

Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Самарский государственный университет»
Кафедра полупроводниковой электроники и нанотехнологий

А.Н. Комов

**КИНЕТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ
В ПОЛУПРОВОДНИКАХ**

*Утверждено редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного пособия*

Самара
Издательство «Самарский университет»
2009

УДК 530.10
ББК 22.379
К 63

Рецензенты:
доктор технических наук М.Н. Пиганов;
доктор физико-математических наук Л.А. Митлина

Комов, А.Н.
К 63 **Кинетические явления в полупроводниках: учеб. пособие /**
А.Н. Комов. – Самара: Издательство «Самарский университет», 2009. – 64 с.

В учебном пособии рассмотрены основные физические явления, возникающие в полупроводниках при воздействии электрических и магнитных полей. Изложение материала базируется на фундаментальных физических соотношениях, описывающих механизмы переноса носителей заряда. Показано влияние постоянных и переменных электрических и магнитных полей на электронный газ в полупроводниках. Описаны области применения известных кинетических эффектов для практических целей.

Предназначено для студентов, аспирантов, специализирующихся в области полупроводниковой электроники.

УДК 530.10
ББК 22.379

© Комов А.Н., 2009
© Самарский государственный университет», 2009
© Оформление. Издательство «Самарский университет», 2009

ПРЕДИСЛОВИЕ

Кинетические явления в полупроводниках — основа для их прикладного использования. Поэтому у разработчиков приборов, физиков, занимающихся экспериментальными исследованиями в этой области, возникает необходимость рассмотрения основных закономерностей протекающих процессов в полупроводниках при различных конкретных физических условиях. Известные классические работы А.И. Ансельма «Введение в теорию полупроводников» (вып. 1962 г.), П.С. Киреева «Физика полупроводников» (вып. 1969 г.), Б.М. Аскерова «Кинетические эффекты в полупроводниках» (вып. 1970 г.) и других ученых стали в настоящее время большой редкостью.

Данное учебное пособие предусматривает оказание помощи студентам при написании курсовой и дипломной работы по специальности «Физика полупроводников». В подавляющем большинстве случаев студент значительное время тратит на поиск основополагающих описаний тех или иных процессов, протекающих в полупроводниковых приборах. Предлагаемая читателям книга в некоторой степени устраняет определенные недостатки в обучении студентов. Однако не все разделы физики полупроводников вошли в эту книгу, так как она спланирована в качестве учебного пособия по курсу «Основы кинетических явлений в полупроводниках» и поэтому ограничена программой. Материал данного учебного пособия может быть полезен и для родственных специальностей по радиофизике и электронике, а также при чтении курса «Физика полупроводниковых приборов».

При написании книги автор придерживался стиля и последовательности изложения материала классических учебников и монографий в области физики полупроводников известных российских и зарубежных авторов.

ПРИНЯТЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

- f – функция распределения;
 f_0 – равновесная функция;
 μ – энергетический уровень Ферми;
 E – кинетическая энергия;
 \bar{E} – напряженность электрического поля;
 k_0 – постоянная Больцмана;
 V – скорость носителей заряда;
 m – масса электрона;
 m^* – эффективная масса;
 U – потенциальная энергия;
 u – подвижность носителей заряда;
 φ – потенциал;
 χ – некоторая функция энергии;
 τ – время релаксации;
 ϵ – диэлектрическая проницаемость;
 ϵ_0 – абсолютная величина диэлектрической проницаемости;
 Ze – заряд иона;
 t – время;
 j – плотность тока;
 e – заряд электрона;
 r – расстояние;
 x, y, z – координаты;
 Ω – телесный угол;
 θ – угол;
 n – концентрация электронов;
 p – концентрация дырок;
 σ – эффективное сечение рассеяния;
 W – вероятность рассеяния (с^{-1});
 l – длина свободного пробега;
 \bar{k} – волновой вектор;
 $\bar{\zeta}(\bar{k}) = \frac{e\tau(\bar{k})}{m^*} \bar{E}$;
 α – удельная термоЭДС.

ГЛАВА 1. ОСНОВЫ КИНЕТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

1.1. Функция распределения носителей заряда

Носители заряда в полупроводниках могут находиться в двух состояниях – состоянии статического (термодинамического) равновесия и неравновесном состоянии, обусловленном влиянием внешних воздействующих электрических, магнитных, температурных полей. Процессы, связанные с направленным движением электронов и дырок, называются явлениями переноса, или кинетическими эффектами. Они являются физической основой применения полупроводников в различных областях науки и техники.

Определяя механизмы взаимодействия электронов и дырок с колебаниями решетки кристалла при воздействии внешних полей, можно установить области использования полупроводников для практических целей.

Между частицами в решетке кристалла (ионами и электронами) наблюдается сильное взаимодействие. Это существенно усложняет изучение кинетических процессов относительно равновесных систем.

Важная особенность неравновесных процессов состоит в том, что они зависят от механизма взаимодействия в системе, т.е. от взаимодействия носителей заряда с колебаниями решетки или дефектами кристалла.

Электроны в состоянии термодинамического равновесия в классическом случае описываются равновесной функцией распределения Больдмана

$$f_0(\mathbf{E}) = \exp\left(\frac{\mu - \mathbf{E}}{k_0 T}\right), \quad (1.1)$$

где полная энергия $\mathbf{E} = \frac{mV^2}{2} + U(x, y, z)$.

Аналогично для электронов в неравновесном состоянии можно ввести неравновесную функцию распределения, имеющую тот смысл, что

$$f(V_x, V_y, V_z, x, y, z, t) dV_x dV_y dV_z dx dy dz = f(\bar{V}, \bar{r}, t) d^3V d^3r \quad (1.2)$$

равно числу электронов в момент времени t в точке \bar{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 $V_z + dV_z$. Такие электроны носят название V -электронов. Если известна функция $f(V, r, t)$, то можно определить плотность тока в точке r в момент t . На рис. 1.1 представлена площадка в 1 см^2 , перпендикулярная к плоскости рисунка и оси x , и цилиндр высотой $V_x dt$, построенный на площадке. Число V -электронов внутри цилиндра равно $f(\bar{V}, \bar{r}, t) d^3V V_x dt$. Все эти электроны

за время dt сместятся в направлении x на величину $V_x dt$, и, следовательно, пересекут площадку. Полное число электронов всех скоростей, прошедших через площадку за время dt , равно

$$dt \int_{-\infty}^{\infty} \int f(\vec{V}, \vec{r}, t) V_x dV_x dV_y dV_z.$$

Здесь учтены электроны, пересекающие площадку как слева направо, так и справа налево. Плотность тока в направлении x равна

$$j_x = -e \int_{-\infty}^{\infty} \int f(\vec{V}, \vec{r}, t) V_x dV_x dV_y dV_z. \quad (1.3)$$

Знак минус учитывает знак заряда электрона.

Запишем неравновесную функцию распределения в виде

$$f(\vec{V}, \vec{r}, t) = f_0(E) + f_1(\vec{V}, \vec{r}, t). \quad (1.4)$$

Так как $f_0(E)$ — четная функция V_x (зависит от V_x^2), то интеграл (1.3) по dV_x от $f_0(E) V_x$ равен нулю и (1.3) будет иметь вид

$$j_x = -e \int_{-\infty}^{\infty} \int f_1(\vec{V}, \vec{r}, t) V_x dV_x dV_y dV_z. \quad (1.5)$$

Основная задача теории кинетических явлений заключается в нахождении функции распределения $f(\vec{V}, \vec{r}, t)$.

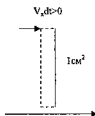


Рис. 1.1. Площадка

1.2. Уравнение Больцмана

Выведем уравнение, которому удовлетворяет функция $f(\vec{V}, \vec{r}, t)$. Рассмотрим изменение числа \vec{V} -электронов за время dt в результате их движения в пространстве. На рис. 1.2 представлен элемент объема $d^3r = dx dy dz$. Рассмотрим изменение числа \vec{V} -электронов внутри выделенного объема за счет прихода электронов сквозь левую грань $dy dz$ и выхода электронов сквозь правую грань $dy dz$ ($V_x > 0$).

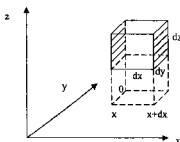


Рис. 1.2. Элемент объема

Число входящих \bar{V} -электронов за время dt через левую грань равно $f(\bar{V}, x, y, z, t)d^3VdydzV_xdt$, число \bar{V} -электронов, выходящих за время dt через правую грань, равно $f(\bar{V}, x + dx, y, z, t)d^3VdydzV_xdt$.

Увеличение числа \bar{V} -электронов в объеме d^3r за счет этого процесса будет представлено как:

$$f(\bar{V}, x, y, z, t)d^3VdydzV_xdt - f(\bar{V}, x + dx, y, z, t)d^3VdydzV_xdt = -V_x [f(\bar{V}, x + dx, y, z, t) - f(\bar{V}, x, y, z, t)]d^3Vdydz = -V_x \frac{\partial f}{\partial x} dx dy dz d^3V dt.$$

Увеличение числа \bar{V} -электронов в объеме d^3r имеет вид:

$$-\left(V_x \frac{\partial f}{\partial x} + V_y \frac{\partial f}{\partial y} + V_z \frac{\partial f}{\partial z}\right) d^3V d^3r dt = -(\bar{V} \nabla_{\bar{V}} f) d^3V d^3r dt = -\bar{V} \frac{\partial f}{\partial r} d^3V d^3r dt. \quad (1.6)$$

Аналогично можно рассмотреть изменение числа \bar{V} -электронов в объеме $d^3V = dV_x dV_y dV_z$ в результате их движения в \bar{V} -пространстве со «скоростями» $\dot{V}_x \dot{V}_y \dot{V}_z$. Увеличение числа \bar{V} -электронов при движении в \bar{V} -пространстве находим по формуле:

$$-\left(\dot{V} \nabla_{\bar{V}} f\right) d^3V d^3r dt = -\dot{V} \frac{\partial f}{\partial r} d^3V d^3r dt = -\frac{1}{m} (\bar{F} \nabla_{\bar{V}} f) d^3V d^3r dt, \quad (1.6a)$$

так как ускорение $\dot{V} = \frac{d\bar{V}}{dt} = \frac{1}{m} \bar{F}(r, t)$, где $\bar{F}(r, t)$ – сила, действующая на электрон в точке \bar{r} в момент t .

Кроме того, число \bar{V} -электронов изменяется в результате их столкновений с колебаниями решетки (фононами) и дефектами кристалла. Каждое столкновение \bar{V} -электрона уводит его из объема d^3V , так как при столкновении резко меняется его скорость.

Рассмотрим упругие столкновения, при которых меняется только направление скорости, но не абсолютная величина, то есть, если после столкновения скорость равна \bar{V}' , то $V' = V$.

Пусть $W(\bar{V}, \bar{V}') d\Omega dt$ – вероятность \bar{V} -электрону за время dt упруго рассеяться в элементарный телесный угол $d\Omega$ около направления \bar{V}' . Так

как вероятность безразмерна, то $W(\bar{V}, \bar{V}')$ имеет размерность, обратную времени (c^{-1}).

Число исчезающих за время dt \bar{V} -электронов в результате столкновений равно:

$$-\int_{(\Omega)} f(\bar{V}, \bar{r}, t) d^3V d^3r W(\bar{V}, \bar{V}') d\Omega dt.$$

С другой стороны, число \bar{V} -электронов будет возрастать ввиду превращения \bar{V}' -электронов в результате столкновений в том же объеме d^3r в \bar{V} -электроны. Это возрастание за время dt будет равно:

$$\int_{(\Omega)} f(\bar{V}', \bar{r}, t) d^3V d^3r W(\bar{V}', \bar{V}) d\Omega dt.$$

В итоге возрастание числа \bar{V} -электронов из-за столкновений равно:

$$d^3V d^3r dt \int_{\Omega} [f(\bar{V}', \bar{r}, t) W(\bar{V}', \bar{V}) - f(\bar{V}, \bar{r}, t) W(\bar{V}, \bar{V}')] d\Omega. \quad (1.66)$$

Таким образом, возрастание числа \bar{V} -электронов за время dt равно:

$$f(\bar{V}, \bar{r}, t + dt) d^3V d^3r - f(\bar{V}, \bar{r}, t) d^3V d^3r = \frac{\partial f}{\partial t} d^3V d^3r dt. \quad (1.7)$$

Приравнявая (1.7) сумме (1.6), (1.6a), (1.66), получим

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -(\bar{V} \nabla_{\bar{r}} f) - \frac{1}{m} (\bar{F} \nabla_{\bar{V}} f) + \int_{\Omega} [f(\bar{V}', \bar{r}, t) W(\bar{V}', \bar{V}) - f(\bar{V}, \bar{r}, t) W(\bar{V}, \bar{V}')] d\Omega \quad (1.8)$$

Это уравнение называется уравнением Больцмана. Состоит оно из так называемого полевого члена

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{пол}} = -(\bar{V} \nabla_{\bar{r}} f) - \frac{1}{m} (\bar{F} \nabla_{\bar{V}} f), \quad (1.9)$$

который определяет скорость изменения функции распределения f в результате непрерывного движения электронов в \bar{r} и \bar{V} -пространстве.

Второй член столкновений

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ст}} = \int_{\Omega} [f(\bar{V}', \bar{r}, t) W(\bar{V}', \bar{V}) - f(\bar{V}, \bar{r}, t) W(\bar{V}, \bar{V}')] d\Omega \quad (1.9a)$$

определяет скорость изменения f в результате столкновения (рассеяния) электронов.

В правой части уравнения (1.8) стоит интеграл от неизвестной функции $f(V')$, поэтому кинетическое уравнение Больцмана является интегродифференциальным уравнением.

В стационарном состоянии уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{пол}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{стол}} = 0, \quad (1.10)$$

или

$$\bar{V} \nabla_{\bar{r}} f + \frac{1}{m} (\bar{F} \nabla_{\bar{V}} f) = \int_{\Omega} [f(\bar{V}', \bar{r}) W(\bar{V}', \bar{V}) - f(\bar{V}, \bar{r}) W(\bar{V}, \bar{V}')] d\Omega. \quad (1.10a)$$

В состоянии функции распределения $f = f_0(\mathbf{E}) = \exp\left(\frac{\mu - \mathbf{E}}{k_0 T}\right)$ где энергия \mathbf{E} равна сумме кинетической энергии

$E = \frac{mV^2}{2}$ и потенциальной энергии $U(\bar{r})$. Можно показать, что левая часть уравнения (1.10а) равна нулю. Действительно, для первого члена получим:

$$\bar{V} \nabla_{\bar{r}} f_0(\mathbf{E} + U) = \frac{\bar{V}}{k_0 T} f_0(-\nabla_{\bar{r}} U),$$

а так как $-\nabla_{\bar{r}} U = \bar{F}$, то имеем

$$\bar{V} \nabla_{\bar{r}} f_0(\mathbf{E} + U) = \frac{1}{k_0 T} f_0(\bar{V} \bar{F}).$$

Второй член левой части уравнения (1.10а):

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

В итоге $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} = 0$. Тогда

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{см}} = \int_{\Omega} \left[f(\mathbf{E}') W(\bar{V}', \bar{V}) - f(\mathbf{E}) W(\bar{V}, \bar{V}') \right] d\Omega = f_0(E) \int_{\Omega} [W(\bar{V}', \bar{V}) - W(\bar{V}, \bar{V}')] d\Omega$$

Здесь учтено, что столкновения упругие, т.е. $\mathbf{E}' = \mathbf{E}$. Интеграл при произвольном значении V может равняться нулю, когда $W(\bar{V}', \bar{V}) = W(\bar{V}, \bar{V}')$. Это является следствием общего принципа детального равновесия, согласно которому вероятности прямого и обратного процессов равновероятны.

1.2.1. Определение времени релаксации

Функция распределения носителей заряда $f(\bar{u}, \bar{r}, t)$ может изменяться под воздействием внешних факторов (тепловых, электрических и магнитных полей, градиента концентрации носителей заряда) и при столкновении электронов с колебаниями решетки (фононами) и дефектами кристалла.

В том случае, когда энергия электрона при столкновении не меняется (упругое рассеяние), соотношение (1.10а) определяется видом:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{см}} = -\frac{f - f_0}{\tau(\bar{V})}, \quad (1.11)$$

где $1/\tau(\bar{V})$ — коэффициент пропорциональности, то есть изменение функции распределения f вследствие соударений пропорционально величине ее отклонения от равновесной.

Решение уравнения (1.11) имеет вид $f - f_0 = (f - f_0)_{t=0} e^{-t/\tau}$.

Из данного выражения следует, что процесс неравновесного распределения носителей после выключения внешних полей протекает по экспоненциальному закону с постоянной времени τ . Эта величина носит название времени релаксации, т.е. обозначает время, в течение которого система носителей заряда возвращается в равновесное состояние в результате столкновений.

Принимая соударения упругими, т.е. $V' = V$, $E' = E$, и учитывая принцип детального равновесия, согласно которому вероятности прямого и обратного процессов одинаковы, т.е. $W(V, V') = W(V', V)$, будем иметь для столкновительного члена

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{cm} = \int_{\Omega} W(\bar{V}, \bar{V}') [f(\bar{V}') - f(\bar{V})] d\Omega, \quad \text{где } f(\bar{V}) = f_0(E) + f_1(\bar{V}). \quad (1.12)$$

Если на электроны действует только электрическое поле \bar{E} , то поправка к равновесной функции распределения $f_1(\bar{V})$ будет иметь вид:

$$f_1(\bar{V}) = -\frac{\partial f_0}{\partial E} \chi(E) \bar{V}, \quad (1.13)$$

где $\chi(E)$ — некоторая функция энергии $E = \frac{m}{2}(V_x^2 + V_y^2 + V_z^2)$.

