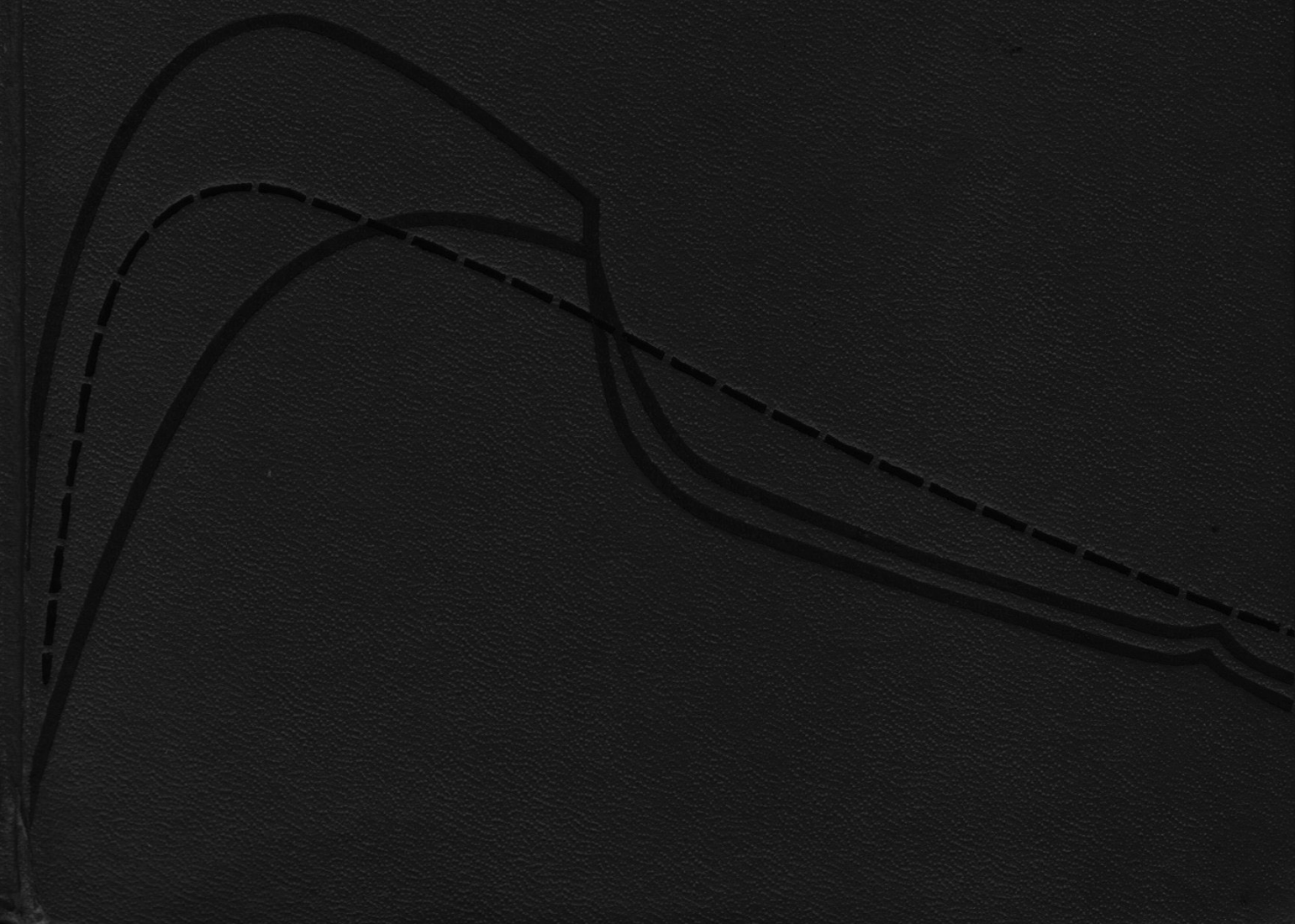


И. М. ДЫКМАН, П. М. ТОМЧУК

537
Д-878
4980

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА И ФЛУКТУАЦИИ В ПОЛУ- ПРОВОДНИКАХ



539.2
0.87
И. М. ДЫКМАН, П. М. ТОМЧУК

Р69553
537

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА И ФЛУКТУАЦИИ В ПОЛУ- ПРОВОДНИКАХ

124466 d

~~Державна публікація
науково-технічна
БІБЛІОТЕКА УРСР.~~

КИЕВ «НАУКОВА ДУМКА» 1981

Явления переноса и флуктуации в полупроводниках / Дыкман И. М., Томчук П. М. — Киев : Наук. думка, 1981. — 320 с.

