{q - 1}{1 - q \exp(-\nu T)} \right\} \exp(-\nu t') + A \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\nu t')}{1 - q \exp(-\nu T)} + 1 \right\}. \quad (4.16)$$

Параметры t' и T можно связать с координатами точки $(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp)$ (при $n = 0$, $\mathbf{v}_{0\perp} = \mathbf{v}_\perp$) условиями (см. (4.9) и (4.13)):

$$\mathbf{r}_\perp = \mathbf{r}_{0\perp} + \mathbf{v}_\perp t', \quad \mathbf{v}_\perp \mathbf{r}_{0\perp} < 0, \quad r_{0\perp}^2 = R_0^2, \quad T = -\frac{2(\mathbf{v}_\perp \mathbf{r}_{0\perp})}{v_\perp^2},$$

где $\mathbf{r}_{0\perp}$ – компонента радиус-вектора электрона в плоскости, перпендикулярной оси симметрии, в момент отражения от цилиндрической границы проволок. Учитывая, что

$$r_{0\perp}^2 = (\mathbf{r}_\perp - \mathbf{v}_\perp t')^2 = R_0^2,$$

выразим t' как корень квадратного уравнения:

$$t' = \left\{ \mathbf{r}_\perp \mathbf{v}_\perp + [(\mathbf{r}_\perp \mathbf{v}_\perp)^2 + (R_0^2 - r_\perp^2)v_\perp^2]^{1/2} \right\} / v_\perp^2, \quad (4.17)$$

$$T = 2 [(\mathbf{r}_\perp \mathbf{v}_\perp)^2 + (R_0^2 - r_\perp^2)v_\perp^2]^{1/2} / v_\perp^2. \quad (4.18)$$

Соотношения (4.16)–(4.18) полностью определяют функцию распределения $f_1(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp, \mathbf{v}_z)$ в случае зеркально-диффузного отражения электронов от внутренней поверхности цилиндрической проволоки.

4.2. Расчет проводимости

Найденная функция распределения позволяет определить ток (4.7) внутри проволоки. При вычислении интеграла (4.7) удобно перейти к цилиндрическим координатам как в пространстве координат (r_\perp, φ, z ; полярная ось – ось Z ; вектор \mathbf{E}_0 параллелен оси Z), так и в пространстве скоростей (v_\perp, α, v_z ; полярная ось – ось v_z). Ось симметрии проволоки совпадает с осью Z . Поле (4.4) в цилиндрических координатах имеет лишь z -компоненту:

$$\mathbf{E} = E_z \mathbf{e}_z, \quad E_z = E_0 \exp(-i\omega t). \quad (4.19)$$

Соответственно, и ток (4.7) обладает лишь z -компонентой (линии тока являются прямыми, параллельными оси Z) и вычисляется по формуле

$$j_z = E_z 2e^2 \left(\frac{m^*}{h}\right)^3 \frac{1}{v} \int v_z^2 \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) \left\{ \frac{(q-1) \exp(-\nu t')}{1 - q \exp(-\nu T)} + 1 \right\} d^3 v. \quad (4.20)$$

Воспользовавшись свойствами δ -функции, имеем

$$\begin{aligned} \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) &= \frac{2}{m^*} \delta(v_z^2 + v_\perp^2 - v_0^2) = \frac{2}{m^*} \delta[v_z^2 - (v_0^2 - v_\perp^2)] = \\ &= \frac{2}{m^*} \delta \left[\left(v_z + \sqrt{v_0^2 - v_\perp^2} \right) \left(v_z - \sqrt{v_0^2 - v_\perp^2} \right) \right] = \\ &= \frac{2}{m^* \left(v_z + \sqrt{v_0^2 - v_\perp^2} \right)} \delta \left(v_z - \sqrt{v_0^2 - v_\perp^2} \right). \end{aligned}$$

В силу симметрии задачи интегрирование по всему диапазону скоростей v_z заменяется интегрированием по положительному диапазону и результат удваивается, поэтому, подставляя пределы инте-

гирования, приходим к выражению

$$j_z = E_z 2e^2 \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \frac{2}{\nu} \frac{2}{m^*} \int_0^{v_0} \int_0^\pi \int_0^\infty v_z^2 \frac{\delta \left(v_z - \sqrt{v_0^2 - v_\perp^2} \right)}{\sqrt{v_0^2 - v_\perp^2}} \times \\ \times \left\{ \frac{(q-1) \exp(-\nu t')}{1 - q \exp(-\nu T)} + 1 \right\} v_\perp dv_\perp d\alpha dv_z. \quad (4.21)$$

Здесь также учтено, что движение электронов симметрично относительно любой диаметральной плоскости, в которой лежит точка их положения на траектории, поэтому можно считать, что угол α в пространстве скоростей изменяется от 0 до π , и удвоить результат интегрирования по этой переменной.

Проинтегрировав по переменной v_z , имеем

$$j_z = \frac{3ne^2 E_z}{\pi v_0^3 m^*} \int_0^{v_0} \int_0^\pi \frac{\sqrt{v_0^2 - v_\perp^2}}{\nu} \left\{ \frac{(q-1) \exp(-\nu t')}{1 - q \exp(-\nu T)} + 1 \right\} v_\perp dv_\perp d\alpha, \quad (4.22)$$

где использована стандартная формула для концентрации электронов проводимости в металлах:

$$n = 2 \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \int f_0 d^3 v = 2 \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \frac{4\pi v_0^3}{3}.$$

Для дальнейших вычислений и анализа результатов введем новые переменные:

$$\xi = \frac{r_\perp}{R_0}, \quad \varrho = \frac{v_\perp}{v_0},$$

$$\Delta = \nu \frac{R_0}{v_0} = \left(\frac{1}{\tau} + i\omega \right) \frac{R_0}{v_0} = \Lambda - i\Omega$$

и преобразуем выражения (4.17) и (4.18):

$$t' = \frac{R_0}{v_\perp} \left(\xi \cos \alpha + \sqrt{1 - \xi^2 \sin^2 \alpha} \right) = \frac{R_0}{v_\perp} \eta,$$

$$T = \frac{R_0}{v_\perp} 2\sqrt{1 - \xi^2 \sin^2 \alpha} = \frac{R_0}{v_\perp} \eta_0.$$

Здесь учтено, что $\mathbf{r}_\perp \mathbf{v}_\perp = r_\perp v_\perp \cos \alpha$.