Запишем (1.12) в виде:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{cm} = \int_{\Omega} W(\bar{V}, \bar{V}') [f(\bar{V}') - f(\bar{V})] d\Omega = -\frac{f - f_0}{\tau(\bar{V})} = -\frac{f_1(\bar{V})}{\tau(\bar{V})}. \quad (1.14)$$

Определим время релаксации, учитывая (1.13) и считая соударение электронов со структурными нарушениями упругими, т.е. $E = E'$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(\bar{V})} &= -\int_{\Omega} W(\bar{V}, \bar{V}') \frac{f_1(\bar{V}') - f_1(\bar{V})}{f_1(\bar{V})} d\Omega = \int_{\Omega} W(\bar{V}, \bar{V}') \left[1 - \frac{\frac{\partial f_0}{\partial E'} \bar{V}' \chi(E')}{\frac{\partial f_0}{\partial E} \bar{V} \chi(E)} \right] d\Omega = \\ &= \int_{\Omega} W(\bar{V}, \bar{V}') \left[1 - \frac{\bar{V}' \chi(E')}{\bar{V} \chi(E)} \right] d\Omega. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Пусть векторы $\bar{\chi}$, \bar{V}' и \bar{V} направлены как показано на рис. 1.3, тогда $V = V_x$, $V'_x = V' \cos \theta = V \cos \theta$. В этом случае выражение для $1/\tau(\bar{V})$ (1.15) будет иметь вид:

$$\frac{1}{\tau(\bar{V})} = \int_{\Omega} W(\bar{V}, \bar{V}') \left[1 - \frac{\bar{V}'_x}{\bar{V}_x} \right] d\Omega = \int_{\Omega} W(\bar{V}, \bar{V}') (1 - \cos \theta) d\Omega. \quad (1.16)$$

Здесь \bar{V}'_x , \bar{V}_x — проекция \bar{V}' и \bar{V} на вектор $\bar{\chi}$. Таким образом, время релаксации при рассеянии при случайном распределении скоростей определяется видом:

$$\frac{1}{\tau(\bar{V})} = \int_{\Omega} W(\bar{V}, \bar{V}') d\Omega. \quad (1.16a)$$

Зная время релаксации и его температурную зависимость или зависимость от энергии, можно определить механизм рассеяния носителей заряда.

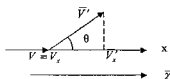


Рис. 1.3. Изменение направления векторов скорости после столкновения с центром рассеяния

1.2.2. Эффективное сечение рассеяния. Центры рассеяния

Для количественной оценки процесса рассеяния принимается величина, называемая эффективным сечением.

Обозначим через n плотность свободных электронов, которые со средней скоростью V движутся в данном направлении. Тогда nV есть начальный поток, равный произведению плотности потока частиц электронов, проходящих за единицу времени через единичное сечение, на их скорость. Пусть по пути этого потока на единичное сечение имеется N одинаковых центров рассеяния, ими может являться любая неоднородность кристалла. Каждый центр характеризуется эффективным сечением σ . Это та площадь около центра, в области которой имеет место рассеяние электронов. Число рассеянных электронов n_1 в единицу времени определяется эффективным сечением рассеяния, количеством центров рассеяния и плотностью падающего потока электронов, то есть

$$n_1 = \sigma N n V. \quad (1.17)$$

Число рассеянных частиц можно также определить через вероятность рассеяния одной частицы в единицу времени W и плотность потока частиц n :

$$n_1 = W n. \quad (1.17a)$$

Тогда из (1.17) и (1.17a) можно определить эффективное сечение рассеяния:

$$\sigma = \frac{n_1}{nV} = \frac{W}{NV}. \quad (1.18)$$

Следовательно, эффективное сечение рассеяния σ определяется отношением числа удаленных электронов из пучка в результате рассеяния на одном центре в единицу времени к плотности падающего пучка.

Вероятность рассеяния определяется через σ из (1.18) выражением

$$W = \sigma NV. \quad (1.19)$$

В то же время вероятность рассеяния обратно пропорциональна времени свободного пробега τ :

$$W = \frac{1}{\tau}. \quad (1.20)$$

Тогда

$$\tau = \frac{1}{\sigma NV} = \frac{l}{v}. \quad (1.21)$$

Величина $\Gamma^{-1} = \sigma N$ есть вероятность рассеяния на единичном интервале пути.

При наличии нескольких различных центров рассеяния (тепловые колебания решетки, дислокация, дефекты Шоттки и др.), согласно теории вероятности, полная вероятность рассеяния в единицу времени будет определяться суммой отдельных вероятностей рассеяния

$$W = \sum W_i. \quad (1.22)$$

Роль различных дефектов на рассеянии разная, и для каждого из них эффективное сечение различное. Вычислим эффективное сечение для междуузельных атомов. Данные дефекты называются точечными дефектами. Для них за величину σ можно принять площадь квадрата со стороной, равной постоянной решетки, т.е. $\sigma_A = (5 \cdot 10^{-8})^2 \text{ см}^2$. Если предположить, что концентрация атомов примеси равна $N_A = 10^{16} \text{ см}^{-3}$, то длина свободного пробега $l_A = (3 \cdot 10^{-15} \cdot 10^{16})^{-1} \approx 3 \cdot 10^{-2} \text{ см}$.

Эффективное сечение рассеяния на тепловых колебаниях решетки определяется площадью сечения области, которую занимает колеблющийся атом за вычетом площади сечения самого атома. Если считать, что амплитуда колебаний $r = 1 \text{ \AA}$, а диаметр атома $d \approx 10^{-8} \text{ см}$, то $\sigma_T = (d+r)^2 - d^2 \approx 2dr = 10^{-16} \text{ см}^2$. Число атомов $N_T \approx 10^{22} \text{ см}^{-3}$, тогда $l_T \approx 10^{-6} \text{ см} = 100 \text{ \AA}$.

1.3. Вывод формулы Конуэлл-Вайскопфа

Рассмотрим примесный полупроводник, в котором каждый ион примеси создает вокруг себя электрическое поле. Движение свободного электрона в этом поле зависит от его скорости и расстояния до иона примеси. Электрон отклоняется от своего первоначального направления тем сильнее, чем медленнее он движется и чем ближе проходит мимо иона примеси. На рис. 1.4 показано искривление траектории движения электрона в поле положительного иона примеси.

Определим траекторию движения заряженной частицы в поле иона классическим методом. Пусть заряженная частица движется в кулоновском поле иона с положительным зарядом Ze . Энергия взаимодействия определяется в виде

$$U(r) = \pm \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (1.23)$$

Здесь ϵ – диэлектрическая постоянная, плюс соответствует дырке, а минус – электрону. Оба заряда отклоняются одинаково (рис. 1.5).

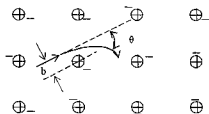


Рис. 1.4. Траектория движения электрона в поле положительного иона

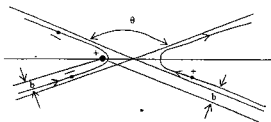


Рис. 1.5. Рассеяние электрона и дырки около положительного иона

Минимальное расстояние между ионом и траекторией движущегося заряда обозначено как b и носит название *прицельного расстояния*. Через θ обозначен угол между первоначальным направлением движения заряженной частицы (электрона или дырки) и ее движением после рассеяния. Зависимость прицельного расстояния и угла отклонения θ находится из выражения:

$$b = \frac{Ze^2}{sm^*V^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}, \quad (1.24)$$

где m^* – эффективная масса заряда, а V – его скорость движения.

Движение частиц будем рассматривать по классическим законам механики. Рассеяние является случайным процессом, поэтому различные носители заряда будут отклоняться по разным направлениям. Пусть угол рассеяния меняется от θ до $\theta+d\theta$. Учитывая, что рассеивающий центр

обладает осевой симметрией, углы отклонения будут углами двух конусов (рис. 1.6).

Через $d\Omega$ обозначен телесный угол, заключенный между этими конусами. Он определяется из выражения $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$.

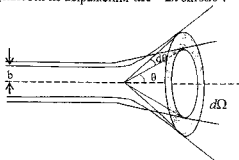


Рис. 1.6. Телесный угол рассеяния

Процессы рассеяния в этом случае будут характеризоваться дифференциальным эффективным сечением $\sigma(\theta)$. Напомним, что $\sigma(\theta)$ равно:

$$\sigma(\theta) = \frac{\text{Число частиц, отклоненных в единицу времени на угол } \theta \text{ в единичный телесный угол}}{\text{Поток падающих частиц на единичную площадь за единицу времени}}$$

Пусть имеется n электронов, движущихся хаотически со скоростями V . Тогда на выбранную единичную площадку за единицу времени упадет nV электронов. Полное число частиц, отклоненных за это время в телесный угол $d\Omega$, будет равно потоку частиц, падающих на кольцо (см. рис. 1.6) площадью $2\pi b |db|$. Здесь $|db|$ – абсолютная величина производной по b . Тогда дифференциальное эффективное сечение с учетом (1.24) будет иметь вид:

$$\sigma(\theta) = \frac{nV 2\pi b |db|}{nV d\Omega} = \frac{b |db|}{\sin\theta d\theta}, \quad (1.25)$$

$$\text{где } |db| = \frac{Ze^2}{2cm \cdot V^2} \cdot \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta. \quad (1.26)$$

Подставив (1.24), (1.26) в (1.25), будем иметь:

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{Ze^2}{2cm \cdot V^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (1.27)$$

Формула (1.27) была получена Резерфордом при исследовании рассеяния α -частиц на ядрах тяжелых элементов.

Интегральное сечение определяется из соотношения:

$$\sigma^* = \int_0^\pi \sigma(\theta) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin \theta d\theta. \quad (1.28)$$

Это есть полное число рассеянных частиц в расчете на единичную плотность потока падающих частиц.

Вычисления σ^* из (1.28) дают бесконечность, т.к. при $\theta = 0$ интеграл будет расходящимся. Это обосновывается тем, что малым углам отклонения частиц соответствует большое эффективное сечение, поскольку малым углам отклонения соответствуют большие расстояния между ионом и отклоняемой частицей, т.е. большое прицельное расстояние b . Однако в твердом теле можно ограничить b из следующих соображений. Рассмотрим два соседних иона, расстояние между которыми равно R (рис. 1.7). Очевидно, что отклонение частицы определяется ближайшим ионом. Естественно, прицельное расстояние будет равно половине среднего расстояния между этими ионами — $R/2$. Если концентрация ионов N , то среднее расстояние между ними равно $N^{-1/3}$ и прицельное расстояние $b_{\max} = \frac{1}{2} N^{-1/3}$. Ему соответствует наименьшее значение угла рассеяния θ_{\min} , определяемое из формулы

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta_{\min}}{2} = \frac{Ze^2}{\varepsilon n^* V^2} \frac{2}{N^{-1/3}}. \quad (1.29)$$

При упругом соударении время релаксации можно определить с учетом (1.18), (1.19) из соотношения:

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi N V \int_{\theta_{\min}}^\pi \sigma(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta. \quad (1.30)$$

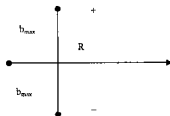


Рис. 1.7. Максимальное прицельное расстояние при движении частицы в поле двух ионов

Преобразуем $1 - \cos \theta = 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$, $\sin \theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$, учитывая значение $b_{\max} = \frac{1}{2} N^{-1/3}$ и выражение для него (1.24), таким образом, будем иметь

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta_{\min}}{2} = \frac{\varepsilon n^* V^2}{Ze^2} b_{\max} = \frac{\varepsilon n^* V^2}{2Ze^2 N^{1/3}}. \quad (1.31)$$

$$\text{Тогда } \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} = 8 \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{\cos \frac{\theta}{2} d\frac{\theta}{2}}{\sin \frac{\theta}{2}} = -\ln \sin \frac{\theta_{\min}}{2} \quad (1.32)$$

и

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi \left(\frac{Ze^2}{em^*V^2} \right)^2 NV \ln \left[1 + \text{ctg}^2 \frac{\theta_{\min}}{2} \right]. \quad (1.33)$$

Воспользуемся равенством $\text{tg} \frac{\theta_{\min}}{2} = \frac{Ze^2}{em^*V^2} \frac{2}{N^{1/3}}$,

$$\text{получим } \frac{1}{\tau} = \frac{2\pi NZ^2 e^4}{e^2 m^{*2} V^3} \ln \left[1 + \left(\frac{em^*V^2}{2Ze^2 N^{1/3}} \right)^2 \right]. \quad (1.34)$$

Это соотношение для времени релаксации τ при рассеянии носителей заряда на ионах примеси называется формулой Конуэлл-Вайскопфа.

Выражая скорость носителей заряда через энергию $V = \left(\frac{2E}{m} \right)^{1/2}$, получим

зависимость времени релаксации в виде

$$\tau = \tau_0 E^{3/2}, \quad (1.35)$$

где

$$\tau_0 = \frac{(2m^*)^{1/2} E^2}{\pi Z^2 e^4 N \ln \left[1 + \left(\frac{\delta E}{2Ze^2 N^{1/3}} \right)^2 \right]}. \quad (1.36)$$

В этом выражении логарифм — медленно меняющаяся функция V , тогда $\tau \sim V^3 \sim E^{3/2}$. (1.37)

Следовательно, время релаксации при рассеянии носителей заряда на ионах примеси имеет зависимость от энергии в виде $\tau(E) = \tau_0 E^p$, где $p = 3/2$.

1.4. Кинетическое уравнение для электронов в кристалле

При определении времени релаксации для электронов, рассеивающихся на ионах примеси, предполагалось, что движение электронов происходит по законам классической механики, поэтому их состояние описывалось в \vec{r} и \vec{V} пространствах и выполнялось соотношение

$$\frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{1}{m} \vec{F}. \quad (1.38)$$

Это уравнение справедливо и для квазиклассического приближения, если энергия электрона $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, а $\vec{V} = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$, \vec{k} — волновой вектор.

Таким образом, если энергия $E = \frac{m^* V^2}{2}$, то применимы все формулы, определяющие время релаксации при замене m на эффективную массу m^* . В случае произвольного закона дисперсии $E(\vec{k})$ скорость электрона в кристалле равна:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \quad (1.39)$$

и не равна $\frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$.

Определим вид кинетического уравнения Больцмана.

Квантовое состояние электрона удовлетворяет в квазиклассическом приближении соотношению

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \vec{F}. \quad (1.40)$$

Функция распределения $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ определяет число электронов в момент t в точке \vec{r} в единице объема с составляющими волнового вектора от k_x до $k_x + dk_x$ в \vec{r} и \vec{k} пространстве.

Для стационарного состояния уравнение Больцмана, в случае движения электрона в электрическом и магнитном полях \vec{E} и \vec{H} , будет иметь вид:

$$\vec{v} \nabla_{\vec{r}} f - \frac{e}{\hbar} \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v} \vec{H}] \right) \nabla_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{cm}}, \quad (1.41)$$

где \vec{v} определяется из (1.39).

Член столкновений можно определить из следующих соотношений. Пусть $W(\vec{k}, \vec{k}')$ – вероятность электрону за 1 с. перейти из состояния \vec{k} в состояние \vec{k}' , тогда:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{cm}} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') [1 - f(\vec{k})] - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}) [1 - f(\vec{k}')]. \quad (1.42)$$

Здесь учтен принцип Паули $[1 - f(\vec{k})]$, который показывает, что состояние \vec{k}' свободно.

Из принципа детального равновесия следует, что в статистическом равновесии потоки электронов из состояния $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$ и обратный процесс должны быть равны, т.е.

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

При упругом рассеянии $E = E'$ и $W(\vec{k}', \vec{k}) = W(\vec{k}, \vec{k}')$, тогда

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{cm}} = \sum_{\vec{k}'} \{ W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}) \} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') \{ f(\vec{k}') - f(\vec{k}) \}. \quad (1.43)$$

Таким образом, член столкновений получается таким же, как и без учета принципа Паули. Объясняется это тем, что при учете принципа

Паули число электронов увеличивается на одну и ту же величину переходящих из состояния \bar{k} в \bar{k}' , так и обратно – из \bar{k}' в \bar{k} .

Представляя неравновесную функцию в виде

$$f(\bar{k}) = f_0(\mathbf{E}) + f_1(\bar{k}) = f_0(\mathbf{E}) - \frac{\partial f_0}{\partial E} \chi(\mathbf{E}) \bar{k}, \quad (1.44)$$

можно ввести время релаксации τ :

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{E})} = \sum_{\bar{k}'} W(\bar{k}, \bar{k}') \left[1 - \frac{k'_x}{k_x} \right] = - \sum_{\bar{k}'} W(\bar{k}, \bar{k}') \frac{\Delta k_x}{k_x} = \sum_{\bar{k}'} W(\bar{k}, \bar{k}') [1 - \cos \theta]. \quad (1.45)$$

Здесь θ – угол между векторами \bar{k} и \bar{k}' , характеризующими движение электрона до и после рассеяния.

В случае сложного закона дисперсии энергии $E(\bar{k})$, например в случае p -Ga и p -Si, время релаксации ввести невозможно.

1.4.1. Электропроводность полупроводников

Рассмотрим применение кинетического уравнения (1.41) для определения различных явлений переноса в однородном невырожденном полупроводнике, изознергетические поверхности которого представляют сферу. В качестве примера определим электропроводность при наличии постоянного однородного электрического поля напряженностью \vec{E} . В элементе объема d^3r кристалла количество электронов равно:

$dn = f(\bar{k}) \frac{d^3r}{4\pi^3}$, где \bar{k} – волновой вектор. Плотность тока для электронов,

движущихся со скоростью \vec{V} , будет равна:

$$d\vec{j} = -ef(\bar{k}) \frac{d^3r}{4\pi^3} \vec{V}, \quad (1.46)$$

полная плотность тока для электронов и дырок

$$\vec{j} = \vec{j}_n + \vec{j}_p = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(V_B)} \vec{V}_n f_n(\bar{k}) d^3r + \frac{e}{4\pi^3} \int_{(V_B)} \vec{V}_p f_p(\bar{k}') d^3r. \quad (1.47)$$

Здесь интегрирование проводится по всей зоне Бриллюэна, $\vec{V}_n, f_n(\bar{k})$ и $\vec{V}_p, f_p(\bar{k}')$ – скорость и неравновесная функция распределения электронов и дырок соответственно.

Выразим неравновесную функцию в виде $f(\bar{k}) = f_0 + f'(\bar{k})$, где f_0 – функция равновесного состояния.

Для термодинамического равновесия, как известно, плотность тока равна нулю, тогда вместо выражения (1.47) будем иметь:

$$\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(V_B)} \vec{V}_n f'_n(\bar{k}) d^3r + \frac{e}{4\pi^3} \int_{(V_B)} \vec{V}_p f'_p(\bar{k}') d^3r. \quad (1.48)$$

Неравновесная функция распределения может быть рассчитана из условия стационарного состояния, т.е. $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$.

В этом случае

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{см}} = -\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{нон}} = -\frac{f'(\bar{k})}{\tau(\bar{k})}. \quad (1.49)$$

Изменение функции распределения электронов для полевого члена будет определяться следующим выражением:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{нон}} = \frac{\partial f_n}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \bar{k}} \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} = -\frac{e\hbar}{m_n^*} \frac{\partial f_n}{\partial E} (\bar{k}\bar{E}). \quad (1.50)$$

Здесь принято, что на электрон с энергией $E = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m_n^*}$, находящийся в электрическом внешнем поле \bar{E} , действует сила $\bar{F} = \hbar \frac{d\bar{k}}{dt} = -e\bar{E}$, причем полупроводник однородный, т.е. $\nabla_r f = 0$.

Из соотношения (1.49) и (1.50) можно определить $f'_n(\bar{k})$.