Монография посвящена теории явлений переноса, распространения электромагнитных волн и шумов в полупроводниках с равновесными и неравновесными носителями тока. Главное внимание уделено изучению кинетических эффектов при строгом учете специфики механизмов рассеяния и закона дисперсии электронов и дырок. Рассмотрены явления переноса и электрооптические эффекты в широко используемых на практике полупроводниках. Изложены развитые авторами методы решения кинетического уравнения в сильных статических полях, когда носители являются существенно неравновесными. В частности, подробно описан вариационный метод, с помощью которого сравнительно просто можно учесть анизотропию законов дисперсии, механизмов рассеяния и их неупругий характер, а также влияние внешнего поля на явления переноса. Изложены основные представления теории шумов горячих электронов и шумов в неравновесных электрон-фононных системах.

Для специалистов, работающих в области физики полупроводников, а также для студентов физических факультетов.

Ил. 55. Табл. 2. Библиогр.: с. 304—318 (352 назв.).

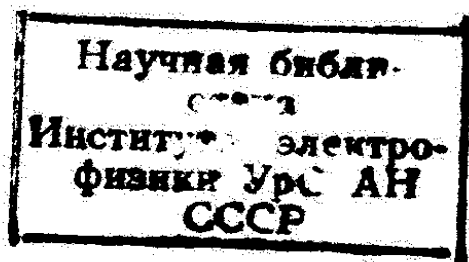
Ответственный редактор

П. Г. БОРЗЯК

Рецензенты

О. Г. САРБЕЙ,

А. М. ФЕДОРЧЕНКО



Редакция физико-математической литературы

Д 20403-012
М221(04)-81 196-81 1704060000

© Издательство «Наукова думка», 1981

Развитие теории кинетических эффектов в современной физике полупроводников является актуальной и интересной задачей. Несмотря на большое количество выполненных в этой области работ, многие вопросы, такие, например, как учет зонной структуры конкретных полупроводников и специфика процессов в сильных электрических и магнитных полях, остаются еще незатронутыми и нерешенными. Предлагаемая монография частично восполняет пробел в литературе по данной теме. Она посвящена теории явлений переноса, распространения электромагнитных волн и шумам в полупроводниках с неравновесными носителями тока.

Для того чтобы книга была доступной более широкому кругу читателей, в первых двух главах систематизированы и кратко изложены необходимые в дальнейшем наиболее важные сведения о зонной структуре твердых тел и механизмах рассеяния носителей. Рассмотрены практически все актуальные механизмы, определены соответствующие интегралы столкновений и вычислены времена релаксации. Приведены основные данные по зонной структуре алмазоподобных бесщелевых полупроводников. Сравнительно детально рассмотрены полупроводники $A_{III}B_V$, широко используемые в лазерной и технике СВЧ генераторов.

Наибольшее внимание в книге уделено теории явлений переноса и электрооптическим явлениям в полупроводниках, помещенных в греющее носители электрическое поле. Авторы стремились дать последовательное изложение теории с учетом реального закона дисперсии и реальных механизмов взаимодействия носителей с колебаниями решетки и ее дефектами. Поэтому, кроме вывода кинетического уравнения — основного уравнения теории — и определения критериев его применимости, описаны основные методы решения этого уравнения.

Учет межэлектронного взаимодействия, которое во многих случаях играет важную роль в явлениях переноса, часто значительно усложняет решение кинетического уравнения, особенно когда есть анизотропия, как, например, в многодолинных полупроводниках. Удобным и эффективным методом решения оказался изложенный в книге вариационный метод. Он позволяет получить решение в аналитическом виде при учете практически всех актуальных (упругих и неупругих) механизмов взаимодействия носителей и, в том

числе, межэлектронных. Анизотропия взаимодействия и междолинные переходы этим методом также могут быть учтены. Точность метода достаточно высока.