Тогда плотность тока (4.22) можно представить в виде [8]:

$$j_z = \frac{3ne^2 R_0 E_z}{\pi v_0 m^*} \int_0^1 \int_0^\pi \frac{\rho \sqrt{1 - \rho^2}}{\Delta} \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\Delta \eta / \rho)}{1 - q \exp(-\Delta \eta_0 / \rho)} + 1 \right\} d\rho d\alpha. \quad (4.23)$$

Проинтегрировав выражение (4.23), определяем полный ток I через поперечное сечение цилиндрической проволоки:

$$I = \frac{6ne^2 R_0^3 E_z}{v_0 m^*} \int_0^1 \xi d\xi \int_0^1 \int_0^\pi \frac{\rho \sqrt{1 - \rho^2}}{\Delta} \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\Delta \eta / \rho)}{1 - q \exp(-\Delta \eta_0 / \rho)} + 1 \right\} d\rho d\alpha. \quad (4.24)$$

Затем, формально воспользовавшись законом Ома в виде $I = GU$, где U – напряжение на концах проволоки, получаем формулу для расчета интегральной проводимости проволоки G (электрическое поле внутри проволоки однородно, поэтому $U = E_z L$) [8]:

$$G = \frac{6ne^2 R_0^3}{v_0 m^* L} \int_0^1 \xi d\xi \int_0^1 \int_0^\pi \frac{\rho \sqrt{1 - \rho^2}}{\Delta} \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\Delta \eta / \rho)}{1 - q \exp(-\Delta \eta_0 / \rho)} + 1 \right\} d\rho d\alpha. \quad (4.25)$$

В случае стационарного электрического поля (когда $\Omega = 0$, $\Delta = \Lambda = R_0 / \lambda$) это выражение совпадает с результатом работы [8]. Когда $q = 0$ (диффузное отражение электронов), из (4.25) следует, что

$$G = \frac{6ne^2 R_0^3}{v_0 m^* L} \int_0^1 \xi d\xi \int_0^1 \int_0^\pi \frac{\rho \sqrt{1 - \rho^2} (1 - \exp(-\Delta \eta / \rho))}{\Delta} d\rho d\alpha.$$

Интегральную проводимость (4.25) (заметим, что она является комплексной величиной) представим в виде

$$G = G_0 P(\Lambda, \Omega), \quad \text{где} \quad G_0 = \frac{6ne^2 R_0^3}{v_0 m^* L}, \quad (4.26)$$

$$P(\Lambda, \Omega) = \int_0^1 \xi d\xi \int_0^1 \int_0^\pi \frac{\rho \sqrt{1 - \rho^2}}{\Delta} \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\Delta \eta / \rho)}{1 - q \exp(-\Delta \eta_0 / \rho)} + 1 \right\} d\rho d\alpha. \quad (4.27)$$

Численный расчет модуля $M(\Lambda, \Omega)$ и аргумента $A(\Lambda, \Omega)$ (фазы) безразмерной интегральной проводимости $P(\Lambda, \Omega)$ вытянутой цилиндрической проволоки представлен на рисунках 4.1 – 4.4.

4.3. Обсуждение результатов

В пределе чисто зеркального отражения электронов на границе проволоки ($q = 1$) для расчета безразмерной интегральной проводимости $P(\Lambda, \Omega)$ получаем выражение

$$P(\Lambda, \Omega) = \frac{\pi}{6} \frac{1}{\Delta(\Lambda, \Omega)} = \frac{\pi}{6} \frac{\Lambda + i\Omega}{\Lambda^2 + \Omega^2}. \quad (4.28)$$

Выражение (4.28) (с учетом (4.26)) соответствует классическому результату [3] для цилиндрической проволоки (формула Друде). Это связано с тем, что при $q = 1$ граница проволоки не оказывает влияния на функцию распределения электронов $f_1(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp, \mathbf{v}_z)$. Высокочастотный ток внутри зеркально отражающей металлической проволоки удовлетворяет локальному закону Ома при любом соотношении между радиусом проволоки R_0 и длиной свободного пробега электронов λ . Таким образом, при зеркальном отражении отсутствуют нелокальные (поверхностные) эффекты.

Независимо от характера отражения электронов на границе (при любых q) с ростом размера проволоки (при $\Lambda \gg 1$) также имеет место макроскопическая асимптотика (4.28). В этом случае в формуле (4.27) можно пренебречь членом с экспонентами ввиду их быстрого затухания.

На рис. 4.1 – 4.2 представлены зависимости модуля M и аргумента A (фазы) безразмерной интегральной проводимости от безразмерной частоты электрического поля Ω . Безразмерная обратная длина свободного пробега электронов Λ одинакова, а коэффициент отражения электронов q разный для каждой кривой. Из анализа хода кривых на рис. 4.1 следует, что модуль M безразмерной интегральной проводимости доминирует по величине для проволок с наибольшим коэффициентом отражения электронов q . При больших безразмерных частотах электрического поля ($\Omega > 1$) все зависимости сливаются. Это объясняется тем, что электроны внутри проволоки за период не успевают значительно ускориться под действием электрического поля. Аргумент A (фаза) безразмерной