Тогда выражение для плотности тока будет иметь вид:

$$\bar{j}_n = -\frac{e^2 \hbar^2}{4\pi^3 m_n^* \tau_e} \int \tau_e \frac{\partial f'_n}{\partial E} (\bar{k}\bar{E}) \bar{k} d^3 r, \quad (1.51)$$

где τ_e – время релаксации электрона.

Если неравновесная функция $f'_n(\bar{k})$ мала по сравнению с равновесной f_0 , тогда $f'(\bar{k})$ можно пренебречь и заменить f_n в (1.51) на f_0 .

В невырожденном полупроводнике, где отсчет энергии производится от дна зоны проводимости, концентрация носителей заряда определяется из соотношения:

$$n = N_C e^{\frac{\mu}{k_0 T}}, \quad (1.52)$$

$$\text{где } N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* k_0 T}{\hbar^2} \right)^{3/2}.$$

Тогда

$$\frac{\partial f'_0}{\partial E} = -\frac{1}{k_0 T} e^{\frac{\mu - E}{k_0 T}} = -\frac{n}{N_C k_0 T} e^{-\frac{E}{k_0 T}}. \quad (1.53)$$

Подставляя (1.53) в (1.51), получим:

$$\bar{j}_n = -\frac{e^2 \hbar^2 n}{4\pi^3 m_n^* k_0 T N_C} \int \tau_e e^{\frac{\mu - E}{k_0 T}} (\bar{k}\bar{E}) \bar{k} d^3 r. \quad (1.54)$$

Воспользуемся преобразованием для \bar{k} -пространства:

$$\int F(\bar{k}) \bar{a}(\bar{k}) \bar{k} d^3 k = \frac{4\pi}{3} \int \bar{a}F(\bar{k}) k^4 dk. \quad (1.55)$$

Здесь F и \bar{a} зависят от абсолютной величины вектора \bar{k} , и это равенство не трудно доказать.

Введем в \bar{k} - пространстве сферическую систему координат, направив полярную ось z по вектору \bar{a} . В сферических координатах k, ϑ, φ :
 $k_x = k \sin \vartheta \cos \varphi$, $k_y = k \sin \vartheta \sin \varphi$, $k_z = k \cos \vartheta$, $(\bar{a}(k)\bar{k}) = a(k)k \cos \vartheta$,
 $d^3k = k^2 dk \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$. (1.55a)

Интеграл (1.55) запишем в виде

$$\int [\bar{i}_0 k \sin \vartheta \cos \varphi + \bar{j}_0 k \sin \vartheta \sin \varphi + \bar{k}_0 k \cos \vartheta] F(k) a(k) k^3 dk \cos \vartheta \sin \vartheta d\varphi, \quad (1.55b)$$

где $\bar{i}_0 = \bar{k}_x$; \bar{j}_0, \bar{k}_0 - единичные векторы вдоль осей x, y, z .

При интегрировании по φ слагаемые, пропорциональные составляющим k_x и k_y , равны нулю, т.к. содержат множители $\cos \varphi$ и $\sin \varphi$.

Интегрирование слагаемого, пропорционального k_z , по φ и ϑ дает

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

Тогда для интеграла $\int F(k) \bar{a}(k) \bar{k} d^3k$ будет справедливо равенство (1.55). С учетом (1.55) плотность тока будет определена из соотношения:

$$\bar{j}_s = -\frac{e^2 n^2 \bar{E}}{4\pi^3 m_n^* k_0 T N_c} \frac{4\pi}{3} \int_0^{\infty} \tau_s e^{-\frac{e}{kT} k} k^4 dk. \quad (1.56)$$

Обозначив $\frac{E}{k_0 T} = \alpha$ и используя соотношение $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, получим:

$$k^4 dk = \frac{(2m_n^* k_0 T)^{3/2}}{2\hbar^5} \alpha^{3/2} d\alpha. \quad (1.57)$$

Тогда с учетом $N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* k_0 T}{\hbar^3} \right)^{3/2}$ получим:

$$\bar{j}_s = -\frac{e^2 n \bar{E}}{m_n^*} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau_s e^{-\alpha} \alpha^{3/2} d\alpha. \quad (1.58)$$

Введем обозначение

$$\langle \tau_s \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau_s e^{-\alpha} \alpha^{3/2} d\alpha. \quad (1.59)$$

В этом случае плотность тока \bar{j}_s будет определена:

$$\bar{j}_s = \frac{e^2 n \langle \tau_s \rangle}{m_n^*} \bar{E} = en \mu_n \bar{E} = \sigma_n \bar{E}, \quad (1.60)$$

где $\mu_n = \frac{e \langle \tau_s \rangle}{m_n^*}$ - дрейфовая подвижность электронов, (1.61)

$\sigma_n = en \mu_n$ - электропроводность, обусловленная электронами. (1.62)

Величина $\langle \tau_s \rangle$ - среднее время релаксации электронов.

Аналогично можно определить плотность тока дырок:

$$\bar{j}_p = \frac{e^2 p \langle \tau_p \rangle}{m_p^*} \bar{E} = ep \mu_p \bar{E} = \sigma_p \bar{E}. \quad (1.63)$$

Дрейфовая подвижность дырок

$$\mu_p = \frac{e \langle \bar{E}_p \rangle}{m_p}. \quad (1.64)$$

Электропроводность, обусловленная дырками, $\sigma_p = e \mu_p p$. (1.65)

Полная плотность тока в полупроводнике равна

$$\vec{j} = \vec{j}_n + \vec{j}_p = (\sigma_n + \sigma_p) \vec{E} = \sigma \vec{E}. \quad (1.66)$$

1.5. Рассеяние электронов на колебаниях решетки в атомном кристалле

Электрон при своем движении в кристалле обменивается энергией с колебаниями решетки двойным образом.

1. Электрон передает часть своей энергии решетке, так что определенное нормальное колебание с частотой ω_q увеличивает свое квантовое число на единицу. В этом случае образуется фонон с энергией $\hbar\omega_q$ и квазиимпульсом $\vec{p} = \hbar\vec{q}$ и число фононов возрастает на единицу.

2. Электрон сам получает часть энергии от решетки, так что квантовое число определенного колебания с частотой ω_q уменьшается на единицу, т.е. фонон с энергией $\hbar\omega_q$ и квазиимпульсом $\vec{p} = \hbar\vec{q}$ исчезает.

Таким образом, в любом из этих двух случаев электрон, сталкиваясь с фононом, обменивается с ним энергией и квазиимпульсом. Такой механизм рассеяния получил название однофононный.

Так как число фононов определяется температурой, то и рассеяние электронов на *тепловых колебаниях* решетки зависит от температуры.

Рассмотрим механизм однофононного рассеяния электрона на тепловых колебаниях решетки кристалла.

Пусть до столкновения электрон имел волновой вектор \vec{k} и энергию $E(\vec{k})$. После столкновения его волновой вектор стал \vec{k}' и энергия $E'(\vec{k}')$.

Возникающий или исчезающий фонон при столкновении обладает энергией $\hbar\omega_q$ и его волновым вектором \vec{q} . При взаимодействии электрона с фононом выполняются два закона: закон сохранения энергии и закон сохранения квазиимпульса.

При поглощении электроном фонона

$$\begin{aligned} E'(\vec{k}') &= E(\vec{k}) + \hbar\omega_q, \\ \vec{k}' &= \vec{k} + \vec{q}. \end{aligned} \quad (1.67)$$

В этом случае число фононов уменьшится на единицу, $N'_q = N_q - 1$.

При испускании электроном фонона

$$E'(\vec{k}') = E(\vec{k}) - \hbar\omega_q,$$

$$\bar{k}' = \bar{k} - \bar{q}. \quad (1.68)$$

Число фононов увеличивается на единицу, т.е.

$$N_q' = N_q + 1. \quad (1.69)$$

Рассеяние носителей заряда может быть упругим и неупругим. Характеризуются такие столкновения величиной относительного изменения энергии электрона за одно столкновение

$$\delta = \frac{E' - E}{E} = \frac{\Delta E}{E} \quad (1.70)$$

или за единицу времени

$$A = \frac{\Delta E}{\tau} = \frac{E\delta}{\tau}. \quad (1.71)$$

В случае упругого рассеяния $\delta \ll 1$ среднее время рассеяния τ имеет смысл времени релаксации системы по импульсу. Время релаксации по энергии $\tau_E = \tau / \delta$.

Рассмотрим атомный полупроводник кубической сингонии, энергетическая схема которого представлена на рис. 1.8. В процессе колебания кристаллической решетки возникают как поперечные волны, представляющие собой волны деформации сдвига, так и продольные, являющиеся волнами деформации сжатия и растяжения. Поперечные волны в кубическом кристалле не приводят к изменению объема, тогда как продольные обуславливают изменение объема кристалла. При сжатии кристалла уменьшается величина постоянной решетки и нижний край зоны проводимости (рис. 1.8) смещается вверх, а верхний край валентной зоны — вниз, в связи с чем ширина запрещенной зоны увеличивается. При растяжении решетки ширина запрещенной зоны уменьшается, а величина постоянной решетки увеличивается (рис. 1.8).

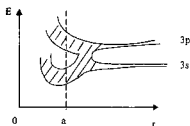


Рис. 1.8. Энергетическая схема атомного полупроводника:
 a — постоянная решетки в отсутствие деформации

Таким образом, локальная деформация в кристалле, создаваемая продольной акустической волной, приводит к волнообразному смещению

дна зоны проводимости и вершины валентной зоны проводимости. Схематично это представлено на рис. 1.9.

В процессе движения электрона в таком полупроводнике основной механизм его рассеяния будет обусловлен продольными колебаниями решетки, возникшими в результате теплового возбуждения.



Рис. 1.9. Изменение энергии зон проводимости полупроводника и валентной зоны под воздействием продольных акустических колебаний решетки: E_c – дно зоны проводимости, E_v – вершина валентной зоны

Покажем, что это рассеяние упругое и происходит на длинноволновых фононах.

Запишем закон сохранения энергии в виде:

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 (\bar{k} \pm \bar{q})^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar \omega_q, \quad (1.72)$$

откуда

$$q^2 \pm 2kq \cos \vartheta \pm \frac{2m^*}{\hbar} \omega_q = 0, \quad (1.73)$$

где ϑ – угол между векторами \bar{k} и \bar{q} .

Если электрон взаимодействует только с длинноволновыми фононами, то $\omega_q = V_{sw} q$, где V_{sw} – скорость распространения продольной звуковой волны. В этом случае из уравнения (1.73) находим:

$$q = \mp 2k \cos \vartheta \pm \frac{2m^* V_{sw}}{\hbar}. \quad (1.74)$$

Значение волнового вектора \bar{k} определим из соотношения $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \langle E \rangle = k_0 T$. Будем иметь $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* k_0 T}$. Оценим в выражении (1.74) отношение второго члена правой части к первому, т.е.

$$\frac{m^* V_{sw}}{\hbar k} = \sqrt{\frac{m^* V_{sw}^2}{2k_0 T}} = \sqrt{\frac{T_{sp}}{T}}. \quad (1.75)$$

Здесь $T_{sp} = \frac{m^* V_{sw}^2}{2k_0}$. Проведем численную оценку соотношения (1.75), принимая скорость продольной звуковой волны $V_{sw} = 3 \cdot 10^3$ м/с, $m^* = m = 10^{-27}$ гр, $k_0 = 10^{-16}$ эрг/град, то $T_{sp} = 1$ К. Следовательно, при темпера-

турах, намного превышающих 1 К , можно пренебречь вторым слагаемым в (1.74) по сравнению с первым. Тогда

$$q = \pm 2k \cos \vartheta. \quad (1.76)$$

В зависимости от ϑ волновое число q может меняться от 0 до $2k$, т.е. в среднем на k . Поскольку при $T = 300 \text{ К}$ $k \approx 10^7 \text{ см}^{-1}$, то q может принимать значения от 0 до $2 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$, что соответствует энергии фононов от 0 до $\hbar \omega_q = \hbar V_{\text{зв}} k = 10^{-15} \text{ эрг} \approx 6 \cdot 10^{-4} \text{ эВ}$ ($1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$). Малые значения энергии соответствуют длинноволновым фононам, т.е. электроны поглощают и испускают фононы с $q \approx k$. Максимальное значение волнового вектора \bar{q} по теории Дебая равно $q_0 \approx 10^8 \text{ см}^{-1}$, т.е. $q_{\text{max}} \ll q_0$. Следовательно, электроны взаимодействуют только с длинноволновыми фононами, поглощая или излучая фонон с $q \approx k$. В этом случае соотношение $\omega = V_0 q$ хорошо оправдывается.

Оценим соотношение

$$\frac{\hbar \omega_q}{E} = \frac{\hbar \omega_0}{k_0 T} \ll 1. \quad (1.77)$$

Отсюда следует, что энергия при рассеянии не изменяется. Следовательно, рассеяние электронов на продольных акустических колебаниях является упругим. В этом случае можно положить $E = E'$, $k = k'$.

При низких температурах средняя скорость движения электрона приближается к скорости распространения упругих волн в кристалле, и энергией фонона в уравнении (1.74) пренебречь нельзя. В этом случае столкновения электрона с фононом являются неупругими.

Для упругого рассеяния электронов на продольных акустических фононах время релаксации можно определить из соотношения (1.45)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_x)} W(\bar{k}, \bar{k}') \left[1 - \frac{k'_x}{k_x} \right] d^3r = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_x)} W(\bar{k}, \bar{k}') \left(\mp \frac{q_x}{k_x} \right) d^3r = \\ &= \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_x)} W^+(\bar{k}, \bar{k}') \frac{q_x}{k_x} d^3r + \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_x)} W^-(\bar{k}, \bar{k}') \frac{q_x}{k_x} d^3r. \end{aligned} \quad (1.78)$$

Первый член правой части уравнения учитывает поглощение, второй – испускание фононов при рассеянии электронов. Здесь учтено соотношение $\bar{k}' = \bar{k} \mp \bar{q}$.

Согласно общей теории расчета вероятности перехода за единицу времени будем иметь:

$$W(\bar{k}, \bar{k}') = W(\bar{k}, \bar{k} \pm \bar{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \bar{k}', N'_q | \Delta V | \bar{k}, N_q \rangle \right|^2 \delta(E_{\bar{k}'} - E_{\bar{k}} \mp \hbar \omega_q). \quad (1.79)$$

Здесь $\langle \bar{k}', N'_q | \Delta V | \bar{k}, N_q \rangle$ – матричный элемент перехода из состояния \bar{k}, N_q в состояние \bar{k}', N'_q , ΔV – изменение потенциальной энергии.

В случае поглощения фонона:

$$W^+(\bar{k}, \bar{k}') = \frac{4\pi C^2 q^2}{9NM\omega_q} N_q \delta(E'_{\bar{k}+\bar{q}} - E_{\bar{k}} - \hbar\omega_q), \quad (1.80)$$

а в случае испускания фонона:

$$W^-(\bar{k}, \bar{k}') = \frac{4\pi C^2 q^2}{9NM\omega_q} (N_q + 1) \delta(E'_{\bar{k}-\bar{q}} - E_{\bar{k}} - \hbar\omega_q) [1, 278]. \quad (1.80a)$$

Дельта-функция $\delta(E'_{\bar{k}\pm\bar{q}} - E_{\bar{k}} \mp \hbar\omega_q)$ выражает закон сохранения энергии и волнового вектора. Постоянная C , имеющая размерность энергии, характеризует интенсивность взаимодействия электрона с колебаниями решетки кристалла.

Оценим величину

$$C = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\text{grad} u_k|^2 d^3r, \quad (1.81)$$

где u_k — смещение. Положим $|\text{grad} u_k| \approx \frac{u_k}{a}$, где a — постоянная решетки,

тогда $C \approx \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2}\right) \int |u_k|^2 d^3r = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$. Здесь учтено условие нормировки $\int |u_k|^2 d^3r = 1$. Принимая $a = 10^{-8}$ см, получаем $C \approx 5$ эВ, т.е. порядка атомной энергии.

В выражениях (1.80) и (1.80a) N — число элементарных ячеек в кристалле, M — масса атома. Функция распределения фононов N_q мало отличается от равновесной $\langle N_q \rangle_{\text{рав}}$, в этом случае можно считать, что

$$N_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_q}{k_0 T}} - 1}. \quad (1.82)$$

Учитывая (1.77), выражение (1.82) можно разложить в ряд

$$\langle N_q \rangle_{\text{рав}} = \langle N_{q+1} + 1 \rangle_{\text{рав}} = \frac{k_0 T}{\hbar V_{\omega q}}. \quad (1.83)$$

Подставляя найденные значения (1.83), (1.80), (1.80a) в (1.78), можно определить τ .

Вычисленное значение τ в сферической системе координат будет иметь вид:

$$\tau = \frac{9\pi}{4\sqrt{2}} \frac{\hbar^4 M V_{\omega}^2}{C^2 a^3 m^{3/2}} \frac{1}{k_0 T E^{1/2}}. \quad (1.84)$$

Таким образом, время релаксации при рассеянии электронов на акустических колебаниях решетки в атомных полупроводниках имеет зависимость от энергии

$$\tau(k) = \frac{\tau_0}{m^{3/2} T} E^{-1/2}. \quad (1.85)$$

Здесь $\tau_0 = \frac{9\pi\hbar^4 MV_{\pi}^2}{4\sqrt{2}C^2 a^3 k_0}$. Определив τ , можно найти значение длины свободного пробега электрона,

$$l = \tau V = \frac{9\pi}{4} \frac{\hbar^4 MV_{\pi}^2}{C^2 a^3 m^2} \frac{1}{k_0 T} = \frac{\sqrt{2}\tau_0}{m^2} T^{-1}. \quad (1.86)$$

Как видно из (1.86), длина свободного пробега не зависит от энергии носителей заряда.

Оценим величину времени релаксации для полупроводников. Для примера выберем германий. В чистом германии при комнатной температуре подвижность электронов $\mu_n = 0,39 \text{ м}^2/\text{Вс}$. Если принять $m^* = 0,3m$, т.о. $e/m^* = 6 \cdot 10^{11} \text{ Кл/кг}$. Тогда, вспомнив значение $\mu_n = \frac{\Delta V}{E}$,

где $\Delta V = \frac{eE}{m} \tau$, будем иметь:

$$\tau = \frac{m^* \mu_n}{e} = 6,5 \cdot 10^{-13} \text{ с}.$$

Из выражений (1.85) для τ видно, что при повышении энергии носителей заряда время релаксации при рассеянии на ионизованной примеси увеличивается, а при рассеянии на акустических колебаниях — уменьшается. Следовательно, в области низких температур при рассеянии на примесях преобладают медленные электроны, а при рассеянии на акустических фоновых в области высоких температур — быстрые электроны.