Изложение основного материала начинается (третья глава) с наиболее простого случая — полупроводника с параболическим и изотропным законом дисперсии энергии носителей при изотропных механизмах рассеяния. Здесь наиболее наглядно иллюстрируются возможные методы решения задачи. В частности, просто формулируется смысл понятия «горячие электроны» и находится наименьшая концентрация носителей, при которой это понятие физически оправдано, также просто определяется другая (более высокая) концентрация носителей, начиная с которой межэлектронный обмен импульсами заметно влияет на характеристики явлений переноса.

Обобщение решений на полупроводники с более сложным законом дисперсии приведено в четвертой и пятой главах. Рассмотрены многодолинные полупроводники с эллипсоидальными изоэнергетическими поверхностями, анизотропным рассеянием, а также полупроводники с непараболическим законом дисперсии. Показана зависимость показателя преломления от направления дрейфаносителей.

В шестой главе изложен развитый в последние годы подход к рассмотрению флуктуаций в неравновесной системе горячих электронов и фононов. Для различных механизмов рассеяния получено кинетическое уравнение, описывающее флуктуации одночастичных электронных и фононных функций распределения, и определены статистические характеристики источников флуктуаций. На конкретном примере показано применение полученных уравнений для исследования шумов разогретых электронов и фононов.

Изложение материала мы стремились дать с достаточной полнотой математических выкладок. Поэтому читатель без особого труда сможет воспроизвести (за редким, может быть, исключением) проведенные расчеты. В ряде случаев мы сознательно обошли некоторые несущественные детали и сослались на доступную литературу. Приведенная в конце библиография служит частично той же цели и не претендует на исчерпывающую полноту, а тем более на установление строгого приоритета.

Нумерация формул сплошная в пределах каждой главы. При необходимости ссылки на формулу из предшествующей главы указывается ее номер перед номером формулы (например, ссылка на формулу (18) второй главы дается так: (2.18)).

Будем рады, если предложенная монография окажется полезной студентам физической специальности, научным сотрудникам и инженерам, интересующимся вопросами теории полупроводников.

Авторы.

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛЕ

§ 1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ. ОДНОЭЛЕКТРОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Мы начнем с рассмотрения беспримесного электрически нейтрального кристалла, образованного достаточно большой совокупностью атомов, в общем случае, нескольких различных типов. Гамильтониан такой системы, если не учитывать несущественных здесь ядерных сил и сил, обусловленных наличием спинов нуклонов и электронов, имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i - \frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{1}{M_j} \Delta_j + \frac{e^2}{2} \sum_{i,i'}' \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} + \\ + \frac{e^2}{2} \sum_{j,j'}' \frac{Z_j Z_{j'}}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} - e^2 \sum_{i,j} \frac{Z_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|}, \quad (1)$$

Здесь m и e обозначают соответственно массу и заряд электрона в вакууме, M_j — массу j -го ядра. Координаты электронов и ядер обозначены через $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{R}_j$ и суммирование производится по всем электронам и ядрам. Штрихи удвойных сумм, как обычно, исключают слагаемые $i = i'$ и $j = j'$.

Первые два члена выражения (1) являются операторами кинетической энергии электронов и ядер. Остальные слагаемые (1) — операторы потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электронов друг с другом, ядер друг с другом и электронов с ядрами.

Вся информация о стационарных состояниях данной системы, очевидно, могла бы быть получена, если бы удалось точно решить уравнение Шредингера

$$\mathcal{H}\Psi(\dots \mathbf{r}_i \sigma_i, \dots \mathbf{R}_j \dots) = \mathcal{E}\Psi(\dots \mathbf{r}_i \sigma_i, \dots \mathbf{R}_j \dots), \quad (2)$$

где $\mathcal{E}$ — энергия стационарного состояния, а Ψ — соответствующая ему волновая функция; σ_i — спиновая координата i -го электрона.

Учитывая, что в одном кубическом сантиметре кристалла содержится примерно 10^{22} ядер и столько же, а чаще еще на порядок больше электронов, точное решение уравнения (2)

не только невозможно в аналитическом виде, но оно невозможно также с помощью самых современных вычислительных машин. Поэтому необходимо ограничиться поисками таких приближенных решений (2), точность которых в каждом конкретном случае оказалась бы достаточной для поставленной задачи. Предпочтительно, естественно, приближенные решения находить в аналитическом виде, хотя теперь на определенном этапе уже нельзя обойтись только такими решениями и приходится прибегать к численному табулированию на ЭВМ.