интегральной проводимости (см. рис. 4.2) при любом значении

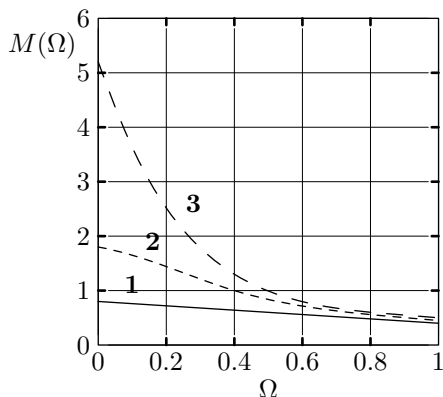


Рис. 4.1. Зависимость модуля M безразмерной интегральной проводимости от безразмерной частоты электрического поля Ω при $\Lambda = 0, 1$: кривые 1, 2, 3 – $q = 0; 0, 5; 1$ – соответственно

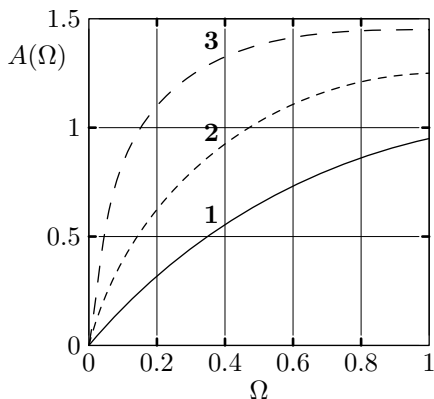


Рис. 4.2. Зависимость аргумента A (фазы) безразмерной интегральной проводимости от безразмерной частоты электрического поля Ω при $\Lambda = 0, 1$: кривые 1, 2, 3 – $q = 0; 0, 5; 1$ – соответственно

безразмерной частоты Ω больше у проволок, в которых электроны отражаются от границы чисто зеркально. С уменьшением коэффициента отражения отставание по фазе тока от напряжения тоже уменьшается при любом значении безразмерной частоты Ω . При

больших безразмерных частотах электрического поля для всех проволок (при любых q) ток отстает по фазе на $\pi/2$. Таким образом, в этом пределе проводимость становится чисто мнимой величиной.

На рис. 4.3 – 4.4 приведены графики зависимостей модуля M и аргумента A (фазы) безразмерной интегральной проводимости от безразмерной обратной длины свободного пробега электронов Λ . Безразмерная частота электрического поля Ω одинакова, а коэффициент отражения электронов q разный для каждой кривой.

Из рис. 4.3 видно, что модуль безразмерной интегральной проводимости наиболее велик для случая ($\Lambda \ll 1$), который реализуется в проволоках из чистого металла. Причем модуль безразмерной интегральной проводимости максимален для проволок, в которых электроны испытывают зеркальное отражение от внутренней границы. С уменьшением коэффициента отражения отставание по фазе тока от напряжения уменьшается для любого значения Λ . С увеличением Λ все зависимости сливаются, так как имеет место макроскопическая асимптотика.

Для каждого значения Λ (см. рис. 4.4) сдвиг по фазе наиболее заметен внутри проволок, в которых происходит зеркальное рассеяние электронов на поверхности.

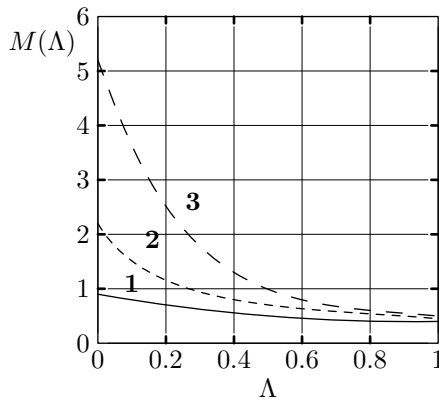


Рис. 4.3. Зависимость модуля M безразмерной интегральной проводимости от безразмерной обратной длины свободного пробега электронов Λ при $\Omega = 0, 1$: кривые 1, 2, 3 – $q = 0; 0, 5; 1$ – соответственно

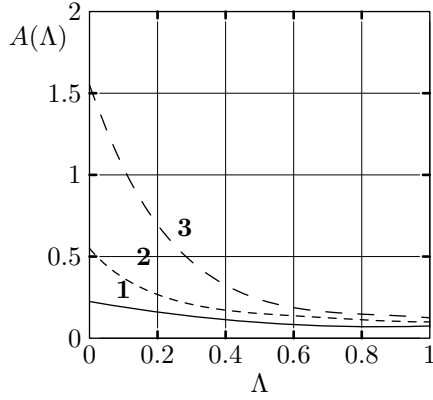


Рис. 4.4. Зависимость аргумента A (фазы) безразмерной интегральной проводимости от безразмерной обратной длины свободного пробега электронов Λ при $\Omega = 0, 1$: кривые 1, 2, 3 – $q = 0; 0, 5; 1$ – соответственно

С уменьшением коэффициента отражения электронов сдвиг по фазе между током и напряжением становится менее выраженным.

5. Высокочастотная электропроводность тонкой цилиндрической проволоки из металла в продольном магнитном поле

Вопросы, касающиеся проводимости тонкой цилиндрической проволоки, помещенной в магнитное поле, обсуждались в работах [9–10]. В упомянутых статьях применяется подход, основанный на решении кинетического уравнения Больцмана для электронов в металле. В [9] для диффузного граничного условия исследовано влияние продольного магнитного поля на электрическую проводимость металлической проволоки круглого сечения. В этой работе численными методами получены результаты для отдельных значений параметров задачи, не согласующиеся с экспериментальными данными.

В данной главе приводится решение кинетической задачи об электрической проводимости цилиндрической проволоки из металла, помещенной в продольное магнитное поле. Представлено теоретическое объяснение экспериментальных данных по магнетосопротивлению тонкой цилиндрической проволоки [10].

5.1. Кинетическое уравнение и граничные условия

Рассмотрим прямую цилиндрическую проволоку из немагнитного металла радиуса R_0 и длины L (считаем, что $L \gg R_0$), помещенную в магнитное поле с индукцией B , к концам которой приложено переменное напряжение частоты ω . Направление электрического и магнитного полей совпадают с осью симметрии проволоки.