1.6. Рассеяние электронов проводимости в ионных кристаллах

В полярных полупроводниках, а также в бинарных соединениях типа $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$, в которых связь между атомами носит частично ионный характер, электроны проводимости гораздо сильнее взаимодействуют с оптическими колебаниями, чем с акустическими. Для длинноволновых оптических колебаний можно ввести понятие о поляризации кристалла, характеризуемое вектором поляризации $\vec{P}(r)$. Такие колебания получили название *поляризационных волн*.

Рассеяние носителей заряда в таких полупроводниках происходит при взаимодействии их с поляризационными волнами. При этом продольные колебания рассеивают значительно сильнее, чем поперечные. При столкновении электрона с оптическим фононом возникает или исчезает фонон с энергией $\hbar\omega_{\text{оп}}$.

Рассмотрим ионный кристалл с кубической решеткой типа NaCl. Элементарная ячейка объемом $2a^3$ содержит две частицы с положительным и отрицательным ионом. Решетка такого кристалла

обладает центром симметрии, и смещение k -го атома в n -й ячейке \bar{u}_n^k будет выражено через нормальные координаты¹ $a_{\bar{q}}$ в виде

$$\bar{u}_n^k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{q}} \bar{e}_{\bar{q}}^k (a_{\bar{q}} e^{i\bar{q}\bar{a}_n} + a_{\bar{q}}^* e^{-i\bar{q}\bar{a}_n}), \quad (1.87)$$

где $k = 1$ и 2 соответственно для положительных и отрицательных ионов; $j = 1, 2$; \bar{q} — волновой вектор; \bar{a}_n — вектор прямой решетки, $\bar{a}_n = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3$; N — число ячеек в объеме $V = N2a^3$ кристалла; $\bar{e}_{\bar{q}}^k$ — вещественные поляризационные векторы, удовлетворяющие для данных оптических волн уравнению

$$m_1\bar{e}_{\bar{q}}^1 + m_2\bar{e}_{\bar{q}}^2 = 0, \quad (1.88)$$

где m_1 и m_2 — масса ионов.

Полагаем, что векторы $\bar{e}_{\bar{q}}^k$ нормированы:

$$m_1(\bar{e}_{\bar{q}}^1)^2 + m_2(\bar{e}_{\bar{q}}^2)^2 = m_1 + m_2. \quad (1.89)$$

Уравнения (1.88) и (1.89) для $\bar{e}_{\bar{q}}^k$ удовлетворяются, если положить

$$\bar{e}_{\bar{q}}^1 = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \bar{i}, \quad \bar{e}_{\bar{q}}^2 = -\sqrt{\frac{m_1}{m_2}} \bar{i}, \quad (1.90)$$

где \bar{i} — единичный вектор.

Если смещения обоих ионов одинаковы, т.е. оба иона колеблются в фазе, то ячейка смещается как одно целое. Это приводит к локальным сжатиям и разряжениям в кристалле подобно сжатиям и разряжениям, возникающим при прохождении упругих, или акустических, волн. Такие колебания называются акустическими.

Если ионы смещаются в противоположных направлениях, они колеблются в противофазе, поэтому центр масс ячейки остается в покое, но возникает смещение центров тяжести зарядов, что приводит к образованию дипольного электрического момента. Такие колебания получили название оптических колебаний.

Дипольный момент, возникающий в объеме элементарной ячейки $\Omega_0 = 2a^3$, равен геометрической сумме смещений ионов, умноженных на их заряды ($\pm Ze$).

Для длинных оптических волн вектор поляризации

$$\bar{P}(\bar{r}) = \frac{Ze}{2a^3} [\bar{u}^1(\bar{r}) - \bar{u}^2(\bar{r})], \quad (1.91)$$

где, в соответствии с (1.87),

$$\bar{u}^k(\bar{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{q}} \bar{e}_{\bar{q}}^k (a_{\bar{q}} e^{i\bar{q}\bar{r}} + a_{\bar{q}}^* e^{-i\bar{q}\bar{r}}). \quad (1.92)$$

Здесь \bar{a}_n заменили на \bar{r} . Из выражений (1.92) и (1.91) следует:

¹ Нормальные координаты — это координаты, зависящие от времени гармонически.

$$\bar{P}(\vec{r}) = \frac{Ze}{2a^3} \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{m_1 + m_2}{\sqrt{m_1 m_2}} \sum_{\vec{q}} \hat{i}_j (a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} + a_{\vec{q}}^* e^{-i\vec{q}\vec{r}}). \quad (1.93)$$

Поляризационные волны (1.93) порождают распределенный в пространстве связанный заряд $\rho = -\text{div} \bar{P}$, являющийся источником электрического поля, потенциал которого Φ удовлетворяет уравнению Пуассона:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho = 4\pi \text{div} \bar{P}(\vec{r}) = i \frac{2\pi Ze}{a^3 \sqrt{N}} \frac{m_1 + m_2}{\sqrt{m_1 m_2}} \sum_{\vec{q}} (\hat{i}_j \cdot \vec{q}) (a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} - a_{\vec{q}}^* e^{-i\vec{q}\vec{r}}). \quad (1.94)$$

Из этого выражения видно, что электрическое поле создается только продольными оптическими колебаниями, для которых $\hat{i}_j \parallel \vec{q}$, т.е. $(\hat{i}_j \cdot \vec{q}) = q^1$.

В этом случае уравнение (1.94) имеет решение:

$$\Phi = -i \frac{2\pi Ze}{a^3 \sqrt{N}} \frac{m_1 + m_2}{\sqrt{m_1 m_2}} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{q} (a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} - a_{\vec{q}}^* e^{-i\vec{q}\vec{r}}). \quad (1.95)$$

В этом выражении под знаком суммы круглая скобка — чисто мнимая величина. Следовательно, потенциал Φ вещественен, что и должно быть. Величина $(-e\Phi)$ является энергией возмущения в кристалле.

1.7. Определение времени релаксации электронов проводимости в ионном кристалле

Частота оптического фонона слабо зависит от квазимпульса \vec{q} , и при соударении энергия электрона либо увеличивается, либо уменьшается на одинаковую величину, равную

$$\pm \hbar \omega_{\text{оп}} = \pm \hbar \omega_0. \quad (1.96)$$

Здесь $\omega_0 = \omega$, — предельная частота продольной оптической ветви. Следует отметить, что электрон взаимодействует в этом случае только с продольными фононами.

Рассмотрим законы сохранения энергии и волнового вектора электрона при взаимодействии с оптическими колебаниями в случае выполнения условия (1.96). Закон сохранения волнового вектора при поглощении или испускании фонона имеет вид:

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q}, \quad (1.97)$$

а закон сохранения энергии в этом случае

$$E_{\vec{k}'} = E_{\vec{k}} \pm \hbar \omega_0, \quad (1.97a)$$

где $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$.

Из (1.97) и (1.97a) следует

¹ Для продольных волн индекс j опускаем.

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mp \hbar \omega_0 \pm \frac{\hbar^2 k q}{m} \cos \varphi = 0, \quad (1.98)$$

где φ — угол между \vec{k} и \vec{q} .

Из решения уравнения (1.98) будем иметь:

$$q_1 = -k \cos \varphi \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \varphi + \chi^2}, \quad (1.99)$$

$$q_2 = k \cos \varphi \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \varphi - \chi^2}. \quad (1.99a)$$

Здесь q_1 — поглощенный фотон, q_2 — испускаемый фотон.

Волновое число χ соответствует электрону с энергией $\hbar \omega_0$:

$$\frac{\hbar^2 \chi^2}{2m} = \hbar \omega_0. \quad (1.99b)$$

Для определения максимального и минимального значения q и вычисления времени релаксации рассмотрим случай высокой и низкой температуры.

1. Высокие температуры.

При высоких температурах, когда $T \gg T_C^1$ или $k_0 T \gg \hbar \omega_0$, или $k \gg \chi$, т.е. когда энергия фотона $\hbar \omega_0$ много меньше энергии электрона $k_0 T$

$$\delta_{\text{ан}} = \frac{\Delta E}{E} = \frac{(\hbar \omega_0)^2}{2(k_0 T)^2} \ll 1, \quad (1.100)$$

рассеяние можно считать упругим, так как $\omega_{\text{макс}} \approx \frac{V_{\text{зв}}}{a} = 10^{13} \text{ с}^{-1}$, то $T_C \approx 100 \text{ K}$.

В выражениях (1.99) и (1.99a) пренебрежем величиной χ^2 и получим $q_{\text{мин}} = 0$, $q_{\text{макс}} = 2k$ как в случае испускания, так и поглощения фотона.

Расчет времени релаксации, когда рассеяние упругое, будет таким же, как и в случае рассеяния на акустических фотонах:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{V}{8\pi^2 k^2} \left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)^{-1/2} \int_0^{2k} \omega(q) (2N_q + 1) q^3 dq. \quad (1.101)$$

Здесь $\left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)^{-1} = \frac{m}{\hbar^2 k}$, $\omega(q) = \frac{4\pi}{9N} \frac{c^2 q^2}{M \omega_q}$, $V = 2a^3 N$.

Учитывая, что при рассеянии на акустических фотонах $\hbar \omega_0 \ll k_0 T$ и $2N_q + 1 \approx \frac{2k_0 T}{\hbar \omega_0} + 1 \approx 2 \frac{k_0 T}{\hbar \omega_0}$, после интегрирования (1.101) получим:

$$\tau = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \frac{M a^3 (\hbar \omega_0)^3 E^{1/2}}{Z^2 e^4 m^{1/2} k_0 T}. \quad (1.102)$$

Длина свободного пробега

¹ Здесь $T_C = \frac{\hbar V_0 q_0}{k_0} = \frac{\hbar \omega_{\text{макс}}}{k_0}$ — температура Дебая, характеризующая ту область для каждого вещества, где становятся существенными квантовые эффекты.

$$l = \tau V = \frac{V}{2\pi} \frac{M}{m^*} \left(\frac{\hbar \omega_0}{Ze^2/a} \right)^2 \frac{E}{k_0 T}, \quad (1.103)$$

где V – скорость электрона.

Так как $\frac{M}{m^*} \gg 1$, $\left(\frac{\hbar \omega_0}{Ze^2/a} \right) \ll 1$, а $\frac{E}{k_0 T} \approx 1$, то отношение l/a может

быть как много больше, так и меньше 1. В первом случае движение электрона подчиняется законам квантовой механики.

2. В случае низких температур, $\hbar \omega_0 \gg k_0 T$, электрон-фононное взаимодействие становится неупругим. Тогда возможны только процессы поглощения фононов, и вводить время релаксации нельзя. Но теоретически показано (Б.И. Давыдов, И.М. Шмушкевич. УФН, 24, 21, 1940), что и в случае низких температур, если учитывать условие $\hbar \omega_0 \gg k_0 T$, большинство электронов, поглощающих энергию фонона, переходят в энергетический интервал от $\hbar \omega_0$ до $2\hbar \omega_0$. Такие электроны почти мгновенно испускают фононы, т.к. отношение вероятности испускания к вероятности поглощения $\frac{N_q + 1}{N_q} \approx \exp \frac{\hbar \omega_0}{k_0 T} \gg 1$. В результате такого

поглощения и мгновенного испускания фонона энергия электрона почти не меняется. Это позволяет рассматривать взаимодействие электрона с оптическими колебаниями решетки при очень низких температурах как упругое и ввести время релаксации.

Учитывая при низких температурах $N_q = \langle N_q \rangle_{\text{ст}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_0 T}} - 1}$, расчет

для времени релаксации дает выражение вида:

$$\tau_{\infty} = \frac{3\sqrt{2}}{4\pi} \frac{Ma^3 (\hbar \omega_0)^{3/2}}{Z^2 e^4 m^* V_1} e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_0 T}}. \quad (1.104)$$

Из (1.104) видно, что при низких температурах время релаксации на оптических фононах от энергии не зависит, а от температуры зависит экспоненциально.

Длина свободного пробега

$$l = \tau V = \frac{3a}{2\pi} \frac{M}{m^*} \left(\frac{\hbar \omega_0}{Ze^2/a} \right)^2 e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_0 T}} \sqrt{\frac{E}{k_0 T}}. \quad (1.105)$$

Следует отметить, что из-за наличия множителя $\exp \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_0 T} \right)$ длина свободного пробега всегда больше межатомного расстояния, т.е. $l \gg a$.

1.8. Теория деформационного потенциала в кубических кристаллах с простой зонной структурой

Задачу о рассеянии электрона на акустических колебаниях решетки можно решить методом деформационного потенциала. В данном методе учитывается, что при распространении упругих волн по кристаллу на периодический потенциал внутреннего поля накладывается дополнительный периодический потенциал. Это приводит к появлению переменной потенциальной энергии электрона, который получил название потенциала деформации. *Деформационный потенциал* – изменение энергии электрона в зоне проводимости или дырки в валентной зоне при деформировании полупроводника. Деформация изменяет ширину запрещенной зоны полупроводника. Теория деформационного потенциала обладает рядом преимуществ, в частности простотой вывода, позволяющей обобщить теорию на более сложные случаи, например, на случай сложной зонной энергетической структуры.

Рассмотрим теорию деформационного потенциала в простом кубическом одноатомном кристалле для случая простой зонной структуры, когда энергия электрона проводимости определяется соотношением:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.106)$$

Волнообразные колебания ширины запрещенной зоны при возбуждении продольной акустической волны сжатия представлены на рис. 1.10.

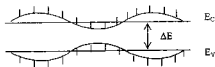


Рис. 1.10. Волнообразные колебания ширины запрещенной зоны

Для упругих колебаний состояние деформированного кристалла характеризуется компонентами тензора деформации

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (1.107)$$

где $\frac{\partial u_j}{\partial x_i}$ – изменение смещения по j при изменении расстояния по i -оси;

x_i ($x_1 \equiv x$, $x_2 \equiv y$, $x_3 \equiv z$) – прямоугольные координаты; u_i ($i = 1, 2, 3$) – прямоугольные проекции смещения $\bar{u}(x_1, x_2, x_3)$ колеблющихся атомов.

Положение дна зоны проводимости E_C (вершины валентной зоны E_V) можно рассматривать как функцию компонент тензора деформации ε_{ij} .

Разлагая E_C в ряд по ε_{ij} , получим:

$$E_c(\varepsilon_{ij}) = E_c(0) + \sum_{i,j} a_{ij} \varepsilon_{ij} = E_c(0) + a_{11} \varepsilon_{11} + a_{12} \varepsilon_{12} + \dots \quad (1.108)$$

Величины a_{ij} и ε_{ij} зависят от ориентации координатных осей x_i относительно осей кристалла, кроме того, a_{ij} зависит также от природы кристалла. Поместим начало координат в вершину куба недеформированной кристаллической ячейки, а оси координат направим по его ребрам. Нетрудно показать, что для кристалла кубической симметрии недиагональные коэффициенты a_{ij} ($i \neq j$) равны нулю. Действительно, повернув координатную систему вокруг оси $x_3 \equiv z$ на угол $\pi/2$, получим в новой системе (обозначенной штрихами) $x'_1 = x_2, x'_2 = -x_1$, тогда согласно (1.108) $\varepsilon'_{12} = -\varepsilon_{12}$. Коэффициенты a_{ij} при таком повороте координатной системы не меняются, т.к. кристалл ориентирован одинаково при обоих положениях системы, следовательно, $a'_{12} = a_{12}$. Пусть деформация кристалла такова, что отлична от нуля только компонента тензора ε_{12} . В этом случае смещение края зоны проводимости, выраженное в обеих координатных системах, повернутых друг относительно друга, равно

$$E_c(\varepsilon_{12}) - E_c(0) = a_{12} \varepsilon_{12} = a'_{12} \varepsilon'_{12},$$

откуда $a_{12} = 0$. Можно показать, что и все остальные недиагональные коэффициенты a_{ij} также равны нулю. Так как в кубическом кристалле оси x_1, x_2, x_3 равнозначны, то $a_{11} = a_{22} = a_{33} = E_1$, и, учитывая (1.108), будем иметь:

$$E_c(\varepsilon_{ij}) = E_c(0) + E_1 \Delta, \quad (1.109)$$

$$\text{где } \Delta = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = \text{div} \bar{u} = \frac{\delta V}{V} \quad (1.109a)$$

– относительное изменение объема в данной точке.

Из уравнения (1.109) видно, что E_1 имеет размерность энергии. Обозначим $E_1 \Delta = U$ и, используя (1.109a), получим

$$U = E_1 \text{div} \bar{u}(r), \quad (1.110)$$

т.е. потенциальную энергию или потенциал рассеяния.

1.9. Определение вероятности перехода электрона при рассеянии

В теории деформационного потенциала Бардина и Шокли¹ доказывается, что при рассмотрении рассеяния электронов на колебаниях решетки можно электрон описывать не блоховской волновой функцией, а плоской волной, если потенциал рассеяния будет определен соотношением (1.110), где константа E_1 связана с константой взаимодействия $C = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\text{grad} u_k|^2 d^3 r_0$, имеющей размерность энергии.

Определим время релаксации, используя потенциал рассеяния и описывая электрон плоской волной

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (1.111)$$

где V – объем кристалла,

Так как потенциал рассеяния $U = E_1 \Delta$, здесь

$$\Delta = \text{div} \vec{u} = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} (\vec{e}_{\vec{q}} \vec{q}) (a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} + a_{-\vec{q}}^* e^{-i\vec{q}\vec{r}}), \quad (1.112)$$

то из (1.112) следует, что электроны взаимодействуют только с продольной акустической волной, для которой справедливо условие: $\vec{e}_{\vec{q}} \parallel \vec{q}$.

Для определения вероятности перехода электрона из состояния \vec{k} в \vec{k}'

$$W(\vec{k}\vec{k}') = W(\vec{k}, \vec{k} \pm \vec{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} \langle \vec{k}', N_{\vec{q}}' | \Delta V | \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle^2 \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \mp \hbar \omega_{\vec{q}}), \quad (1.113)$$

вычислим матричный элемент:

$$M_{\vec{k}\vec{k}'} = \langle \vec{k}' | U | \vec{k} \rangle = \int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (1.114)$$

Используя (1.111) и значение $U = E_1 \text{div} \vec{u}(\vec{r})$, получим

$$M_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{iE_1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \vec{q} \left\{ a_{\vec{q}} \frac{1}{V} \int e^{i(\vec{k}+\vec{q}-\vec{k}')\vec{r}} d\vec{r}^3 - a_{-\vec{q}}^* \frac{1}{V} \int e^{i(\vec{k}-\vec{q}-\vec{k}')\vec{r}} d\vec{r}^3 \right\}. \quad (1.115)$$

Первый интеграл отличен от нуля и равен V , когда $\vec{k} + \vec{q} = \vec{k}'$, а второй – в случае $\vec{k} - \vec{q} = \vec{k}'$. Первое условие определяет поглощение электроном фонона, второе – испускание. В обоих случаях:

$$|M_{\vec{k}\vec{k}'}|^2 = \frac{E_1^2}{N} q^2 |a_{\vec{q}}|^2 \quad (1.116)$$

Здесь учитывается, что $|a_{-\vec{q}}|^2 = |a_{\vec{q}}^*|^2$.