Во всяком случае, на первом этапе развития приближенного метода решения целесообразно, исходя из вида оператора $\mathcal{H}$, воспользоваться малым параметром $\frac{m}{M_j}$. На языке классической механики малость (на 3—5 порядков) массы электрона по сравнению с массой ядра определяет его значительно бóльшую скорость. Это означает, что ядра можно считать почти покоящимися по сравнению с движущимися электронами и что, следовательно, каждой конфигурации ядер должна приближенно соответствовать вполне определенная конфигурация или ряд вполне определенных конфигураций электронов.

На языке квантовой механики малость параметра $\frac{m}{M_j}$ позволяет представить волновую функцию системы $\Psi (...r_i\sigma_i ... R_j ...)$ в виде

$$\Psi (... r_i\sigma_i ... R_j ...) = \psi (... r_i\sigma_i ...; ... R_j ...) \times \times \Phi (... R_j ...) \quad (3)$$

и считать функцию $\psi (... r_i\sigma_i ...; ... R_j ...)$ лишь слабо (параметрически) зависящей от координат ядер. При таком предположении подстановка функции (3) в уравнение (2) с точностью до членов порядка $\frac{m}{M_j}$ приводит уже к двум уравнениям. Из этих уравнений первое, в принципе, определяет собственную функцию и энергию электронной подсистемы, а второе — функцию ядер $\Phi (... R_j ...)$ и энергию $\mathcal{E}$ всей системы. Последняя является, таким образом, только приближенно стационарной. При необходимости уточнения решения можно рассматривать отброшенные члены порядка $\left(\frac{m}{M_j}\right)^{1/4}$ как возмущение и как причину переходов между различными приближенно найденными стационарными состояниями. Заметим, что во втором из названных уравнений энергия электронной подсистемы играет роль потенциальной энергии ядер. Это соответствует тому, что ядра «чувствуют» только усредненное влияние электронного заряда.

Мы не останавливаемся подробно на деталях процедуры вычисления. Она здесь проводится по общему рецепту известного и описанного во многих монографиях метода адиабатического при-

ближения¹. Для нас важно лишь то, что этот метод позволяет с большой точностью описывать электронную подсистему независимо от подсистемы ядер, конфигурация которых как-то фиксирована. Разумеется, целесообразно начинать с изучения свойства электронной подсистемы при конфигурации ядер, соответствующей температуре абсолютного нуля. При этой температуре ядра вместе с электронами образуют строго идеальную кристаллическую решетку, характеризуемую некоторыми тремя некомпланарными векторами $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, называемыми элементарными базисными векторами. По определению, трансляция на целочисленный вектор решетки $\mathbf{a}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ (n_1, n_2, n_3 — целые числа) оставляет идеальный кристалл неизменным.

После того как удалось выделить уравнение электронной подсистемы, дальнейшее упрощение направлено на сведение многоэлектронной задачи к одноэлектронной. Обычно это достигается приближенным методом Хартри — Фока, позволяющим заменить действие всех электронов на рассматриваемый электрон некоторым эффективным самосогласованным полем (самосогласованным потенциалом).

Остановимся коротко на методе Хартри — Фока, примененном к электронам идеальной кристаллической решетки. Гамильтониан задачи согласно (1) теперь следующий:

$$\mathcal{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + \frac{e^2}{2} \sum_{i,i'}' \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} - e^2 \sum_{i,j} \frac{Z_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|}, \quad (4)$$

а уравнение Шредингера имеет вид

$$\mathcal{H}_e \psi (\dots \mathbf{r}_i \sigma_i \dots) = E \psi (\dots \mathbf{r}_i \sigma_i \dots). \quad (5)$$

Здесь и ниже, учитывая указанную выше конфигурацию ядер при температуре 0 К, мы не показываем зависимость энергии E и функции ψ от координат $\mathbf{R}_j$.

Гамильтониан (4) более удобно представить в виде

$$\mathcal{H}_e = \sum_i H_i + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i,i'}' \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|}, \quad (6)$$

где H_i — одноэлектронный гамильтониан:

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - e^2 \sum_j \frac{Z_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\mathbf{r}_i). \quad (7)$$

Потенциальная энергия $V(\mathbf{r})$ в уравнении (7) инвариантна относительно замены координаты $\mathbf{r}$ на $\mathbf{r} + \mathbf{a}_n$, где $\mathbf{a}_n$ — вектор решетки. Легко убедиться, что такая замена попросту эквивалентна переобозначению в (7) индекса суммирования j (т. е. обозначению

¹ Подробное изложение метода адиабатического приближения применительно к уравнению (2) содержится, например, в монографии А. И. Ансельма [1].