Скин-эффект не учитывается (предполагается, что $R_0 \ll \delta$, где δ – глубина скин-слоя).

Однородное периодическое во времени электрическое поле (4.4) действует на электроны проводимости и вызывает отклонение их функции распределения f_1 (4.5) от равновесной фермиевской f_0 (1.1). В результате внутри проволоки возникает высокочастотный ток (4.7). Для равновесной функции распределения f_0 далее используется ступенчатая аппроксимация (см. параграф 1.2).

Задача сводится к отысканию отклонения функции распределения f_1 от равновесной функции f_0 (1.1), возникающего под действием высокочастотного поля (4.4). В линейном приближении по электрическому полю функция f_1 удовлетворяет кинетическому уравнению Больцмана:

$$-i\omega f_1 + \mathbf{v} \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} + e(\mathbf{v}\mathbf{E}) \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} + \frac{e}{m^*} [\mathbf{v}\mathbf{B}] \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{v}} = -\frac{f_1}{\tau}, \quad (5.1)$$

где предполагается стационарная зависимость от времени ($f_1 \sim \exp(-i\omega t)$), а интеграл столкновений взят в приближении времени релаксации электронов τ .

Для однозначного определения функции распределения f_1 необходимо задать для нее граничное условие на цилиндрической поверхности проволоки. В качестве такового принимаем условие зеркально-диффузного отражения электронов от этой поверхности (4.8). Решение кинетического уравнения (5.1) методом характеристик [10] и вид функции распределения (4.16) для этого случая описаны в параграфе 4.1.2.

Параметр t' в выражении (4.16) имеет смысл времени движения электрона со скоростью \mathbf{v} вдоль траектории от границы, на которой происходит отражение, до точки \mathbf{r} . Параметр T – период движения электрона, т. е. промежуток времени между двумя последовательными столкновениями электрона с поверхностью проволоки.

Определение параметров t' и T является центральным моментом данной задачи, т. к. наличие продольного магнитного поля приводит к тому, что часть электронов при отражении от границы проволоки двигается до следующего соударения с границей по винтовой линии, а траектория остальных электронов с границей проволоки не пересекается ($t' \rightarrow \infty$)!

Рассмотрим проекцию траектории электрона на плоскость, перпендикулярную оси проволоки. Эта проекция имеет вид дуги окружности. Понятно, что в случае пересечения с границей

$$t' = r_B \varphi / v_{\perp}, \quad (5.2)$$

где $r_B = m^* v_{\perp} / eB$ – радиус дуги, а φ – соответствующий данной дуге центральный угол.

5.2. Расчет проводимости

Найденная функция распределения (4.16) с учетом преобразований, выполненных в параграфе 4.2, позволяет определить плотность тока внутри проволоки (4.22).

Для дальнейших вычислений и анализа результатов введем новые переменные:

$$\xi = \frac{r_{\perp}}{R_0}, \quad \varrho = \frac{v_{\perp}}{v_0}, \quad \mu = \frac{eR}{m^* v_0} B,$$

$$\Delta = \nu \frac{R_0}{v_0} = \left(\frac{1}{\tau} + i\omega \right) \frac{R_0}{v_0} = \Lambda - i\Omega,$$

тогда плотность тока (4.22) можно представить в виде

$$j_z = \frac{3ne^2 R_0 E_z}{\pi v_0 m^* \Delta} \int_0^1 \int_0^{\pi} \rho \sqrt{1 - \rho^2} \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\varphi \Delta / \mu)}{1 - q \exp(-\varphi^* \Delta / \mu)} + 1 \right\} dp d\alpha. \quad (5.3)$$

Для интегрирования выражения (5.3) углы φ (центральный угол дуги окружности, по которой движется электрон в случае пересечения его траектории с границей проволоки) и φ^* (через этот угол выражается период T движения электрона) необходимо связать с углом α в пространстве скоростей (это угол между векторами \mathbf{r}_{\perp} и \mathbf{v}_{\perp}).

Для определения угла φ рассмотрим комплексную плоскость $z = x + iy$. Удобство использования комплексной плоскости состоит в том, что уравнение окружности, соответствующей движению

электрона с центром в точке (x_0, y_0) и радиусом r_B , записывается достаточно просто:

$$z = z_0 + r_B \exp [i(\varphi_0 + \varphi)],$$

где угол φ_0 задает наклон радиуса r_B дуги к оси x в момент отражения электрона от границы проволоки.

Определим в точке \mathbf{r} угол φ для электрона, движущегося со скоростью \mathbf{v} . Ось x проведем из середины проволоки в точку \mathbf{r}_\perp (рис. 5.1), т. е. эта точка будет иметь координаты $(x, 0)$. В момент отражения электрона от границы проволоки выполняется соотношение

$$R_0 \exp(i\psi_0) = z_0 + r_B \exp(i\varphi_0),$$

где угол ψ_0 задает наклон проекции \mathbf{r}_\perp радиус-вектора электрона к оси x в момент отражения (при этом $|\mathbf{r}_\perp| = R_0$). Поэтому получаем следующую связь между величинами, задающими положение электрона в комплексной плоскости:

$$r_\perp + \delta \exp(i\varphi_0) = R_0 \exp(i\psi_0) + r_B \exp [i(\varphi_0 + \varphi)]. \quad (5.4)$$

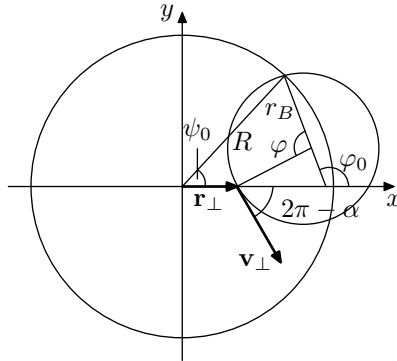


Рис. 5.1. Комплексная плоскость для определения угла φ

При указанном выше расположении координатных осей угол $\varphi = \alpha - \varphi_0 - \pi/2$ (все углы отсчитываются против часовой стрелки). Эту связь между углами φ , φ_0 и α легко получить, продифференцировав уравнение окружности $z = z_0 + r_B \exp [i(\varphi_0 + \varphi)]$ по