Комплексная нормальная координата, гармонически зависящая от времени, может иметь вид:

$$a_{\vec{q}} = |a_{\vec{q}}| e^{-i(\omega_{\vec{q}} t - C)}, \quad (1.117)$$

где $\omega_{\vec{q}} = V_0 q$ (V_0 – скорость продольной звуковой волны), тогда

¹ Shokley W., Bardeen J. // Phys. Rev. 1959. № 77. P. 407.

$$a_q e^{i\vec{q}\vec{a}_s} + a_q^* e^{-i\vec{q}\vec{a}_s} = 2|a_q| \cos(\vec{q}\vec{a}_s - \omega_q t + \zeta), \quad (1.118)$$

где ζ – фаза.

Амплитуда колебания атома равна $2|a_q|$. Так как рассеяние упругое, то колебания решетки можно рассматривать по законам классической механики. Максимальная потенциальная энергия гармонических колебаний атома по классической статистике равна:

$$\frac{1}{2} M \omega_q^2 (\text{амплит})^2 = \frac{1}{2} M \omega_q^2 (2|a_q|)^2 = k_0 T, \quad (1.119)$$

откуда $|a_q|^2 = \frac{k_0 T}{2M\omega_q^2 V_0^2}$. Подставив в (1.116), получим

$$|M_{kk'}|^2 = \frac{E_1^2 k_0 T}{2NMV_0^2}, \quad (1.120)$$

т.е. вероятность перехода не зависит от \vec{q} . Здесь $E_1 = \frac{2}{3}C$, где C – константа связи электрона с фононом.

Найденное выражение для матричного перехода позволяет определить вероятность перехода и тем самым вычислить время релаксации τ .

1.10. Определение времени релаксации в случае действия нескольких механизмов рассеяния

Каждый из рассмотренных механизмов рассеяния является основным механизмом релаксации носителей тока по импульсам для определенного интервала температур. Например, при очень низких температурах, когда атомы примеси еще не ионизированы и колебания решетки слабы (число фононов мало), основным механизмом релаксации является рассеяние на нейтральных атомах примеси или на точечных дефектах. С ростом температуры становится существенным рассеяние на ионах примеси. Однако переход от одного механизма к другому является плавным, т.е. имеются температурные интервалы, в которых одновременно независимо действуют два или несколько механизмов рассеяния – имеет место смешанный механизм.

В атомных полупроводниках с ковалентными связями, в таких как германий (Ge) и кремний (Si), обычно одновременно действуют механизмы рассеяния на ионах примеси и на акустических колебаниях, а в полупроводниках с ионной связью, в соединениях типа $A^{III}B^V$ одновременно действуют механизмы рассеяния на ионах примеси и на оптических фононах.

Определим эффективное время релаксации, когда одновременно действуют несколько механизмов рассеяния. Пусть электрон проводимости обладает вероятностью $\mathcal{W}_L(\vec{k}, \vec{k}')$ в единицу времени перейти

из состояния \vec{k} в \vec{k}' в результате взаимодействия с акустическими колебаниями и вероятностью $W_i(\vec{k}, \vec{k}')$ рассеяться на ионах примеси. В случае независимости механизмов рассеяния можно определить полную вероятность рассеяния в единицу времени выражением

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W_L(\vec{k}, \vec{k}') + W_i(\vec{k}, \vec{k}'). \quad (1.121)$$

Если столкновения упруги, то можно ввести время релаксации:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - \cos \theta] = \sum_{\vec{k}'} W_L(\vec{k}, \vec{k}') [1 - \cos \theta] + \sum_{\vec{k}'} W_i(\vec{k}, \vec{k}') [1 - \cos \theta] = \frac{1}{\tau_L} + \frac{1}{\tau_i}. \quad (1.122)$$

Из этого соотношения следует, что при наличии нескольких механизмов рассеяния результирующее время релаксации определяется из соотношения:

$$\frac{1}{\tau} = \sum \frac{1}{\tau_i}, \quad (1.123)$$

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

Во всех случаях рассмотренных механизмов рассеяния время релаксации может быть выражено в виде:

$$\tau = \tau_0 E^r, \quad (1.124)$$

где показатель степени r имеет различные значения для разных механизмов рассеяния. Например, в случае рассеяния на акустических колебаниях и фононах примеси:

$$\tau_L = \frac{\tau_{0L}}{k_0 T} E^{-1/2}, \quad \tau_i = \tau_{0i} E^{3/2}, \quad (1.124a)$$

т.е. $r = -1/2$ и $3/2$.

Согласно (1.122), эффективное время релаксации при действии обоих механизмов равно

$$\tau = \frac{\tau_{0L} \tau_{0i} E^{3/2}}{\tau_{0L} + \tau_{0i} (k_0 T) E^2}. \quad (1.125)$$

Как видно из (1.125), в случае смешанного механизма рассеяния эффективное время релаксации не является степенной функцией от энергии носителей тока. Для таких процессов кинетические коэффициенты выражаются сложными интегралами.

ГЛАВА 2. КИНЕТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

2.1. Основные особенности проявления кинетических эффектов

Кинетические явления в полупроводниках интересуют как физиков-исследователей физических процессов, так и инженеров для практического применения в различных областях народного хозяйства. Особенность кинетических процессов заключается в их сложности и достоверности по сравнению с равновесными системами.

При изучении кинетических процессов из-за сложного характера условий, от которых они зависят, возникает большое число разнообразных случаев.

Во-первых, велико само число кинетических эффектов. К главным можно отнести электро- и теплопроводность, термоэлектродвижущую силу, гальваномангнитные явления, эффекты Томсона и Пельтье. Кинетические явления лежат в основе фотоэлектрических и фотомангнитных эффектов.

Во-вторых, в ряде случаев приходится иметь дело с несколькими сортами носителей тока (электроны, дырки, тяжелые и легкие дырки).

В-третьих, необходимо учитывать различные механизмы рассеяния носителей тока: колебания атомной решетки, ионизованные и нейтральные примеси, колебания ионной решетки и др.

В-четвертых, электроны проводимости могут находиться в вырожденном и невырожденном состоянии.

Наконец, большое значение имеет характер зависимости энергии электрона (дырки) от волнового вектора \vec{k} , поверхности постоянной энергии могут быть сферами, эллипсоидами, гофрированными поверхностями.

Кроме того, при определенных условиях наблюдается проявление эффекта увлечения электронов проводимости, возникновение «горячих» электронов.

Все это позволяет рассматривать кинетические явления как довольно сложную задачу. Можно несколько ее упростить и рассмотреть кинетические процессы в полупроводниках по следующей схеме:

1. Кинетические явления в атомных невырожденных полупроводниках со смешанной проводимостью и простой энергетической зоной ($E \sim k^2$).

2. Кинетические явления в невырожденных полупроводниках с простой зоной для разных механизмов рассеяния.

3. Основные кинетические явления в полупроводниках со сложной зоной.

4. Эффект «увлечения» носителей тока фононами.

2.2. Определение неравновесной функции распределения для электронов проводимости в случае сферической формы поверхностей постоянной энергии

Для комбинированного описания движения носителей заряда в твердом теле под действием внешних и внутренних полей применим достаточно общий метод кинетического уравнения Больцмана, который описывает изменение состояния частиц в результате действия различных факторов. Запишем уравнение Больцмана с учетом действия внешних и внутренних сил \bar{F} и \bar{F}_q :

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = (\bar{V}, \nabla_r f) + \frac{1}{\hbar} (\bar{F}, \nabla_k f) + \frac{1}{\hbar} (\bar{F}_q, \nabla_k f). \quad (2.1)$$

Это уравнение показывает, что функция распределения f изменяется вследствие движения частиц со скоростью \bar{V} и в результате действия внешних \bar{F} и внутренних \bar{F}_q сил.

Решение уравнения (2.1) в общем виде представляет собой очень сложную задачу, которая значительно упрощается в том случае, когда можно ввести время релаксации.

Предположим, что время релаксации не зависит от внешних полей, тогда уравнение Больцмана будет иметь вид:

$$(\bar{V}, \nabla_r f(\bar{r}, \bar{k})) + \frac{1}{\hbar} (\bar{F}, \nabla_k f(\bar{r}, \bar{k})) = -\frac{f(\bar{r}, \bar{k}) - f_0(\bar{r}, \bar{k})}{\tau(\bar{k})}. \quad (2.2)$$

Это уравнение является основным уравнением, описывающим кинетические явления в стационарном состоянии. Здесь $f_0(\bar{r}, \bar{k})$ есть функция распределения в равновесном состоянии, $f(\bar{r}, \bar{k})$ – в неравновесном состоянии, $\tau(\bar{k})$ – время релаксации, показывающее, насколько быстро восстанавливается нарушенное полями равновесное состояние. Решение уравнения (2.2) будет иметь вид ряда

$$f(\bar{r}, \bar{k}) = f_0(\bar{r}, \bar{k}) + f^{(1)}(\bar{r}, \bar{k}) + f^{(2)}(\bar{r}, \bar{k}) + \dots, \quad (2.3)$$

где $f^{(1)}(\bar{r}, \bar{k}), f^{(2)}(\bar{r}, \bar{k})$ – поправки в первом, втором и т.д. приближении к равновесной функции распределения $f_0(\bar{r}, \bar{k})$. Ограничимся решением в первом приближении. Тогда решение уравнения (2.2) будет иметь вид:

$$f(\bar{r}, \bar{k}) = f_0(\bar{r}, \bar{k}) + f^{(1)}(\bar{r}, \bar{k}). \quad (2.4)$$

Подставим (2.4) в (2.2), получим уравнение для $f^{(1)}(\bar{r}, \bar{k})$:

$$(\bar{V}, \nabla_r f_0(\bar{r}, \bar{k})) + \nabla_r f^{(1)}(\bar{r}, \bar{k}) + \frac{1}{\hbar} ((\bar{F}, \nabla_k f_0(\bar{r}, \bar{k})) + \nabla_k f^{(1)}(\bar{r}, \bar{k})) = -\frac{f^{(1)}(\bar{r}, \bar{k})}{\tau(\bar{k})}. \quad (2.5)$$

Вычислим $\nabla_r f_0(\bar{r}, \bar{k})$ и $\nabla_k f_0(\bar{r}, \bar{k})$, учитывая, что от \bar{r} могут зависеть μ (энергия Ферми) и T , а от \bar{k} зависит E (энергия):

$$\nabla_r f_0(\vec{r}, \vec{k}) = -\frac{e^{\frac{E-\mu}{k_0 T}} \nabla_r \left(\frac{E-\mu}{k_0 T} \right)}{\left[e^{\frac{E-\mu}{k_0 T}} + 1 \right]^2} = -\frac{\partial f_0}{\partial E} \left[\nabla_r \mu + (E-\mu) \frac{\nabla_r T}{T} \right] \quad (2.6)$$

и

$$\nabla_k f_0(\vec{r}, \vec{k}) = -\frac{e^{\frac{E-\mu}{k_0 T}} \nabla_k E}{\left[e^{\frac{E-\mu}{k_0 T}} + 1 \right]^2 k_0 T} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \vec{V}. \quad (2.7)$$

Здесь

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{e^{\frac{E-\mu}{k_0 T}}}{\left[e^{\frac{E-\mu}{k_0 T}} + 1 \right]^2} \frac{1}{k_0 T}, \quad \vec{V} = \frac{\hbar}{m} \vec{k}. \quad (2.8)$$

С учетом (2.7) и (2.6) уравнение (2.5) будет записано:

$$\begin{aligned} -\frac{f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} = & -[\vec{V}, \nabla_r \mu + (E-\mu) \nabla_r \ln T] \frac{\partial f_0}{\partial E} + [\vec{V}, \nabla_r f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k}) - (e\vec{E} + e[\vec{V}, \vec{B}]) \vec{V}] \frac{\partial f_0}{\partial E} - \\ & - \frac{1}{\hbar} (e\vec{E} + e[\vec{V}, \vec{B}]) \nabla_k f^{(1)}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

В этом уравнении подставим вместо \vec{F} выражение для силы Лоренца, действующей на заряд электрона $\vec{F} = -e(\vec{E} + [\vec{V}, \vec{B}])$.

Производные от $f^{(1)}$ имеют порядок малости, сравнимый с $f^{(2)}$, тогда, пренебрегая вторым и четвертым членами (2.9), получим:

$$-\frac{f^{(1)}}{\tau(\vec{k})} = \frac{\partial f_0}{\partial E} (e\vec{E} - \nabla_r \mu - (E-\mu) \nabla_r \ln T) \vec{V}. \quad (2.10)$$

Из уравнения (2.10) видно, что в первом приближении $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$ не зависит от магнитного поля. Чтобы получить зависимость от \vec{B} , необходимо оставить в (2.9) член $e \nabla_k f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$.

Определим $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$ из (2.10) в виде

$$f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial E} (\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k}), \vec{V}), \quad (2.11)$$

где $\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k})$ — неизвестная векторная функция. Из (2.11) и (2.10) следует, что для $\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k})$ можно записать

$$\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k}) = -\tau(\vec{k}) \{ e\vec{E} - \nabla_r \mu - (E-\mu) \nabla_r \ln T \}. \quad (2.12)$$

Учитывая, что $\vec{E} = -\nabla_r \varphi(\vec{r})$, получим

$$\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k}) = -\tau(\vec{k}) \{ \nabla_r (e\varphi - \mu) - (E-\mu) \nabla_r \ln T \}. \quad (2.13)$$

Зная $\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k})$ и учитывая (2.11), можно вычислить $\nabla_k f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$:

$$\nabla_i f^{(0)}(\vec{r}, \vec{k}) = -\frac{d}{dk} \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}} \left(\vec{\chi} \frac{d\mathbf{E}}{\hbar d\vec{k}} \right) \right\} = -\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}} \left(\vec{\chi} \frac{\hbar}{m^*} \right) - \left(\vec{\nabla}, \frac{d}{dk} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}} \vec{\chi} \right). \quad (2.14)$$

Здесь $\frac{1}{m^*} = \frac{d^2 \mathbf{E}}{\hbar^2 dk^2}$ – обобщенный тензор обратной эффективной массы.

Найденное значение (2.14) подставим в (2.9), в котором сохраняется только член, содержащий \vec{B} , затем получим из последнего слагаемого в (2.9)

$$\begin{aligned} \frac{e}{\hbar} (\vec{\nabla}, \vec{B}) \nabla_i f^{(0)}(\vec{r}, \vec{k}) &= -\frac{e}{\hbar} \left(\vec{\nabla}, \vec{B} \right) \left(\vec{\chi} \frac{\hbar}{m^*} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}} - \frac{e}{\hbar} \left(\vec{\nabla}, \vec{B} \right) \left(\vec{\nabla}, \nabla_i \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}} \vec{\chi} \right) = \\ &= e \left(\left[\frac{\vec{\chi}}{m^*}, \vec{B} \right], \vec{\nabla} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Второе слагаемое обращается в нуль, т.к. $[\vec{\nabla}, \vec{\nabla}] = 0$. Следовательно, (2.9) имеет вид

$$-\frac{f^{(0)}(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} = -\frac{1}{\tau(\vec{k})} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}} (\vec{\chi} \vec{\nabla}) = \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{E}} + \left[\vec{\nabla}, e\vec{E} - \nabla_i \vec{F} - (\mathbf{E} - \mu) \nabla_i \ln T + e \left[\frac{\vec{\chi}}{m^*}, \vec{B} \right] \right]. \quad (2.16)$$

Для вектора $\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k})$ получим уравнение

$$\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k}) = -\tau(\vec{k}) \left\{ \nabla_i (\mu + e\varphi) + (\mathbf{E} - \mu) \nabla_i \ln T - e \left[\frac{\vec{\chi}}{m^*}, \vec{B} \right] \right\}. \quad (2.17)$$

Найдем решение (2.17), для чего введем обозначения:

$$\nabla_i (\mu + e\varphi) + (\mathbf{E} - \mu) \nabla_i \ln T = -\vec{L}, \quad (2.18)$$

$$\tau(\vec{k}) \vec{L} = \vec{A}. \quad (2.19)$$

Для приведенных обозначений уравнение (2.17) имеет вид:

$$\vec{\chi} = \vec{A} + e\tau \left[\frac{\vec{\chi}}{m^*}, \vec{B} \right]. \quad (2.20)$$

Решение уравнения (2.20) имеет два различных вида, что определяется эффективной массой. Эффективная масса может быть скалярной или тензорной величиной. Рассмотрим случай, когда эффективная масса является скалярной.