$\mathbf{R}_j - \mathbf{a}_n = \mathbf{R}_{j'}$). Поэтому гамильтониан H_i тоже инвариантен относительно замены $\mathbf{r}$ на $\mathbf{r} + \mathbf{a}_n$.

Согласно известной математической теореме, трансляционная инвариантность гамильтониана позволяет представить решение уравнения $H\psi = \epsilon\psi$ в виде функций Блоха, т. е.

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (8)$$

где $\mathbf{k}$ — некоторый постоянный вектор; $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — периодическая по кристаллу (периодическая по базисным векторам $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$) функция.

Если бы в гамильтониане (6) можно было пренебречь межэлектронным взаимодействием, то решение уравнения (5) представилось бы антисимметризованным произведением блоховских функций, удовлетворяющих уравнениям $H\varphi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}$. В действительности, межэлектронное взаимодействие играет тут весьма важную роль и по существу является причиной устойчивости кристалла. Поэтому пренебрегать им ни в коем случае нельзя и нужно решать многоэлектронную задачу с гамильтонианом, не сводящимся просто к сумме одноэлектронных гамильтонианов H_i .

Выразим энергию в уравнении (5) в виде функционала

$$E = \sum \int \psi^* (\dots \mathbf{r}_i \sigma_i \dots) \mathcal{H}_e \psi (\dots \mathbf{r}_i \sigma_i \dots) d\tau_1 \dots d\tau_N, \quad (9)$$

в котором интегрирование производится по пространственным координатам всех N электронов кристалла, а суммирование — по всем спиновым переменным. В основном состоянии энергия E минимальна и, следовательно, вариация интеграла (9) должна равняться нулю.

Легко убедиться, что точное решение вариационной задачи (9) при дополнительном условии нормировки волновой функции полностью эквивалентно решению уравнения Шредингера (5). Приближенное решение, однако, часто удобнее искать с помощью вариационного метода. Весьма эффективным для указанной цели является прямой вариационный метод. В этом методе искомая функция наперед выбирается в определенном виде, диктуемом конкретными условиями задачи. Она может содержать несколько параметров, значения которых находятся из обычных условий экстремума функционала по этим параметрам. Тем самым вариационная задача сводится к системе (по числу выбранных параметров) алгебраических (возможно трансцендентных) уравнений, решение которых в аналитическом или численном виде не представляет принципиальных затруднений.

В прямом вариационном методе точность полученного решения может быть оценена по тому, насколько заметно изменяется значение функционала при увеличении числа параметров искомой (пробной) функции. Вообще же результат, точность и эффективность прямого вариационного метода в значительной степени определяются удачным выбором пробной функции. В методе Хартри — Фока эта функция для электронной подсистемы выбирается

в виде антисимметризованного произведения одноэлектронных ортонормированных (включая и ортонормировку по спинам) функций $\varphi_l(\mathbf{r}_i, \sigma_i)$:

$$\psi(\dots \mathbf{r}_i, \sigma_i \dots) = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \text{Det} |\varphi_l(\mathbf{r}_i, \sigma_i)| \quad (l = 1, 2, \dots, N). \quad (10)$$

Функции φ_l в (10) не являются собственными функциями одноэлектронного гамильтониана (7). Они должны быть найдены из условия минимума энергии E после подстановки в функционал (9) пробной функции (10). Поскольку эта функция выбрана в виде, удовлетворяющем одному из основных требований, предъявляемых к многоэлектронной функции — требованию антисимметрии, можно надеяться, что в данной задаче она окажется удовлетворительной. Из теории многоэлектронного атома и молекул известно, кроме того, что функция вида (10) обеспечивает достаточно точные значения энергии и удовлетворительное описание свойств системы.