параметру t' с учетом соотношения (5.2):

$$\frac{\partial z}{\partial t'} = iv_{\perp} \exp [i(\varphi_0 + \varphi)] = v_{\perp} \exp \left[i(\varphi_0 + \varphi + \frac{\pi}{2}) \right] = v_{\perp} \exp(i\alpha).$$

Используя выражение (5.4), получаем

$$\begin{aligned} r_{\perp} + r_B \cos \varphi_0 &= R_0 \cos \psi_0 + r_B \cos(\varphi_0 + \varphi), \\ r_B \sin \varphi_0 &= R_0 \sin \psi_0 + r_B \sin(\varphi_0 + \varphi) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} r_{\perp} + r_B \sin(\alpha - \varphi) &= R_0 \cos \psi_0 + r_B \sin \alpha, \\ -r_B \cos(\alpha - \varphi) &= R_0 \sin \psi_0 - r_B \cos \alpha. \end{aligned}$$

Используя тригонометрические формулы синуса и косинуса разности углов и исключая из последней системы величину ψ_0 , приходим к следующему уравнению для определения угла φ :

$$(r_B - r_{\perp} \sin \alpha) \cos \varphi + r_{\perp} \cos \alpha \sin \varphi = \frac{r_{\perp}^2 + 2r_B^2 - 2r_B r_{\perp} \sin \alpha - R_0^2}{2r_B}$$

или в безразмерных переменных:

$$(\rho - \xi \mu \sin \alpha) \cos \varphi + \xi \mu \cos \alpha \sin \varphi = \frac{\xi^2 \mu^2 + 2\rho^2 - 2\rho \xi \mu \sin \alpha - \mu^2}{2\rho}. \quad (5.5)$$

Выражая косинус и синус угла φ через тангенс $\varphi/2$, получим стандартное квадратное уравнение для $\tan(\varphi/2)$, решение которого имеет вид

$$\varphi_{1,2} = 2 \arctan \left[\frac{2\rho \xi \mu \cos \alpha \mp \sqrt{D}}{\mu^2(\xi^2 - 1)} \right],$$

где

$$D = 4\rho^2(\rho^2 - 2\rho \xi \mu \sin \alpha + \xi^2 \mu^2) - [\xi^2 \mu^2 + 2\rho^2 - 2\rho \xi \mu \sin \alpha - \mu^2]^2.$$

Траектория электрона пересекается с границей проволоки, когда $D > 0$ (уравнение (5.5) имеет действительные корни). При этом время движения электронов по траектории (параметр t') – конечная положительная величина.

Когда $D < 0$ (уравнение (5.5) не имеет действительных корней), траектория электронов не пересекается с границей проволоки ($t' \rightarrow \infty$). В этом случае при проведении вычислений нужно учесть, что в выражении (5.3) пропадает член, содержащий экспоненту.

Период движения электрона, т. е. промежуток времени между двумя последовательными столкновениями электрона с поверхностью проволоки, равен

$$T = \frac{r_B \varphi^*}{v_{\perp}} = \frac{\Delta}{\mu} \varphi^*, \quad \varphi^* = 2\pi(\varphi_2 - \varphi_1).$$

Здесь φ_1 и φ_2 – корни уравнения (5.5), которые определяют точки пересечения траектории электрона с границей проволоки, причем

$$\varphi_1 = 2 \arctan \left[\frac{2\rho\xi\mu \cos \alpha - \sqrt{D}}{\mu^2(\xi^2 - 1)} \right],$$

$$\varphi_2 = 2 \arctan \left[\frac{2\rho\xi\mu \cos \alpha + \sqrt{D}}{\mu^2(\xi^2 - 1)} \right].$$

Проинтегрировав выражение (5.3), определим полный ток I через поперечное сечение цилиндрической проволоки:

$$I = \frac{6ne^2 R_0^3 E_z}{v_0 m^* \Delta} \int_0^1 \xi d\xi \int_0^1 \int_0^\pi \rho \sqrt{1 - \rho^2} \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\varphi\Delta/\mu)}{1 - q \exp(-\varphi^*\Delta/\mu)} + 1 \right\} d\rho d\alpha.$$

Затем, формально воспользовавшись законом Ома в виде $I = GU$, где U – напряжение на концах проволоки, получаем формулу для расчета интегральной проводимости проволоки G (электрическое поле внутри проволоки однородно, поэтому $U = E_z L$):

$$G = \frac{6ne^2 R_0^3}{v_0 m^* L \Delta} \int_0^1 \xi d\xi \int_0^1 \int_0^\pi \rho \sqrt{1 - \rho^2} \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\varphi\Delta/\mu)}{1 - q \exp(-\varphi^*\Delta/\mu)} + 1 \right\} d\rho d\alpha. \quad (5.6)$$

В отсутствие внешнего магнитного поля ($\mu = 0$) выражение (5.6)

совпадает с результатом работы [8]:

$$G = \frac{6ne^2 R_0^3}{v_0 m^* L \Delta} \int_0^1 \xi d\xi \int_0^1 \int_0^\pi \rho \sqrt{1 - \rho^2} \times \\ \times \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{\Delta}{\rho} \left(\xi \cos \alpha + \sqrt{1 - \xi^2 \sin^2 \alpha} \right) \right] \right\} d\rho d\alpha. \quad (5.7)$$

Интегральную проводимость (5.6) (заметим, что она является комплексной величиной) представим в виде

$$G = G_0 P(\Lambda, \Omega, \mu, q), \quad \text{где} \quad G_0 = \frac{6ne^2 R_0^3}{v_0 m^* L}, \quad (5.8)$$

$$P(\Lambda, \Omega, \mu, q) = \frac{1}{\Delta} \int_0^1 \xi d\xi \int_0^1 \int_0^\pi \rho \sqrt{1 - \rho^2} \left\{ \frac{(q - 1) \exp(-\varphi \Delta / \mu)}{1 - q \exp(-\varphi^* \Delta / \mu)} + 1 \right\} d\rho d\alpha. \quad (5.9)$$

Результаты численного расчета модуля $M(\Lambda, \Omega, \mu, q)$ и аргумента $A(\Lambda, \Omega, \mu, q)$ (фазы) безразмерной интегральной проводимости $P(\Lambda, \Omega, \mu, q)$ (5.9) вытянутой цилиндрической проволоки приведены на рис. 5.2 и 5.3 соответственно.