2.3. Эффективная масса – скалярная величина

Если m^* – скалярная величина, тогда можно ввести вектор «кси» – $\vec{\zeta}(\vec{k})$:

$$\vec{\zeta}(\vec{k}) = \frac{e\tau(\vec{k})}{m^*} \vec{B}. \quad (2.21)$$

Тогда выражение (2.20) приобретает вид:

$$\vec{\chi} = \vec{A} + [\vec{\chi} \vec{\zeta}]. \quad (2.22)$$

Умножим (2.22) скалярно на $\vec{\zeta}$:

$$(\vec{\chi} \vec{\zeta}) = (\vec{A} \vec{\zeta}) + (\vec{\chi} \vec{\zeta}) \vec{\zeta} = (\vec{A} \vec{\zeta}), \quad (2.23)$$

так как

$$(\bar{\chi}\bar{\zeta}|\bar{B}) = (\bar{\zeta}\bar{\chi}|\bar{B}) = 0. \quad (2.24)$$

Умножим (2.22) векторно на $\bar{\zeta}$:

$$[\bar{\chi}\bar{\zeta}] = [\bar{A}\bar{\zeta}] + [[\bar{\chi}\bar{\zeta}|\bar{B}]] = [\bar{A}\bar{\zeta}] + \bar{\zeta}(\bar{\chi}\bar{\zeta}) - \bar{\chi}(\bar{\zeta}\bar{\zeta}) = [\bar{A}\bar{\zeta}] + \bar{\zeta}(\bar{A}\bar{\zeta}) - \bar{\chi}\zeta^2 = \bar{\chi} - \bar{A}. \quad (2.25)$$

При написании уравнения (2.25) учтено правило разложения двойного векторного произведения $\bar{A} \times (\bar{B} \times \bar{C}) = \bar{B}(\bar{A}\bar{C}) - \bar{C}(\bar{A}\bar{B})$. Кроме того, произведение $(\bar{\chi}\bar{\zeta})$ и $[\bar{\chi}\bar{\zeta}]$ заменили на $(\bar{A}\bar{\zeta})$ и $\bar{\chi} - \bar{A}$ согласно (2.23) и (2.20). Тогда из (2.25) для $\bar{\chi}$ будем иметь

$$\bar{\chi}(1 + \zeta^2) = \bar{A} + [\bar{A}\bar{\zeta}] + \bar{\zeta}(\bar{A}\bar{\zeta}), \quad (2.26)$$

$$\text{или } \bar{\chi} = \frac{\bar{A} + [\bar{A}\bar{\zeta}] + \bar{\zeta}(\bar{A}\bar{\zeta})}{1 + \zeta^2}. \quad (2.27)$$

Подставляя вместо \bar{A} и $\bar{\zeta}$ их выражения, получим:

$$\bar{\chi}(\bar{r}, \bar{k}) = \frac{-\tau\{\nabla_r(e\varphi + \mu) + (\mathbf{E} - \mu)\nabla_r \ln T\} - \frac{e\tau^2}{m}\{\nabla_r(e\varphi + \mu) + (\mathbf{E} - \mu)\nabla_r \ln T, \bar{B}\}}{1 + \frac{e^2\tau^2}{m}B^2} - \frac{\frac{e^2\tau^2}{m}\bar{B}\{\nabla_r(e\varphi + \mu) + (\mathbf{E} - \mu)\nabla_r \ln T, \bar{B}\}}{1 + \frac{e^2\tau^2}{m}B^2}. \quad (2.28)$$

Эффекты, для которых $\bar{B} \perp \bar{L}$ и зависящие от $f^{(1)}(\bar{r}, \bar{k})$ и, следовательно, от $\bar{\chi}(\bar{r}, \bar{k})$, носят название поперечных; а $\bar{B} \parallel \bar{L}$ — продольных. Для поперечных эффектов $(\bar{L}, \bar{B}) = 0$ и

$$\bar{\chi} = \frac{\bar{A} + [\bar{A}\bar{\zeta}]}{1 + \zeta^2}. \quad (2.29)$$

$$\text{Для продольных эффектов } [\bar{L}, \bar{B}] = 0 \text{ и } \bar{\chi} = \frac{\bar{A} + \zeta(\bar{A}\bar{\zeta})}{1 + \zeta^2} = \frac{\bar{A} + \bar{A}\zeta^2}{1 + \zeta^2} = \bar{A}.$$

Учитывая (2.19) и (2.18), получим для вектора $\bar{\chi}$ значение:

$$\bar{\chi} = -\tau\{\nabla_r(e\varphi + \mu) + (\mathbf{E} - \mu)\nabla_r \ln T\}, \quad (2.30)$$

т.е. в продольном магнитном поле явления протекают так же, как и при $\bar{B} = 0$, если m^* — скалярная величина. В том случае, когда продольные эффекты наблюдаются, это свидетельствует о тензорном характере эффективной массы.

В том случае, когда \bar{m}^* является тензорной величиной, значение $\bar{\chi}$ будет отлично от (2.30).

Пусть \bar{m}^{*-1} имеет диагональный вид, тогда \bar{m}^* также имеет диагональный вид. Умножим скалярно правую и левую части уравнения (2.22) на \bar{m}^{*-1} :

$$\bar{m}^{*-1}\bar{\chi} = \bar{m}^{*-1}\bar{A} + e\bar{m}^{*-1}[\bar{m}^{*-1}\bar{\chi}, \bar{B}] = \bar{m}^{*-1}\bar{A} + \frac{e\tau}{|m^*|}[\bar{\chi}, \bar{m}^*\bar{B}]. \quad (2.31)$$

Умножая (2.31) векторно на \bar{B} , будем иметь:

$$[\bar{m}^{-1} \bar{\chi}, \bar{B}] = [\bar{m}^{-1} \bar{A}, \bar{B}] + \frac{e\tau}{|\bar{m}'|} [[\bar{\chi}, \bar{m}' \bar{B}] \bar{B}]. \quad (2.32)$$

Разложим двойное векторное произведение

$$[[\bar{\chi}, \bar{m}' \bar{B}] \bar{B}] = (\bar{\chi} \bar{B}) \bar{m}' \bar{B} - (\bar{B}, \bar{m}' \bar{B}) \bar{\chi} \quad (2.33)$$

и подставим его в (2.31), получаем:

$$[\bar{m}^{-1} \bar{\chi}, \bar{B}] = [\bar{m}^{-1} \bar{A}, \bar{B}] + \frac{e\tau}{|\bar{m}'|} \bar{m}' \bar{B} (\bar{\chi} \bar{B}) - \frac{e\tau}{|\bar{m}'|} (\bar{B}, \bar{m}' \bar{B}) \bar{\chi}. \quad (2.34)$$

Здесь $|\bar{m}'| = \text{Det} \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 \end{pmatrix} = m_1 m_2 m_3$ — определитель матрицы тензора \bar{m}' .

Из соотношения (2.20) следует, что

$$(\bar{\chi} \bar{B}) = (\bar{A} \bar{B}), \quad (2.35)$$

$$e\tau [\bar{m}^{-1} \bar{\chi}, \bar{B}] = \bar{\chi} - \bar{A}. \quad (2.36)$$

Сравнивая (2.36) и (2.33), будем иметь

$$\bar{\chi} - \bar{A} = e\tau [\bar{m}^{-1} \bar{A}, \bar{B}] + \frac{e^2 \tau^2}{|\bar{m}'|} (\bar{A} \bar{B}) \bar{m}' \cdot \bar{B} - \frac{e^2 \tau^2}{|\bar{m}'|} (\bar{B}, \bar{m}' \bar{B}) \bar{\chi}. \quad (2.37)$$

Отсюда

$$\bar{\chi} = \frac{\bar{A} - e\tau [\bar{m}^{-1} \bar{A}, \bar{B}] + \frac{e^2 \tau^2}{|\bar{m}'|} (\bar{A} \bar{B}) \bar{m}' \cdot \bar{B}}{1 + \frac{e^2 \tau^2}{|\bar{m}'|} (\bar{B}, \bar{m}' \bar{B})}. \quad (2.38)$$

Если эффективная масса — скалярная величина, т.е. диагональные элементы равны m^* , то $\bar{m}' = m^3$, и уравнение (2.38) преобразуется в уравнение (2.27).

Полученные выражения для вектора $\bar{\chi}$ одинаково справедливы как для электронов, так и для дырок.

2.4. Термоэлектрические явления в атомных невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой

При наличии градиента температуры ∇T в полупроводнике возникают явления, получившие название *термоэлектрических*. Наиболее известными и нашедшими практическое применение являются эффект Зеебека — возникновение термоэлектрического напряжения в цепи, состоящей из двух проводников, места соединения которых находятся при различных температурах; эффект Пельтье — выделение или поглощение тепла на контактах двух разнородных полупроводников при прохождении электрического тока; эффект Томсона — выделение или поглощение тепла

в объеме проводника при прохождении электрического тока и наличии градиента температуры.

Рассмотрим теорию термоэлектрических явлений в атомном полупроводнике с простой энергетической зоной. Допустим, что полупроводник однородный. При наличии градиента температуры средняя энергия носителей заряда и их концентрация в полупроводнике будут больше там, где выше температура, в результате чего возникает диффузионный поток носителей заряда, т.е. появляется ток. В разомкнутой цепи в стационарном состоянии плотность тока во всех точках образца равна нулю. В данном случае это возможно благодаря появлению в результате разделения заряда электрического поля, которое приводит в каждой точке полупроводника к возникновению тока, компенсирующего поток носителей, обусловленный градиентом температуры. В образце возникает электродвижущая сила, называемая термоЭДС. Так как электроны и дырки диффундируют в полупроводнике от горячего конца к холодному, то термоЭДС у собственных полупроводников меньше, чем у примесных.

2.4.1. Вывод формулы Писаренко

Определим термоЭДС при наличии градиента температуры ($\nabla T \neq 0$) из кинетического уравнения Больцмана:

$$(\vec{V}, \nabla_z f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{K}, \nabla_z f) = -\frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})} = -\frac{f^{(0)}(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}. \quad (2.39)$$

В случае невырожденного полупроводника равновесная функция распределения для электронов будет равна $f_m = e^{-\frac{E - \mu}{k_0 T}}$ и для дырок $f_{sp} = e^{-\frac{\mu - E'}{k_0 T}} = e^{-\frac{-E' + \mu + \Delta E}{k_0 T}}$. Здесь $\mu' = -\Delta E - \mu$, $E' = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_p^*}$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$.

Принимая поправку к равновесной функции $f^{(0)}(\vec{k})$ малой величиной, в левой части уравнения (2.39) можно заменить f на f_0 . Тогда будем иметь:

$$\nabla_z f \approx \nabla_z f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial T} \nabla T + \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \nabla \mu = \frac{\partial f_0}{\partial E} \left(\frac{\mu - E}{T} \nabla T - \nabla \mu \right), \quad (2.40)$$

$$\nabla_z f \approx \nabla_z f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_z E = \hbar \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{V}. \quad (2.41)$$

Здесь учтены соотношения:

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{1}{k_0 T} e^{-\frac{E - \mu}{k_0 T}} = -\frac{n}{k_0 T N_c} e^{-\frac{E}{k_0 T}}, \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{E - \mu}{k_0 T^2} e^{-\frac{E - \mu}{k_0 T}} = \frac{\mu - E}{T} \frac{\partial f_0}{\partial E}, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mu} = \frac{1}{k_0 T} e^{-\frac{\mu - \epsilon}{k_0 T}} = -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}. \quad (2.44)$$

Подставляя выражения (2.40) и (2.41) в уравнение (2.39) и ограничиваясь случаем, когда действует только электрическое поле $\vec{E} = -\nabla\varphi$, где φ — электростатический потенциал, будем иметь для электронов:

$$\bar{v}_n \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left\{ \frac{\mu - \epsilon}{T} \nabla T - \nabla \mu \right\} + e \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \bar{v}_n \nabla \varphi = -\frac{f^{(0)}(\bar{k})}{\tau_c(\bar{k})}. \quad (2.45)$$

Из уравнения (2.45) можно определить $f_n^{(0)}(\bar{k})$:

$$f_n^{(0)}(\bar{k}) = \tau_c(\bar{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left\{ \frac{\mu - \epsilon}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right\} \bar{v}_n. \quad (2.46)$$

Для дырок:

$$f_p^{(0)}(\bar{k}') = \tau_p \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon'} \left\{ \frac{\epsilon + \mu + \Delta \epsilon}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right\} \bar{v}_p. \quad (2.47)$$

Будем считать, что рассеяние носителей заряда осуществляется при взаимодействии с акустическими колебаниями кристаллической решетки. В этом случае длина свободного пробега $l = V\tau$ не зависит от энергии носителей, и время релаксации можно выразить через l :

$$\tau = \frac{l}{V} = \frac{m_n^* l}{\hbar} k^{-1}. \quad (2.48)$$

Тогда плотность тока для электронов $\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(V_n)} \bar{v}_n f_n^{(0)}(\bar{k}) d^3r$ с учетом (2.43), (2.45) можно выразить в виде

$$\vec{j}_n = \frac{ehl}{3\pi^2 m_n^*} \left\{ \frac{\mu}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right\} \int_0^\infty \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} k^3 dk - \frac{ehl}{3\pi^2 m_n^* T} \nabla T \int_0^\infty \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \epsilon k^3 dk, \quad (2.49)$$

где использовано соотношение $\int F(\bar{k})(\bar{a}\bar{k})\bar{k} d^3k = \frac{4\pi}{3} \bar{a} \int_0^\infty F(k)k^4 dk$.

Введем обозначение $\epsilon = k_0 T \alpha$, где $\alpha = \frac{d\epsilon}{dT}$ — удельная термоЭДС, равная отношению термоЭДС к единичной разности температуры, тогда $k^3 dk = \frac{(2m_n^* k_0 T)^2}{2\hbar^4} \alpha d\alpha$. Учтем выражение $\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -\frac{1}{k_0 T} e^{-\frac{\epsilon - \mu}{k_0 T}} = -\frac{n}{k_0 T n_c} e^{-\frac{\epsilon}{k_0 T}}$ и (2.45) и получим:

$$\vec{j}_n = -\frac{4enl}{3(2\pi m_n^* k_0 T)^{3/2}} \left\{ \frac{\mu}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) - 2k_0 \nabla T \right\}. \quad (2.50)$$

В этом выражении $\frac{4el}{3(2\pi m_n^* k_0 T)^{3/2}} = u_n(T)$ — подвижность электронов.

Тогда

$$\vec{j}_n = nu_n \left\{ \nabla(\mu - e\varphi) + \left(2k_0 - \frac{\mu}{T}\right) \nabla T \right\}, \quad (2.51)$$

для дырок

$$\bar{j}_p = p u_p \left\{ \nabla(\mu - e\varphi) - \left(2k_0 - \frac{\mu + \Delta E}{T} \right) \nabla T \right\}. \quad (2.52)$$

Полная плотность тока будет определена выражением:

$$\bar{j} = n u_n \left\{ \nabla(\mu - e\varphi) + \left(2k_0 - \frac{\mu}{T} \right) \nabla T \right\} + p u_p \left\{ \nabla(\mu - e\varphi) - \left(2k_0 - \frac{\mu + \Delta E}{T} \right) \nabla T \right\}. \quad (2.53)$$

Для нахождения термоЭДС необходимо определить разность потенциалов при разомкнутой цепи. Приравняв $\bar{j} = 0$, из (2.51) получаем равенство:

$$\nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) = - \frac{k_0}{e} \left(2 - \frac{\mu}{k_0 T} \right) \nabla T. \quad (2.54)$$

Удельная термоЭДС α определяется как

$$\alpha = \frac{\left| \nabla \left(\varphi - \frac{\mu}{e} \right) \right|}{|\nabla T|}. \quad (2.55)$$

Для собственного полупроводника удельная термоЭДС определяется соотношением:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{k_0}{2} \frac{1}{n u_n + p u_p} \left\{ n u_n \left(2 - \frac{\mu}{k_0 T} \right) - p u_p \left(2 - \frac{\mu + \Delta E}{k_0 T} \right) \right\} = \\ &= \frac{k_0}{e} \frac{1}{n u_n + p u_p} \left\{ n u_n \left(2 + \ln \frac{2(2\pi m_n^* k_0 T)^{3/2}}{n h^3} \right) - p u_p \left(2 + \ln \frac{2(2\pi m_p^* k_0 T)^{3/2}}{p h^3} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Формула (2.56) впервые была получена Н.Л. Писаренко (1940 г.). В случае электронного полупроводника на горячем конце образца возникает положительный объемный заряд, поскольку электроны диффундируют от горячего конца к холодному. В дырочном полупроводнике, наоборот, на горячем конце возникает отрицательный объемный заряд.

Таким образом, если полупроводник примесной проводимости, то направление внутреннего электрического поля и полярность термоЭДС определяются знаком носителей заряда, что позволяет определить тип примесной проводимости полупроводника.

Для собственного полупроводника $n = p = n_i$, $\mu = -\frac{\Delta E}{2}$ и соотношение (2.56) будет иметь вид:

$$\alpha = \frac{k_0(b-1)}{e(b+1)} \left(2 + \frac{\Delta E}{2k_0 T} \right). \quad (2.57)$$

Здесь $b = \frac{u_n}{u_p}$, $\frac{\Delta E}{2} = \mu$.

Из полученного соотношения (2.57) видно, что величина термоЭДС для собственного полупроводника определяется лишь шириной запрещенной зоны ΔE и соотношением подвижности носителей заряда.

2.5. Гальваномагнитные явления в атомных невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой

Гальваномагнитные явления возникают в полупроводнике при наличии, как электрического поля \vec{E} , так и магнитного поля \vec{H} .

Рассмотрим эффект Холла при условии $\nabla T = 0$, т.е. при изотермическом процессе переноса носителей заряда и при слабом магнитном поле.

Для слабого поля выполняется неравенство:

$$\frac{e\tau B}{m} \approx uB \ll 1. \quad (2.58)$$

где $u = \frac{e\tau}{m}$ — подвижность носителей заряда.

Неравенство (2.58) может быть представлено в более наглядной форме. Учитывая, что $\frac{eB}{m} = \omega_c$ — циклотронная частота, $V\tau = l$ — длина свободного пробега и $\frac{m^*V}{eB} = R$ — радиус круговой орбиты свободного электрона в магнитном поле, получим:

$$\omega_c \tau = \frac{l}{R} \ll 1. \quad (2.58a)$$

Таким образом, магнитное поле считается слабым, если длина свободного пробега электрона l много меньше радиуса его круговой орбиты в магнитном поле.

Запишем выражение для $\bar{\chi}(\vec{r}, \vec{k})$:

$$\bar{\chi}(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{-\tau \left\{ \nabla_r (e\varphi + \mu) + (\mathbf{E} - \mu) \nabla_r \ln T \right\} - \frac{e\tau^2}{m^*} \left\{ \nabla_r (e\varphi + \mu) + (\mathbf{E} - \mu) \nabla_r \ln T, \vec{B} \right\}}{1 + \left(\frac{e\tau}{m^*} B \right)^2} - \frac{\frac{e^2 \tau^2}{m^{*2}} \vec{B} \left\{ \nabla_r (e\varphi + \mu) + (\mathbf{E} - \mu) \nabla_r \ln T, \vec{B} \right\}}{1 + \left(\frac{e\tau}{m^*} B \right)^2}. \quad (2.59)$$

Разложим это выражение при $\nabla T = 0$ в ряд по параметру (2.58) и, ограничиваясь членами первого порядка, получим для $\bar{\chi}_n(E)$ и для $\bar{\chi}_p(E)$:

$$\bar{\chi}_n(E) = -\frac{e\hbar\tau_n}{m_n^*} \left\{ \vec{E} + \frac{e\tau_n}{m_n^*} [\vec{B}, \vec{E}] \right\}, \quad (2.59a)$$

$$\bar{\chi}_p(E) = \frac{e\hbar\tau_p}{m_p^*} \left\{ \vec{E} - \frac{e\tau_p}{m_p^*} [\vec{B}, \vec{E}] \right\}. \quad (2.59b)$$

Здесь $\vec{E} = -\nabla\varphi$.

Слагаемые, пропорциональные \vec{E} , дают электронный и дырочный токи. Слагаемые, пропорциональные \vec{B} , определяют токи, вызванные

силой Лоренца, действующей на электроны и дырки, движущиеся в магнитном поле.