Подставим функции (10) в функционал (9) и приравняем нулю его полную вариацию, учтя при этом ортонормированные свойства функций $\varphi_l(\mathbf{r}, \sigma)$. Так как вариации $\delta\varphi_l^*$ и $\delta\varphi_l$ независимы и произвольны, то, положив, например, все $\delta\varphi_{l'} = 0$ ($l' = 1, 2, \dots, N$) и поочередно все $\delta\varphi_l^* = 0$, кроме некоторого определенного $\delta\varphi_l^*$, получим следующую систему уравнений:

$$\left[H(\mathbf{r}) + e^2 \sum_l \int \frac{|\varphi_l(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau' \right] \varphi_{l_1}(\mathbf{r}) - e^2 \sum_l \int \frac{\varphi_l^*(\mathbf{r}') \varphi_{l_1}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau' \varphi_l(\mathbf{r}) = \lambda_{l_1} \varphi_{l_1}(\mathbf{r}) \quad (l_1 = 1, 2, \dots, N). \quad (11)$$

(Здесь и ниже индекс у оператора $H(\mathbf{r})$ (7) опущен.)

Параметры λ_l в системе (11) являются лагранжевыми множителями, которые введены из-за учета условий ортонормировки, наложенных на функции $\varphi_l(\mathbf{r})$. Однако если записать систему (11) в виде

$$[H(\mathbf{r}) + V_{\text{ef}}(\mathbf{r})] \varphi_{l_1}(\mathbf{r}) = \lambda_{l_1} \varphi_{l_1}(\mathbf{r}) \quad (l_1 = 1, 2, \dots, N), \quad (12)$$

то можно заключить, что эти параметры λ_l играют роль одноэлектронных значений энергии оператора Хартри — Фока $\tilde{H}_{\text{ХФ}}(\mathbf{r})$, т. е. оператора $H(\mathbf{r})$ с добавленным к нему некоторым оператором потенциальной энергии $V_{\text{ef}}(\mathbf{r})$. Этот последний обусловлен коллективным влиянием всех электронов системы на рассматриваемый данный и согласно (11) имеет вид

$$V_{\text{ef}}(\mathbf{r}) = e^2 \sum_l \int \frac{|\varphi_l(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau' - \sum_l \frac{\varphi_l(\mathbf{r})}{\varphi_{l_1}(\mathbf{r})} \int \frac{\varphi_l^*(\mathbf{r}') \varphi_{l_1}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau'. \quad (13)$$

Здесь первая сумма описывает потенциальную энергию электрона в поле распределенного заряда всех остальных электронов. Вторая

сумма ² определяет потенциальную энергию, возникшую благодаря суто квантовой природе сил обменного взаимодействия.

Строго говоря, многоэлектронная система при наличии взаимодействия между электронами не может быть сведена к сумме одноэлектронных систем. Поэтому параметры λ_i отнюдь не определяют собственные значения энергии отдельных электронов. В системе с взаимодействием собственная энергия отдельных частиц вообще не имеет смысла. Легко проверить, что полная энергия (9) не равна сумме $\Sigma \lambda_i$. Тем не менее аналогия λ_i с электронной энергией, как будет видно, оказывается весьма удобной. Физический смысл λ_i непосредственно связан с понятием квазичастиц — элементарных возбуждений в многочастичной системе. Такие возбуждения хорошо теперь описываются методом функции Грина. Этим методом попутно устанавливается и граница применимости одночастичной квазиэнергии.

Нахождение даже приближенных значений λ_i и функций $\varphi_i(\mathbf{r})$ системы уравнений (11) связано с достаточно громоздкой и сложной процедурой вычислений. Указанная система является системой нелинейных интегро-дифференциальных уравнений и, в силу нелинейности, допускает неоднозначные решения. Поэтому каждое найденное решение требует анализа с точки зрения его разумности и соответствия физической реальности. Мы не станем здесь останавливаться на рецептуре вычислений, тем более что сейчас имеются мощные (с помощью вычислительных машин) методы определения энергии и электронных функций. Для нас только важно, что метод Хартри — Фока формально обосновывает возможность рассмотрения отдельных одноэлектронных гамильтонианов с эффективной потенциальной энергией (13). Эта энергия, как нетрудно убедиться, является периодической функцией элементарных базисных векторов решетки $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, если функции $\varphi_i(\mathbf{r})$ являются блоховскими функциями типа (8).