5.3. Обсуждение результатов

Влияние коэффициента зеркальности q электронов на модуль M и аргумент A (фазу) безразмерной интегральной проводимости P отражено на рис. 5.2. и 5.3. Рассмотрим случай небольшой безразмерной частоты Ω ($\Omega = 0.1$) электрического поля и небольшой безразмерной обратной длины свободного пробега электронов Λ ($\Lambda = 0.1$) (параметры Ω и Λ одинаковы для всех кривых на рис. 5.2 и 5.3) для трех значений безразмерной индукции μ внешнего магнитного поля.

Из рис. 5.2 и 5.3 видно, что модуль и аргумент (фаза) безразмерной интегральной проводимости P проволоки плавно изменяются с ростом коэффициента зеркальности q электронов, причем изменение этих величин наиболее заметно для проволоки, находящейся

во внешнем магнитном поле с минимальным значением безразмерной индукции μ внешнего магнитного поля. Наиболее значительно указанные величины (при выбранных для численного расчета безразмерной интегральной проводимости параметрах Ω , Λ и μ) различаются в случае чисто диффузного отражения электронов от внутренней поверхности проволоки ($q = 0$). В области больших значений коэффициента зеркальности q ($q \approx 1$) эти зависимости сливаются. Последнее обусловлено тем, что выражение для электрической проводимости (5.9) стремится к макроскопической асимптотике (4.28) (при $q \rightarrow 1$) членами, содержащими экспоненты в (5.9), можно пренебречь в силу их быстрого затухания).

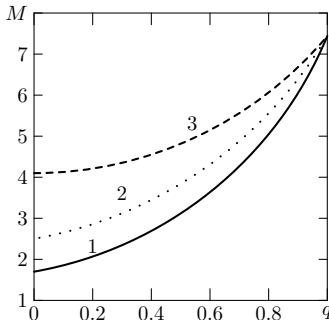


Рис. 5.2. Зависимость модуля M безразмерной интегральной проводимости проволоки от коэффициента отражения q : 1 – $\lambda = \Omega = \mu = 0.1$; 2 – $\lambda = \Omega = 0.1$, $\mu = 1$; 3 – $\lambda = \Omega = 0.1$, $\mu = 2$

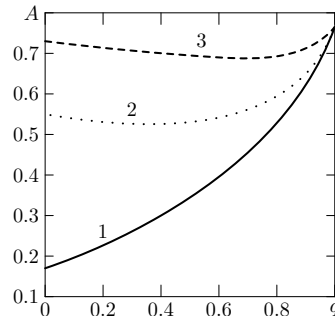


Рис. 5.3. Зависимость аргумента A (фазы) безразмерной интегральной проводимости проволоки от коэффициента отражения q : 1 – $\lambda = \Omega = \mu = 0.1$; 2 – $\lambda = \Omega = 0.1$, $\mu = 1$; 3 – $\lambda = \Omega = 0.1$, $\mu = 2$

Независимо от характера отражения электронов на границе (при любых q) и наличия продольного магнитного поля (при любых μ) с ростом радиуса проволоки, т. е. при $\Lambda \gg 1$ (в этом случае в формуле (5.9) можно пренебречь членом с экспонентами ввиду их быстрого затухания), также имеет место макроскопическая асимптотика (4.28).

На рис. 5.4 представлено сравнение экспериментально измеренного в работе [9] размерного (в мОм) интегрального магнетосопротивления S тонкой цилиндрической проволоки в случае стационар-

ного электрического поля $\Omega = 0$) и интегрального магнетосопротивления, рассчитанного для того же случая с использованием формулы (5.6) при различных значениях безразмерной индукции внешнего магнитного поля μ [10]. При проведении эксперимента использовалась натриевая проволока диаметром 30 мкм и длиной 4.5 см. Измерение магнетосопротивления проволоки проводилось при разных температурах (от 4.2 К до 15.5 К). Это эквивалентно тому, что в проволоке изменялась длина свободного пробега электронов, т. к. при изменении температуры изменяется частота объёмных столкновений электронов в металле.

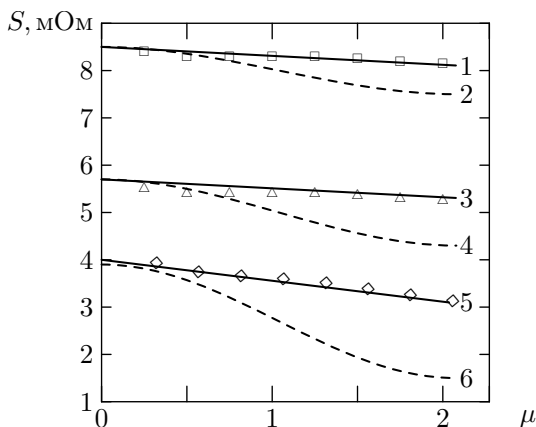


Рис. 5.4. Зависимость теоретического (кривые) и экспериментального (символы) размерного интегрального магнетосопротивления S тонкой цилиндрической проволоки в случае стационарного электрического поля ($\Omega = 0$) от безразмерной индукции внешнего магнитного поля μ : 1 — $\lambda = 1.06$, $q = 0.3$; 2 — $\lambda = 0.88$, $q = 0$; 3 — $\lambda = 0.65$, $q = 0.3$; 4 — $\lambda = 0.45$, $q = 0$; 5 — $\lambda = 0.35$, $q = 0.3$; 6 — $\lambda = 0.14$, $q = 0$;