Полная плотность тока:

$$\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int f_n^{(1)}(\vec{k}) \vec{v}_n d^3k + \frac{e}{4\pi^3} \int f_p^{(1)}(\vec{k}) \vec{v}_p d^3k. \quad (2.60)$$

Используя соотношения для $\bar{\chi}_n(E)$ и для $\bar{\chi}_p(E)$ из (2.59) и

$$n = \frac{2(2m_n^* k_0 T)^{3/2}}{\hbar^3} e^{-\frac{\mu}{k_0 T}}, \quad p = \frac{2(2m_p^* k_0 T)^{3/2}}{\hbar^3} e^{-\frac{\mu}{k_0 T}},$$

выражение (2.60) будет иметь вид:

$$\vec{j} = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{ne\hbar^4}{(m_n^* k_0 T)^{3/2}} \int e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^* k_0 T}} (\bar{\chi}_n \vec{k}) \vec{k} d^3k + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{pe\hbar^4}{(m_p^* k_0 T)^{3/2}} \int e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^* k_0 T}} (\bar{\chi}_p \vec{k}) \vec{k} d^3k. \quad (2.61)$$

Воспользуемся соотношением $\int F(k)(\vec{a}\vec{k})\vec{k}d^3k = \frac{4\pi}{3}\vec{a} \int F(k)k^4 dk$ и (2.59а,б),

получим для \vec{j} выражение:

$$\vec{j} = e(nu_n + pu_p)\vec{E} + \frac{3e\pi}{8}(nu_n^2 + pu_p^2)[\vec{B}, \vec{E}]. \quad (2.62)$$

Значения электронного и дырочного тока получены в результате умножения (2.59), (2.59а) на «-е» и «+е», тогда токи, пропорциональные \vec{E} , имеют одинаковые знаки, а токи, пропорциональные $[\vec{B}, \vec{E}]$, — разные знаки. Из (2.62) следует, что при наличии магнитного поля направление тока \vec{j} не совпадает с направлением электрического поля \vec{E} . Ток дырок и электронов отклоняется к одной грани образца.

Пусть ток течет вдоль оси x ($j = j_x$), магнитное поле направлено вдоль оси z ($B = B_z$), тогда из (2.62) будем иметь:

$$j_x = j = e(nu_n + pu_p)E_x - \frac{3\pi e}{8}(nu_n^2 + pu_p^2)BE_y, \quad (2.63)$$

$$j_y = 0 = e(nu_n + pu_p)E_y + \frac{3\pi e}{8}(nu_n^2 + pu_p^2)BE_x. \quad (2.63a)$$

Определим из этих уравнений E_y в случае слабого магнитного поля ($B^2 \ll 1$):

$$E_y = \frac{3\pi}{8e} \frac{pu_p^2 - nu_n^2}{(pu_p - nu_n)^2} jB = R_x jB, \quad (2.64)$$

где постоянная Холла

$$R_x = \frac{3\pi}{8e} \frac{pu_p^2 - nu_n^2}{(pu_p - nu_n)^2}, \quad (2.65)$$

$$\frac{3\pi}{8} = r - \text{показатель рассеяния на тепловых колебаниях решетки.}$$

В случае носителей тока одного знака

$$R_x = \mp \frac{3\pi}{8e} \frac{1}{n}. \quad (2.65a)$$

Знак (-) — для электронов, (+) — для дырок.

$$|R_x|\sigma = \frac{3\pi}{8} u. \quad (2.66)$$

Здесь σ – электропроводность.

Из (2.66) можно определить подвижность носителей заряда в примесном полупроводнике.

2.6. Магнитосопротивление в полупроводниках

Изменение сопротивления полупроводника в магнитном поле называется магнитосопротивлением. При отсутствии магнитного поля в полупроводнике в случае совпадения направления тока \vec{j} с направлением электрического поля удельное сопротивление

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{\bar{E}}{\vec{j}}. \quad (2.67)$$

При действии магнитного поля, когда \bar{E} не совпадает с направлением \vec{j} , в формуле (2.67) следует вместо \bar{E} подставить проекцию \bar{E} на \vec{j} , т.е. E_j . Тогда

$$\rho_s = \frac{\bar{E}_j}{j} = \frac{(\bar{E} \vec{j})}{j^2}. \quad (2.68)$$

Используя выражение для электропроводности σ и постоянной Холла R , запишем (2.62) в виде

$$\vec{j} = \sigma \bar{E} - R \sigma^2 [\bar{B} \bar{E}]. \quad (2.69)$$

Так как $(\bar{E} [\bar{B}, \bar{E}]) = 0$, то в линейном приближении по магнитному полю

$$j^2 = (\sigma E)^2. \quad (2.70)$$

Из (2.67), (2.69), (2.70) определим

$$\rho_s = \frac{\sigma E^2}{(\sigma E)^2} = \frac{1}{\sigma} = \rho. \quad (2.71)$$

Из этого соотношения видно, что в линейном приближении по магнитному полю сопротивление полупроводника не меняется. Следовательно, для определения изменения сопротивления полупроводника в магнитном поле необходимо определить ток во втором приближении по магнитному полю, т.е. с точностью до B^2 .

Рассмотрим полупроводник с одним сортом носителей, например, электронами. Разлагая векторную функцию $\bar{\chi}_n$ в ряд по степеням \bar{B} с точностью до членов порядка B^2 , получим (индекс «n» опускаем)

$$\begin{aligned} \bar{\chi} &= -\frac{e\hbar\tau}{m} \left\{ \bar{E} + \frac{e\tau}{m} [\bar{B}, \bar{E}] + \left(\frac{e\tau}{m} \right)^2 \left((\bar{B}, \bar{E}) \bar{B} - B^2 \bar{E} \right) \right\} = \\ &= -\frac{e\hbar\tau}{m} \left\{ \bar{E} + \frac{e\tau}{m} [\bar{B}, \bar{E}] + \left(\frac{e\tau}{m} \right)^2 [\bar{B}, [\bar{B}, \bar{E}]] \right\}. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Здесь использовано разложение двойного векторного произведения и учтено, что $\left(\frac{e\tau\bar{B}}{m}\right)^2 \ll 1$ — слабое магнитное поле.

Соотношение (2.72) содержит три слагаемых, пропорциональных τ , τ^2 и τ^3 . Зная τ , легко определить плотность тока с точностью до членов порядка B^2 :

$$\vec{j} = \sigma \left\{ \bar{E} + \frac{3\pi}{8} u [\bar{B}, \bar{E}] + \frac{9\pi}{16} u^2 [\bar{B}, [\bar{B}, \bar{E}]] \right\}. \quad (2.73)$$

Здесь подвижность заряда $u = \frac{4e\ell}{3\sqrt{2\pi m^* k_0 T}} = \frac{4}{3\sqrt{2\pi}} \frac{e\hbar}{m^*} \frac{\tau_{00}}{\sqrt{k_0 T}}$,

$$\tau_{00} = \frac{9\pi}{4} \frac{M V_0^2 \hbar^3}{\alpha^2 C^2 m^* k_0 T}.$$

Решим это векторное уравнение относительно \bar{E} , используя следующий метод. Разложим неизвестный вектор \bar{E} по трем некомпланарным направлениям \vec{j} , $[\bar{B}, \vec{j}]$ и \bar{B} :

$$\bar{E} = \alpha \vec{j} + \beta [\bar{B}, \vec{j}] + \gamma \bar{B}, \quad (2.74)$$

где α , β и γ — неизвестные скалярные множители.

Подставим (2.74) в (2.73) и, сравнив коэффициенты при векторах \vec{j} , $[\bar{B}, \vec{j}]$ и \bar{B} , получим три уравнения, из которых легко определяются α , β и γ .

С точностью до членов порядка B^2 получим выражение:

$$\bar{E} = \frac{1}{\sigma} \left\{ \left[1 + \frac{9\pi}{16} u^2 \left(1 - \frac{\pi}{4} \right) B^2 \right] \vec{j} - \frac{9\pi}{16} \left(1 - \frac{\pi}{4} \right) u^2 (\vec{j}\bar{B}) \bar{B} - \frac{3\pi}{8} u [\bar{B}, \vec{j}] \right\}. \quad (2.75)$$

Подставим это выражением в (2.68), получим:

$$\frac{\rho_a - \rho}{\rho} = \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{9\pi}{16} \left(1 - \frac{\pi}{4} \right) u^2 \left[B^2 - \frac{(\vec{j}\bar{B})^2}{j^2} \right] = \frac{9\pi}{16} \left(1 - \frac{\pi}{4} \right) (uB)^2 \sin^2 \alpha, \quad (2.76)$$

где α — угол между направлением магнитного поля \bar{B} и тока \vec{j} . Это следует из соотношения: $(\vec{j}\bar{B})^2 = j^2 B^2 \cos^2 \alpha$. Отсюда можно сделать вывод, что сопротивление в магнитном поле не уменьшается. В случае, если \bar{B} параллельно \vec{j} , то $\sin \alpha = 0$ и $\frac{\Delta\rho}{\rho} = 0$. Аналогично может быть вычислено магнитосопротивление полупроводника со смешанной проводимостью.

2.7. Эффект Холла и магнитосопротивление в сильных магнитных полях

Для сильного магнитного поля имеет место неравенство

$$\frac{e\tau B}{m^*} = \omega_c \tau \approx uB \gg 1. \quad (2.77)$$

ЭДС Холла и магнитосопротивление можно найти посредством разложения векторной функции $\vec{\chi}$ по малому параметру

$$\eta = \frac{m^*}{e\tau B} \ll 1. \quad (2.77a)$$

Рассмотрим случай, когда имеются носители тока только одного знака (электроны). Сохраняя в числителе и знаменателе выражения для $\bar{\chi}_s$ (2.59) слагаемые с наивысшей (квадратичной) степенью \bar{B} , получим:

$$\bar{\chi}(E) = -\frac{e\hbar\tau}{m^*} \frac{(\bar{B}\bar{E})\bar{B}}{B^2} = -\frac{e\hbar\tau}{m^*} (\bar{e}_s\bar{E})\bar{e}_s = -\frac{e\hbar\tau}{m^*} \bar{E}_s, \quad (2.78)$$

где $\bar{e}_s = \frac{\bar{B}}{B}$ — единичный вектор в направлении магнитного поля, а \bar{E}_s — составляющая напряженности электрического поля в направлении магнитного поля.

Выражение (2.78) отличается от того, которое имеет место при наличии одного электрического поля: вместо полного вектора напряженности поля \bar{E} стоит его составляющая \bar{E}_s , поэтому ток

$$\bar{j} = en\mu\bar{E}_s. \quad (2.79)$$

При \bar{B} , перпендикулярном к \bar{E} , ток (2.77) равен нулю, т.к. \bar{E}_s направлена вдоль поля \bar{B} .

Разложим функцию $\bar{\chi}$, представленную формулой (2.68), в ряд по параметру η , ограничиваясь членами порядка η^2 , тогда

$$\bar{\chi}(E) = -\frac{e\hbar\tau}{m^*} \left\{ (\bar{e}_s\bar{E})\bar{e}_s + [\bar{e}_s\bar{E}]\eta + [\bar{E} - (\bar{e}_s\bar{E})\bar{e}_s]\eta^2 \right\}. \quad (2.80)$$

Здесь разность

$$\bar{E} - (\bar{e}_s\bar{E})\bar{e}_s = \bar{E} - \bar{E}_s = \bar{E}_\perp, \quad (2.80a)$$

где \bar{E}_\perp — составляющая электрического поля, перпендикулярная к магнитному полю. Здесь учтено правило сложения векторов $\bar{E} = \bar{E}_s + \bar{E}_\perp$.

В результате

$$\bar{\chi} = -\frac{e\hbar\tau}{m^*} \bar{E}_s - \frac{\hbar}{B} [\bar{e}_s\bar{E}] - \frac{\hbar m^*}{e\tau B^2} \bar{E}_\perp. \quad (2.80b)$$

Подставляя это значение $\bar{\chi}$ в выражение

$$\bar{j} = -e \int f^{(0)} \bar{V} d^3k = e \int \frac{\partial f_0}{\partial E} (\bar{\chi}\bar{k}) \frac{\hbar\bar{k}}{m^*} d^3k, \quad (2.81)$$

получим

$$\bar{j} = en\mu\bar{E}_s + \frac{en}{B} [\bar{e}_s\bar{B}] + \frac{32}{9\pi} \frac{en}{uB^2} \bar{E}_\perp. \quad (2.82)$$

Первое слагаемое правой части есть ток нулевого приближения по $1/B$. Второе слагаемое порядка $1/B$ дает ток, не зависящий от механизма рассеяния, перпендикулярный к \bar{E} и \bar{B} . Этот ток может быть вычислен без кинетического уравнения из рассмотрения динамики движения электрона в скрещенных электрическом и магнитном полях. Третье

слагаемое $\frac{1}{B}$ дает ток, зависящий от механизма рассеяния в направлении составляющей \bar{E} , перпендикулярной к магнитному полю.

Определим из (2.82) постоянную Холла и магнитосопротивление. Направим ток \bar{j} по оси x , магнитное поле \bar{B} по оси z и спроектируем уравнение (2.82) на оси x и y :

$$\begin{cases} j_x = j = -\frac{en}{B} E_y + \frac{32}{9\pi} \frac{en}{uB^2} E_x, \\ j_y = 0 = -\frac{en}{B} E_x + \frac{32}{9\pi} \frac{en}{uB^2} E_y. \end{cases} \quad (2.83)$$

Решая эту систему уравнений с точностью до $\frac{1}{B^2}$ относительно E_x и E_y и соотношения для постоянной Холла $E_y = R_x j$ и магнитосопротивления

$\rho_s = \frac{E_x}{j}$, найдем выражение для этих величин в сильных магнитных полях:

$$R_x = -\frac{1}{en}, \quad (2.84)$$

$$\rho_s = \frac{(\bar{E} \bar{j})}{j^2} = \frac{32}{9\pi} \frac{1}{enu} = \frac{32}{9\pi} \rho, \quad (2.85)$$

или

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{32}{9\pi} - 1 = 0,13. \quad (2.85a)$$

Таким образом, в сильных магнитных полях R_x не зависит от механизма рассеяния, а магнитосопротивление достигает насыщения, соответствующего увеличению относительного сопротивления на 13%.

Было показано, что при наличии электронов и дырок критерий сильного поля имеет вид (при $n = p$):

$$(u_n + u_p)B \gg \frac{n}{|n-p|}. \quad (2.86)$$

Плотность тока будет выражена соотношением

$$j = e(nu_n + pu_p)\bar{E}_s + \frac{e}{B}(n-p)[\bar{e}_s \bar{E}] + \frac{32}{9\pi} \frac{e}{B^2} \left(\frac{n}{u_n} + \frac{p}{u_p} \right) \bar{E}_\perp. \quad (2.87)$$

Это выражение следует из разложения функции $\bar{\chi}$ по аргументу $\frac{1}{B}$ и сравнения результата с (2.80б). Из (2.87) можно определить $R = \frac{1}{e(p-n)}$,

$\rho_s = \frac{32}{9\pi} \frac{u_n + u_p}{e(p-n)^2}$. Эти выражения переходят в (2.84), (2.85) при одном знаке носителей тока.

2.8. Кинетические явления в сильных электрических полях

В работах американского физика У. Шокли было показано, что в сильных электрических полях подвижность носителей заряда в чистых полупроводниках Ge и Si уменьшается. Кроме того, в таких полях возникают новые явления, которые не проявлялись в слабых электрических полях, — это анизотропия электропроводности, отрицательное сопротивление, возникновение ЭДС при наличии градиента напряженности электрического поля. Сильные электрические поля — те, где происходит нарушение закона Ома

$$\vec{j} = \sigma_0 \vec{E}, \quad (2.88)$$

где σ_0 — проводимость в слабом поле.

В электрическом поле напряженности \vec{E} электрон на длине свободного пробега приобретает энергию, равную $e\vec{E}$.

При столкновении с акустическим фононом электрон передает эту энергию решетке, приходя в тепловое равновесие с ней. Но в результате столкновения с фононом электрон может и получить энергию от фонона. Пусть при этом изменение энергии электрона будет ΔE .

Если из общего числа столкновений подсчитать число столкновений, идущих с передачей энергии фонону, то

$$\Delta E = \hbar\omega_0 \frac{W^-(k, k') - W^+(k, k')}{W^-(k, k') + W^+(k, k')} = \hbar\omega_0 \frac{(N_q + 1) - N_q}{(N_q + 1) + N_q} = \hbar\omega_0 \frac{1}{2N_q + 1} = \hbar\omega_0 th \frac{\hbar\omega_0}{2k_0 T}.$$

На одно столкновение, сопровождающееся передачей энергии фонону, приходится $(2N_q + 1)$ столкновений. Относительная потеря энергии электрона при столкновении составляет величину:

$$\delta = \frac{\Delta E}{k_0 T} = \frac{\hbar\omega_0}{k_0 T} \frac{1}{2N_q + 1} = \frac{\hbar\omega_0}{k_0 T} th \frac{\hbar\omega_0}{2k_0 T}. \quad (2.89)$$

Тогда изменение энергии электрона при столкновении с фононом можно представить соотношением $\Delta E = k_0 T \delta$. Если $\frac{e\vec{E}}{\Delta E} \ll 1$, то столкновение упругое. Следовательно, закон Ома выполняется в том случае, когда

$$e\vec{E} \ll k_0 T \delta \quad \text{или} \quad \vec{E} \ll \delta \frac{k_0 T}{e}. \quad (2.90)$$

Тогда скорость дрейфа носителей заряда V значительно меньше их тепловой скорости V_0 , т.е. $V \ll V_0$.

В сильных электрических полях проявляется нарушение закона Ома, изменяется концентрация носителей заряда. Это изменение связано с ударной ионизацией. Рассмотрим электропроводность в сильном электрическом поле. В таком поле с ростом энергии носителей заряда увеличивается их скорость, а значит, уменьшается время свободного пробега и, следовательно, увеличивается вероятность рассеяния носителей

заряда на тепловых колебаниях решетки. Этот процесс продолжается до тех пор, пока электрон-фононное взаимодействие не усилится и не установится стационарное состояние, т.е. энергия, приобретаемая за единицу времени $e\bar{E}V$, сравнивается с энергией, теряемой носителем в результате столкновения

$$\frac{\Delta E}{\tau} = \frac{k_0 T \delta}{\tau}, \text{ т.е. } e\bar{E}V = \delta \frac{k_0 T}{\tau}. \quad (2.91)$$

При рассеянии на тепловых колебаниях решетки длина свободного пробега l не зависит от энергии, поэтому время свободного пробега $\tau = l/V_0$.

Дрейфовая скорость носителей заряда из (2.91)

$$V = \frac{\partial k_0 T}{e E \tau} = \frac{\partial k_0 T V_0}{e l \bar{E}}. \quad (2.92)$$

В то же время дрейфовая скорость

$$V = \frac{e}{m^*} \bar{E} = \frac{e l}{m^* V_0} \bar{E}. \quad (2.93)$$

Из (2.92) и (2.93) следует

$$(e l \bar{E})^2 = 2 \partial k_0 T \frac{m^* V_0^2}{2}. \quad (2.94)$$

Но $\frac{1}{2} m^* V_0^2 = k_0 T$, тогда из (2.94) определим

$$\bar{E}_{sp} = \frac{k_0 T}{e l} (2 \delta)^{1/2}. \quad (2.95)$$

При этом поле начинается разогрев электронно-дырочного газа. С уменьшением температуры, как следует из (2.95), величина критического поля уменьшается. На рис. 2.1 представлена зависимость плотности тока от напряженности электрического поля в электронном германии при различных температурах.