Выше мы отмечали, что оператор $H(\mathbf{r})$ обладает трансляционной симметрией. Поскольку $V_{\text{ef}}(\mathbf{r})$ при функциях $\varphi_i(\mathbf{r})$ блоховского вида тоже, как оказалось, обладает трансляционной симметрией, то полный оператор Хартри — Фока $\tilde{H}_{\text{ХФ}}(\mathbf{r})$ трансляционно инвариантен, а следовательно, его собственные функции должны иметь вид (8). Таким образом, функции Блоха являются самосогласованными решениями системы (12). Тем самым, с точностью до приближения Хартри — Фока можно считать обоснованным приближение одноэлектронного рассмотрения в кристалле. Волновые функции отдельных электронов при этом имеют вид (8), а вектору $\mathbf{k}$ следует условно приписать смысл волнового вектора. Естественно, свойства и поведение таких электронов (т. е. электронов, описываемых уравнением (12)), могут существенным образом отличаться от свойств и поведения электронов в вакууме.

² Суммирование во второй сумме (13), как и во второй сумме (11), производится только по функциям со спинами, параллельными спину функции $\varphi_{i_1}(\mathbf{r})$.

Выясним теперь физический смысл параметров λ_l в системе уравнений (12). Согласно теореме Купменса (см. [2]), каждый из этих параметров λ_{l_1} равен работе A_{l_1} (с обратным знаком) вырывания из кристалла электрона в состоянии φ_{l_1} . По определению эта работа имеет вид

$$A_{l_1} = \int \psi_{l_1}^* \mathcal{H}' \psi_{l_1} \prod_{l \neq l_1} d\tau_l - \int \psi^* \mathcal{H}_e \psi \prod_l d\tau_l, \quad (14)$$

где $\mathcal{H}_e$ и $\psi = \psi(\dots r_i, \sigma_i \dots)$ — соответственно оператор Гамильтона (4) и его собственная функция; $\mathcal{H}'$ и ψ_{l_1} — аналогичные оператор и функция системы с отсутствующим электроном в состоянии $\varphi_{l_1}(\mathbf{r})$. В первом интеграле (14) интегрирование проводится по всем координатам электронов, за исключением координаты функции φ_{l_1} , во втором — по всем электронам системы N .

Доказательство теоремы Купменса основывается на предположении о том, что число электронов N и занимаемый ими объем кристалла V достаточно велики. Поэтому удаление одного электрона практически не сказывается на всех остальных, и, следовательно, волновая функция $\psi_{l_1}(\dots r_i, \sigma_i \dots)$ системы $N - 1$ электронов в приближении Хартри — Фока должна иметь вид, аналогичный функции (10), т. е.

$$\psi_{l_1}(\dots r_i, \sigma_i \dots) = \frac{1}{[(N-1)!]^{1/2}} \text{Det} |\varphi_l(\mathbf{r}_i, \sigma_i)|; \quad (15)$$

$$l = 1, 2, \dots, (l_1 - 1), (l_1 + 1), \dots, N.$$

В обоих детерминантах (10), (15) функции $\varphi_l(\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ являются одними и теми же блоховскими функциями³. Отличие детерминантов состоит лишь в том, что в детерминанте (15) отсутствует ряд функций типа $\varphi_{l_1}(\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ и столбец функций типа $\varphi_i(\mathbf{r}_{l_1}, \sigma_{l_1})$ ($i = 1, 2, \dots, N - 1$).

Подставим (10) и (15) в (14). Вычисление A_{l_1} при этом оказывается совершенно аналогичным вычислению, приведенному выше к системе уравнений (11). Поэтому, не останавливаясь сейчас на деталях, запишем лишь окончательный результат

$$A_{l_1} = - \int \varphi_{l_1}^*(\mathbf{r}) \left[H(\mathbf{r}) + e^2 \sum_l \int \frac{|\varphi_l(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau' \right] \varphi_{l_1}(\mathbf{r}) d\tau + \\ + e^2 \sum_l \int \varphi_{l_1}^*(\mathbf{r}) \frac{\varphi_l^*(\mathbf{r}') \varphi_{l_1}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_l(\mathbf{r}) d\tau d\tau'. \quad (16)$$

Учитывая (12) и (13), выражение (16) можно преобразовать к виду

$$A_{l_1} = - \int \varphi_{l_1}^*(\mathbf{r}) [H(\mathbf{r}) + V_{\text{ef}}(\mathbf{r})] \varphi_{l_1}(\mathbf{r}) d\tau = \\ = - \int \varphi_{l_1}^*(\mathbf{r}) \lambda_{l_1} \varphi_{l_1}(\mathbf{r}) d\tau = - \lambda_{l_1}, \quad (17)$$

³ Заряд электрона, описываемого функцией Блоха, распределен по всему объему кристалла с плотностью, обратно пропорциональной V . При $V \rightarrow \infty$ эта плотность стремится к нулю и, следовательно, бесконечно слабо влияет на функции и состояния остальных электронов.