Кривые 1, 3, 5 на рис. 5.4 построены для случая, когда отражение электронов от границы проволоки носит зеркально-диффузный характер. Чтобы подчеркнуть принципиальную важность учёта зеркальности при отражении, на рисунке также приведены кривые 2, 4, 6, которые построены для случая чисто диффузного отражения электронов. Экспериментальные данные не содержат частоту объёмных столкновений электронов в проволоке. Однако, сравнивая

теоретический результат с данными эксперимента, можно определить эту величину при заданной величине коэффициента зеркальности металла q .

Соответственно на рис. 5.4 приведены два типа кривых (сплошные для $q = 0.3$ и штриховые для $q = 0$). Из сказанного выше следует, что при малых значениях безразмерной индукции внешнего магнитного поля μ теоретические результаты 1, 3, 5 и 2, 4, 6 должны совпадать. Сравнение хода экспериментальных и теоретических кривых показывает, что расчёт интегральной проводимости $G(\Lambda, \Omega, \mu, q)$ вытянутой цилиндрической проволоки в продольном магнитное поле, проведённый с использованием кинетического метода, согласуется с экспериментальными данными с точностью не менее 5 %, если учитывать влияние поверхности металла на отражение электронов. Из представленных результатов удается определить значение коэффициента зеркальности q . Для натриевой проволоки, описанной в работе [9], его значение равно 0.3 [10]. Таким образом, измерение продольного магнетосопротивления является эффективным методом определения коэффициента зеркальности металлов q . Ещё раз отметим, что параметр q – важная кинетическая характеристика металла, измерение которой наталкивается на серьёзные экспериментальные трудности [4].

Из изложенного выше непосредственно вытекает, что особенно актуальным является применение этого метода для определения коэффициента зеркальности поверхности металлических образцов, у которых линейный размер сравним с длиной свободного пробега электронов.

Заключение

Широкое применение полупроводниковых материалов основано на использовании их в качестве проводников электронного и дырочного токов, т. е. на явлениях переноса. В современной электронике наряду с электрическими полями широко применяются магнитные поля, градиенты температуры и градиенты концентрации носителей заряда, в связи с чем существует практическая потребность в изучении разнообразных кинетических процессов. Из-за сложного характера условий, от которых зависят кинетические эффекты, возникает большое число разнообразных случаев (превышает несколько сотен). В рамках пособия описать все эти теоретические случаи невозможно, поэтому рассмотрены только самые основные кинетические явления: электро- и теплопроводность, термоэлектрические и гальваномагнитные явления. Кроме того, представлены актуальные результаты исследований влияния классических размерных эффектов на явления переноса в тонких проволоках с радиусом поперечного сечения порядка 1–10 нм.

Изложенный теоретический материал данного специального курса расширяет профессиональный кругозор студента. Полученные знания помогут будущему специалисту в области физики полупроводников, микро- и нанoeлектроники более глубоко осмыслить суть явлений и закономерностей и, следовательно, гораздо свободнее ориентироваться как в новых теоретических концепциях, так и в современных практических технологиях.

Приложения

Приложение 1

Рассмотрим свойства идеального ферми-газа при абсолютном нуле температуры. Пусть в объеме ΔV содержится ΔN электронов в наинизшем энергетическом состоянии. Принцип Паули требует, чтобы элементарная ячейка фазового пространства

$$(\Delta x \Delta y \Delta z) \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = (2\pi\hbar)^3$$

содержала не больше двух электронов (с противоположно направленными спинами).

В наинизшем энергетическом состоянии ΔN электронов заполняет в пространстве импульсов шар радиуса p_0 , который определяется из условия

$$2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = 2 \frac{\Delta V \frac{4\pi}{3} p_0^3}{(2\pi\hbar)^3} = \Delta N, \quad (6.1)$$

здесь $d\Gamma$ – фазовый объем. Из (6.1) следует

$$p_0 = 2\pi\hbar \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{1/3}, \quad (6.2)$$

где $n = \Delta N/\Delta V$ – концентрация электронов. Максимальная кинетическая энергия электронов в точке с концентрацией n равна

$$\mathcal{E}_0 = \frac{1}{2m^*} p_0^2 = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m^*} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{3/2}. \quad (6.3)$$

Число квантовых состояний (статистический вес) в единице объема (в 1 м^3) в интервале импульса между p и $p + dp$ или в интервале

кинетической энергии между \mathcal{E} и $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ равно

$$d_p n = 2 \frac{1\text{М}^3 \times 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{8\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (6.4)$$

$$d\mathcal{E} n = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{*3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\mathcal{E}} d\mathcal{E}. \quad (6.5)$$

Здесь $\mathcal{E} = p^2/(2m^*)$.