Из соотношения (2.92) и (2.95) будем иметь

$$V = \left(\frac{\delta}{2} \right)^{1/2} V_0. \quad (2.96)$$

Отсюда следует, что разогрев электронно-дырочного газа имеет место, когда дополнительная скорость, приобретенная носителем заряда в электрическом поле, становится сравнимой с его тепловой скоростью.

Энергию носителей заряда можно определить из (2.94):

$$\left(\frac{m^* V_0^2}{2} \right)^2 = \frac{(e l \bar{E})^2}{2 \delta}, \quad (2.97)$$

откуда

$$V_0 = \left[\frac{2 e l \bar{E}}{m^* (2 \delta)^{1/2}} \right]^{1/2}. \quad (2.98)$$

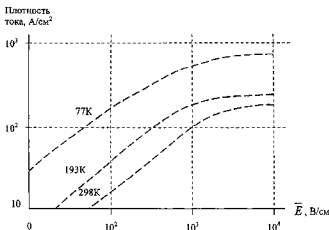


Рис. 2.1. Зависимость плотности тока от напряженности электрического поля в электронном германии

Подставляя (2.98) в (2.96), будем иметь:

$$V = \left(\frac{\delta}{2}\right)^{1/2} \left[\frac{2el\bar{E}}{m^*(2\delta)^{1/2}} \right]^{1/2} = \left[\frac{el}{m^*} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{1/2} \right]^{1/2} \bar{E}^{1/2}. \quad (2.99)$$

Таким образом, в сильных электрических полях, когда напряженность электрического поля больше критического, т.е.

$$\bar{E} > \bar{E}_\varphi \text{ или } \bar{E} > \frac{k_0 T}{el} (2\delta)^{1/2}, \quad (2.100)$$

дрейфовая скорость движения носителей заряда будет увеличиваться как $V \sim \bar{E}^{1/2}$, а время релаксации будет уменьшаться

$$\tau = \frac{l}{V_0 + V} \sim \bar{E}^{-1/2}. \quad (2.101)$$

Подвижность носителей заряда

$$u = \frac{e\tau}{m^*} = u_0 \bar{E}^{-1/2}, \text{ а} \quad (2.102)$$

$$\sigma = eu_n n = \sigma_0 \bar{E}^{-1/2}. \quad (2.103)$$

$$j = \sigma \bar{E} = \frac{\sigma_0}{\bar{E}^{1/2}}, \text{ т.е. при электрических полях } \bar{E} > \bar{E}_\varphi \text{ закон Ома}$$

не выполняется.

В германии отклонения от омической проводимости при комнатной температуре наблюдаются при напряженности поля около 700 В/см (рис. 2.2). При полях $\bar{E} > \bar{E}_\varphi$ ток и скорость не зависят от поля.

В очень сильных полях, когда энергия электрона $E \gg \hbar\omega_0$, вместо уменьшения подвижности и насыщения дрейфовой скорости имеет место

быстрый их рост, энергия носителей заряда увеличивается. Это явление получило название «убегания» носителей заряда.

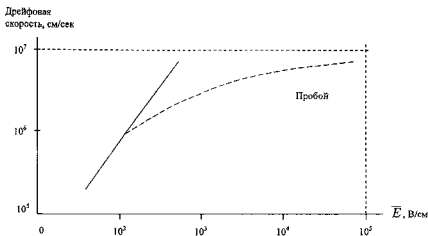


Рис. 2.2. Зависимость дрейфовой скорости в n-Ge от напряженности электрического поля. Прямая соответствует постоянной подвижности

$$\mu_n = 3800 \frac{\text{см}^2}{\text{Вс}}$$

2.9. Горячие электроны

С ростом электрического поля в полупроводнике энергетическое распределение электрона (дырок) относительно равновесного распределения при зонной температуре наблюдается в сторону больших значений энергий. На рис. 2.3 представлено распределение электронов по энергиям. Оно зависит от напряженности постоянного электрического поля \bar{E} , подвижности носителей заряда и скорости передачи энергии фононам. Эта скорость характеризуется временем τ_e релаксации энергии (то время, в течение которого после выключения электрического поля горячие электроны «остывают»). Время τ_e определяет также инерционность процесса разогрева электронов в переменном электрическом поле.

Когда к образцу прикладывается электрическое поле, носители заряда начинают приобретать энергию со скоростью $e\mu\bar{E}^2$, где \bar{E} — напряженность поля, μ — подвижность носителей заряда. Их средняя энергия, а также и средняя скорость эмиссии фононов возрастают, что проявляется в виде джоулева нагрева.

Функция
распределения

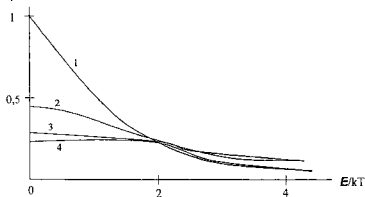


Рис. 2.3. Распределение электронов по энергиям:

1 – равновесная функция распределения (больцмановская), ее значение принято равным 1 при E/kT ; 2 – распределение при рассеянии электронов на длинноволновых акустических фоновых в электрическом поле $\bar{E} = \bar{E}_p$.

Здесь \bar{E}_p – характерная напряженность поля, при которой эффекты разогрева становятся значительными, и равна $\bar{E}_p = \left[\frac{kT}{e} \right]^{1/2} \cdot u_T$;

3 – в электрическом поле $\bar{E} = 2\bar{E}_p$; 4 – в электрическом поле $\bar{E} = 3\bar{E}_p$

Стационарное состояние достигается тогда, когда средняя мощность потерь $\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle$ сравнивается с мощностью, приобретаемой от тока

$$e n \bar{E}^2 = \left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle. \quad (2.104)$$

В слабых электрических полях это приводит лишь к малому изменению равновесной функции распределения. Для таких полей можно записать

$$f = f_0(\bar{E}, T) + f_1, \quad f_1 \ll f_0. \quad (2.105)$$

Здесь $f_0(\bar{E}, T)$ – функция распределения Максвелла-Больцмана с температурой, равной решеточной. Точный вид f_1 зависит от структуры зоны и механизмов рассеяния.

Диапазон полей, называемый диапазоном «теплых» электронов, в котором f_0 только начинает отклоняться от распределения Максвелла-Больцмана с температурой решетки, представляет значительный экспериментальный и теоретический интерес. Если разложить f_0 в этом диапазоне по степеням \bar{E} , то можно ограничиться членами порядка \bar{E}^2 . Таким образом, для диапазона «теплых» электронов f_0 можно записать в виде:

$$f_0(E, \bar{E}) = A_0 \left[1 + \bar{E}^{-1} \zeta(E) \right] \cdot e^{-\frac{E}{k_0 T}}, \quad (2.106)$$

где A_0 – постоянная нормировка, зависящая от E , $\zeta(E)$ – функция, которая зависит от механизма рассеяния и от решеточной температуры. Точное выражение для $\zeta(E)$ получить не удастся. Приближенное значение можно получить, если разложить ζ в ряд по E или $x = \frac{E}{k_0 T}$, т.е.

$$\zeta = \sum_{x=0}^{\infty} b_x x^x, \quad (2.107)$$

где b_x – подгоночные параметры.

Основной эффект, в котором проявляется разогрев носителей заряда в полупроводниках с ростом электрического поля, – это изменение электропроводности и отклонение вольтамперной характеристики от линейной. Электропроводность может изменяться с полем из-за зависимости подвижности горячих электронов и их концентрации от поля. При рассеянии горячих носителей на заряженной примеси подвижность увеличивается с полем, а при рассеянии на фононах – падает. Кроме того, горячие электроны, приобретая достаточно большую энергию, переходят в более высокие долины зоны проводимости, в которых их подвижность меньше. Концентрация носителей заряда в электрическом поле изменяется из-за ударной генерации электронно-дырочных пар или ударной ионизации примесных атомов, а также из-за изменения скорости рекомбинации носителей заряда или скорости их захвата примесными центрами.

Обычно захват электронов происходит положительными ионами. При этом скорость захвата падает с ростом электрического поля (разогрева), и концентрация электропроводности растет. Если же примесные центры заряжены отрицательно, то электрон, чтобы оказаться захваченным, должен преодолеть энергетический барьер. Поэтому с ростом электрического поля и увеличением энергии горячих электронов скорость захвата электронов растет, и концентрация их падает. При достаточно быстром падении электропроводности с ростом электрического поля на ВАХ появляется падающий участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением. ВАХ имеет N -образный вид (наблюдается эффект Ганна).

В тех же случаях, когда электропроводность растет с увеличением поля, ВАХ может стать S -образной. При этом возникает шнурование тока в полупроводниках, и с ростом напряжения возможен пробой – межзонный или примесный.

2.10. Полупроводники со сферической нестандартной зоной

Ранее были рассмотрены кинетические явления в полупроводниках с простейшей формой энергетической зоны: минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны Бриллюэна $\vec{k} = 0$, зависимость энергии $E(\vec{k})$ от волнового вектора вблизи экстремумов параболична, а, следовательно, изоэнергетическая поверхность около точки $\vec{k} = 0$ имеет сферическую форму. Такая модель носит название «стандартная зона» (рис. 2.4).

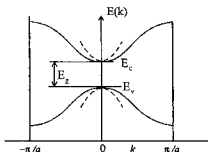


Рис. 2.4. Схема стандартной или параболической зоны в полупроводниках

Для стандартной зоны вблизи минимума зоны проводимости $m_1 = m_2 = m_3 = m_n > 0$,

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}.$$

Однако экспериментальные исследования физических свойств полупроводников показали, что в реальных полупроводниках стандартная форма не наблюдается, структура зоны имеет более сложный характер.

Исследования эффекта магнитосопротивления в германии (Ge) и кремнии (Si) показали, что минимум зоны проводимости не лежит в центре зоны Бриллюэна. У кремния имеется шесть симметрично расположенных минимумов энергии в точках \vec{k}_0 , лежащих на осях типа $[100]$, у германия – восемь эквивалентных минимумов, расположенных вдоль направления $[111]$ на границе первой зоны Бриллюэна. Таким образом, электроны в зоне проводимости Ge и Si распределены по энергетически эквивалентным доменам в \vec{k} -пространстве. Такая модель носит название «многодоменной» или модели «со многими минимумами энергии».

Структуру зон можно представить графически в двухмерном пространстве в виде функции энергий от \vec{k} для различных направлений в пространстве обратной решетки (см. рис. 2.5 и 2.6 для германия и кремния).

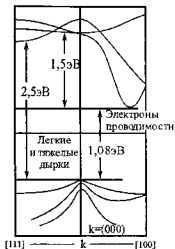


Рис. 2.5. Зависимость E от \vec{k} в зоне проводимости и в валентной зоне кремния для ориентации [100] и [111] в приведенной зоне

Максимум энергии в валентных зонах германия и кремния лежит в центре зоны Бриллюэна в точке $\vec{k} = 0$. В этой точке соприкасаются три валентные зоны, одна из которых при учете спин-орбитального взаимодействия отщепляется на величину Δ , где Δ – величина спин-орбитального расщепления. В оставшихся двукратно вырожденных зонах закон дисперсии около точки $\vec{k} = 0$ имеет сложный вид.

Рассмотрим модель зон полупроводников типа InSb. Эксперименты показывают, что в антимониде индия зона проводимости сферически симметрична и минимум ее находится в центре зоны Бриллюэна в точке $\vec{k} = 0$. Вблизи минимума кривизна зоны очень велика, вследствие чего значения эффективной массы электронов, находящихся на дне этой зоны, очень малы. Однако зона непараболична, и кривизна быстро уменьшается с увеличением энергии, т.е. эффективная зона растет с энергией.

Как видно из рис. 2.6, валентная зона InSb сходна с валентной зоной германия. При $\vec{k} = 0$ имеются зона тяжелых дырок, вырожденная зоной легких дырок, и зона, обусловленная спин-орбитальным взаимодействием. Однако максимумы зоны тяжелых дырок несколько смещены от центра зоны Бриллюэна в направлении [111].

С учетом взаимодействия зоны проводимости с валентными зонами в InSb, Д. Кэйном¹ было показано, что различные энергетические зоны описываются следующим уравнением:

$$E'(E' + E_g)(E' + E_g + \Delta) - k^2 P^2 (E' + E_g + \frac{2}{3} \Delta) = 0, \quad (2.108)$$

¹ Kane D. // Phys. Chem. Solids. 1957. № 1. P. 249.

где E_g – ширина запрещенной зоны при $\vec{k} = 0$, Δ – спин-орбитальное расщепление,

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = E - E_0, \quad (2.109)$$

P – постоянная, учитывающая связь между зоной проводимости и валентной зоной, которая определяется следующим образом:

$$P = -i \left(\frac{\hbar}{m_0} \right) \langle s | P_x | z \rangle. \quad (2.110)$$

Здесь s и z – волновые функции s и p симметрии, P_x – компонента импульса электрона.

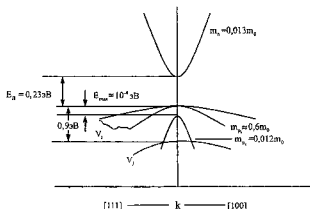


Рис. 2.6. Зонная структура InSb вблизи $k = 0$

Если спин-орбитальное расщепление Δ велико по сравнению с шириной запрещенной зоны E_g , в (2.108) в скобках рядом с Δ можно отбросить E' и E_g , так как энергия электрона тоже имеет порядок E_g . В этом случае полученное уравнение относительно $(E - E_g)$ легко решается.

Если оставить только корень соответствующей зоны проводимости (при $\vec{k} = 0$, $E = 0$), то получим

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{E_g}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}} - 1 \right). \quad (2.111)$$

Эта формула представляет собой закон дисперсии для нестандартной зоны проводимости в двухзонном приближении модели Кэйна. Из этой нестандартной зоны легко получить стандартную зону, если предположить, что $E_g \gg kP$, т.е. если ограничиться малыми k . Тогда, разлагая подкоренное выражение в (2.111), имеем:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{2P^2 k^2}{3E_g} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}, \quad (2.112)$$

$$\text{где } \frac{1}{m_n} = \frac{1}{m_0} + \frac{4p^2}{3\hbar^2 E_g} \quad (2.113)$$

определяет эффективную массу для стандартной зоны.

Следовательно, в двухзонном приближении константу связи зон P можно определить, зная эффективную массу электрона проводимости на дне зоны m_n и ширину запрещенной зоны E_g . Экспериментальные данные показали, что эффективная масса электрона на дне зоны проводимости в InSb намного меньше массы свободного электрона, $m_n = 0,013m_0$, поэтому в (2.113) $1/m_0$ можно пренебречь, и тогда будем иметь

$$p^2 = \frac{3\hbar^2 E_g}{4m_n}. \quad (2.114)$$

Из (2.111) и (2.114) для закона дисперсии нестандартной зоны в двухзонном приближении имеем ($m_0 \gg m_n$):

$$E = \frac{E_g}{2} \left[\left(1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{m_n E_g} \right)^{1/2} - 1 \right]. \quad (2.115)$$

Разложим это соотношение по параметру $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_n E_g} \ll 1$ и оставим члены, пропорциональные k^4 , тогда получим малую добавку к стандартному закону дисперсии

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} (1 - \alpha k^2), \quad (2.116)$$

где $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_n E_g}$ характеризует отклонение зоны от параболичности.

Таким образом, параболический закон дисперсии $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ имеет место в том случае, когда ширина запрещенной зоны E_g намного больше характерной энергии электрона проводимости $k_0 T$. Для InSb наблюдается отклонение от параболичности. Эффективная масса зависит от концентрации электронов проводимости. С заполнением зоны эффективная масса электронов растет.

Для существенной нестандартности применимо соотношение (2.115), которое с достаточной точностью хорошо описывает зоны проводимости всех соединений типа $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$, $A^{\text{II}}B^{\text{VI}}$ (например, HgTe).

РЕКОМЕНДУЕМЫЙ БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.;Л.: Физматгиз, 1962.
2. Аскеров Б.М. Кинетические эффекты в полупроводниках. Л.: Наука, 1970.
3. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1966.
5. Зеегер К. Физика полупроводников. М.: Высшая школа, 1969.
6. Конуэлл Э. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях. М.: Мир, 1970.
7. Киреев П.С. Физика полупроводников. М.: Высшая школа, 1969.
8. Киттель Г. Введение в физику твердого тела. М.: Физматгиз, 1962.
9. Смит Р. Полупроводники. М.: Мир, 1982.
10. Шалимова К.В. Физика полупроводников. М.: Энергия, 1976.
11. Френк Дж. Блотт. Теория подвижности электронов в твердых телах. М.; Л.: Физматгиз, 1963.
12. Харрисон У. Теория твердого тела. М.: Мир, 1972.
13. Гонтмахер Вф., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М.: Наука, 1984.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Принятые обозначения	4
Глава 1. Основы кинетических явлений в полупроводниках	5
1.1. Функция распределения носителей заряда	5
1.2. Уравнение Больцмана	6
1.3. Вывод формулы Конуэлл-Вайскопфа	12
1.4. Кинетическое уравнение для электронов в кристалле	16
1.5. Рассеяние электронов на колебаниях решетки в атомном кристалле	21
1.6. Рассеяние электронов проводимости в ионных кристаллах ...	26
1.7. Определение времени релаксации электронов проводимости в ионном кристалле	28
1.8. Теория деформационного потенциала в кубических кристаллах с простой зонной структурой	31
1.9. Определение вероятности перехода электрона при рассеянии	33
1.10. Определение времени релаксации в случае действия нескольких механизмов рассеяния	34
Глава 2. Кинетические эффекты в полупроводниках	37
2.1. Основные особенности проявления кинетических эффектов	37
2.2. Определение неравновесной функции распределения для электронов проводимости в случае сферической формы поверхностей постоянной энергии	38
2.3. Эффективная масса – скалярная величина	40
2.4. Термоэлектрические явления в атомных невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой	42
2.5. Гальваномагнитные явления в атомных невырожденных полупроводниках с простой зонной структурой	46
2.6. Магнитосопротивление в полупроводниках	48
2.7. Эффект Холла и магнитосопротивление в сильных магнитных полях	49
2.8. Кинетические явления в сильных электрических полях	50
2.9. Горячие электроны	55
2.10. Полупроводники со сферической нестандартной зоной	58
Рекомендуемый библиографический список	61