Вычислим плотность кинетической энергии электронов (т. е. кинетическую энергию в расчете на 1М^3):

$$\mathcal{E}_k = \int \frac{1}{2m^*} p^2 d_p n = \frac{8\pi}{2m^*(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_0} p^4 dp = \frac{3^{5/3} \pi^{4/3} \hbar^2}{10m^*} n^{5/3}. \quad (6.6)$$

Приложение 2

Для вычисления интеграла I (1.6) в следующем приближении введем переменную $\eta = \frac{\mathcal{E} - \mu}{k_0 T}$ и разложим функцию $\varphi(\mathcal{E}) = \psi(\eta)$ в ряд по степеням η . В силу дельтаобразного характера функции $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right)$ в интеграле играют роль только большие значения \mathcal{E} , близкие к μ , т. е. малые η :

$$\psi(\eta) = \psi(0) + \psi'(0)\eta + \frac{1}{2}\psi''(0)\eta^2 + \dots \quad (6.7)$$

Переходя далее к переменной η , получим

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} d\mathcal{E} = -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} d\eta = -\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{e^\eta + 1} \right) d\eta = \frac{e^{-\eta}}{(1 + e^{-\eta})^2} d\eta. \quad (6.8)$$

Заменяя нижний предел в интеграле I , равный $-z$ (для переменной η) на $-\infty$, что допустимо, так как $z \gg 1$, получим

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\eta) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right) d\eta = \psi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}}\right) d\eta + \psi'(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta e^{-\eta}}{(1 + e^{-\eta})^2} d\eta + \frac{1}{2}\psi''(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta^2 e^{-\eta}}{(1 + e^{-\eta})^2} d\eta. \quad (5.9)$$

Первый интеграл правой части равен единице, второй – в силу нечетности подынтегральной функции – нулю, третий равен

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta^2 e^{-\eta}}{(1+e^{-\eta})^2} d\eta &= \frac{1}{2} \psi''(0) \int_0^{+\infty} \frac{\eta^2 e^{-\eta}}{(1+e^{-\eta})^2} d\eta = \\ &= \int_0^{+\infty} \eta^2 [e^{-\eta} - 2e^{-2\eta} + 3e^{-3\eta} - \dots] d\eta = \\ &= 2 \left(1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} - \frac{1}{4^2} + \dots \right) = 2 \frac{\pi^2}{12} = \frac{\pi^2}{6}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

При вычислении последнего интеграла множитель подынтегральной функции $(1 + e^{-\eta})^{-2}$ был разложен в ряд по $e^{-\eta}$, а в конце была использована формула для суммы знакопеременного ряда обратных значений квадратов натурального ряда чисел.

Таким образом, интеграл (5.9) приводится к виду

$$I = \psi(0) + \frac{\pi^2}{6} \psi''(0). \quad (6.11)$$

Для случая (1.4) имеем

$$\psi(\eta) = \frac{\sqrt{2} m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} \mu + k_0 T \mu^{3/2}. \quad (6.12)$$

Используя (6.11) и (6.12), для (1.4) получим

$$n = \frac{(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_0 T}{\mu} \right)^2 \right]. \quad (6.13)$$

Считая, что в поправочном члене в квадратных скобках можно положить $\mu = \mu_0$, решим равенство (6.13) относительно μ , которое стоит перед квадратной скобкой:

$$\mu = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_0 T}{\mu_0} \right)^2 \right]^{-2/3}.$$

Разлагая квадратную скобку в ряд по $(k_0 T / \mu_0)^2$ и ограничиваясь первыми членами, получим формулу (1.9а).

Вопросы для самопроверки

1. Уравнение Больцмана. Физический смысл отдельных членов уравнения Больцмана.
2. Уравнение Больцмана в приближении времени релаксации. Смысл времени релаксации.
3. Неравновесная функция распределения для невырожденного электронного газа в случае сферически-симметричной энергетической зоны.
4. Плотность тока, обусловленная неравновесными носителями заряда.
5. Электропроводность невырожденных полупроводников с простой зонной структурой. Зависимость подвижности носителей заряда от температуры.
6. Эффект Холла в примесных полупроводниках в случаях слабого и сильного магнитных полей.
7. Эффект Холла в полупроводниках со смешанной проводимостью в случаях слабого и сильного магнитных полей.
8. Магнетосопротивление в примесных полупроводниках в случаях слабого и сильного магнитных полей.
9. Магнетосопротивление в полупроводниках со смешанной проводимостью в случаях слабого и сильного магнитных полей.
10. Термоэлектрические явления в невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой. Термоэлектродвижущая сила.
11. Эффект Томсона.
12. Эффект Пельтье.

Литература

1. Аскеров, Б. М. Электронные явления переноса в полупроводниках / Б. М. Аскеров . – М., 1985.
2. Ансельм, А. И. Введение в теорию полупроводников / А. И. Ансельм . – М., 1978.
3. Бонч-Бруевич, В. И. Физика полупроводников / В. И. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников . – М., 1982.
4. Лифшиц, И. М. Электронная теория металлов / И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов . – М., 1971.
5. Борн, М. Атомная физика / М. Борн . – М., 1965.
6. Pierre, F. Dephasing of electrons in mesoscopic metal wires / F. Pierre, A. B. Gougam, A. Anthore et al. // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68, № 20. – P. 85413–1–15.
7. Fuchs, K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals / K. Fuchs // Proc. Cambridge Phil. Soc. – 1938. – Vol. 34, № 1. – P. 100–108.
8. Завитаев, Э. В. Высокочастотная проводимость тонкой цилиндрической проволоки из металла / Э. В. Завитаев, А. А. Юшканов // Микроэлектроника. – 2008. – Т. 37, № 6. – С. 429–438.
9. Chambers, R. G. The conductivity of thin wires in a magnetic field / R. G. Chambers // Proc. Roy. Soc. A. – 1950. – Vol. 202. – P. 378–394.
10. Завитаев, Э. В. Зависимость электрической проводимости тонкой цилиндрической проволоки в продольном магнитном поле от характера отражения электронов / Э. В. Завитаев, А. А. Юшканов // ЖЭТФ. – 2006. – Т. 130, № 5(11). – С. 887–894.

Учебное издание

Кузнецова Ирина Александровна

ОСНОВЫ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Учебное пособие

Редактор, корректор М. Э. Левакова
Верстка И. А. Кузнецовой

Подписано в печать 6.03.2015. Формат 60 × 84/16.

Усл. печ. л. 6,7. Уч.-изд. л. 5,5.

Тираж 50 экз. Заказ

Оригинал-макет подготовлен
в редакционно-издательском отделе ЯрГУ.

Ярославский государственный университет
им. П. Г. Демидова. 150000, Ярославль, ул. Советская, 14.