что и доказывает, в принятых предположениях, справедливость теоремы Купменса.

Теорема Купменса позволяет определить работу, необходимую для перевода электрона из состояния l_1 в состояние l_2 . Эта работа, очевидно, равна разности работ по удалению электрона из кристалла в состояниях l_1 и l_2 . Поэтому $A_{l_1} - A_{l_2} = -(\lambda_{l_1} - \lambda_{l_2})$. С другой стороны, работа перехода электрона из состояния l_1 в l_2 должна равняться разности энергий ϵ_{l_1} и ϵ_{l_2} , соответствующих этим состояниям, т. е. $A_{l_1} - A_{l_2} = \epsilon_{l_2} - \epsilon_{l_1}$. Отсюда видно, что параметрам λ_l можно действительно приписать смысл одноэлектронных энергий. В дальнейшем мы и будем придерживаться такого определения этих параметров, записывая уравнение Шредингера для электронов в кристалле в виде

$$H\varphi_l(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \varphi_l(\mathbf{r}) = \epsilon_l \varphi_l(\mathbf{r}) \quad (18)$$

с периодической по кристаллу потенциальной энергией $V(\mathbf{r})$. Подчеркнем, однако, еще раз, что в данном случае мы имеем дело с некоторым приближенным описанием и что уравнение (18) описывает частицы, лишь условно называемые электронами.

§ 2. ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА

Выше мы показали, что решением уравнения (18) являются функции Блоха типа (8). Поэтому волновой вектор $\mathbf{k}$ может быть выбран в качестве одного из параметров, характеризующих состояние l . К выбору значения этого параметра необходимо сделать следующее замечание. Согласно теореме Блоха, собственная функция гамильтониана (18) от сдвинутого на целочисленный вектор решетки $\mathbf{a}_n$ аргумента, т. е. функция $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)$, удовлетворяет условию

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (19)$$

Такое условие само по себе, как видно, не дает еще возможности однозначно определить вектор $\mathbf{k}$, даже если для разных $\mathbf{a}_n$ заданы значения произведения $\mathbf{k}\mathbf{a}_n$. Действительно, с точки зрения условия (19) все векторы $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}$ должны считаться эквивалентными, если вектор $\mathbf{K}$ выбран так, что его произведение на произвольный вектор решетки (в том числе, разумеется, на любой из базисных векторов $\mathbf{a}_i$) равно целому кратному от 2π .

Чтобы устранить указанную многозначность в выборе волнового вектора, целесообразно наложить условие на область его возможных значений. Мы примем и ниже всегда будем считать (если противное специально не будет оговорено), что волновой вектор $\mathbf{k}$ ограничен пределами

$$-\pi \leq \mathbf{k}\mathbf{a}_i \leq \pi \quad (i = 1, 2, 3). \quad (20)$$

Тем самым из области всех эквивалентных значений $\mathbf{k}'$ мы выбираем область наименьших по модулю значений $\mathbf{k}$.

Вектор $\mathbf{k}$, удовлетворяющий условиям (20), называется приведенным волновым вектором. Полезно дать наглядную интерпретацию векторам $\mathbf{K}$, с помощью которых осуществляется операция приведения. Эти векторы, согласно их определению, удовлетворяют равенствам $\mathbf{K}\mathbf{a}_i = 2\pi g_i$, где g_i — целые числа, $i = 1, 2, 3$. По аналогии с векторами решетки $\mathbf{a}_n$ удобно выбрать векторы $\mathbf{K}$ равными $\mathbf{k}_g$, где $\mathbf{k}_g = g_1\mathbf{b}_1 + g_2\mathbf{b}_2 + g_3\mathbf{b}_3$ с целочисленными значениями g_1, g_2, g_3 . При $\mathbf{b}_j\mathbf{a}_i = 2\pi\delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2, 3$) поставленное условие $\mathbf{k}_g\mathbf{a}_i = 2\pi g_i$ будет удовлетворено. Векторы $\mathbf{b}_i$ выражаются через базисные векторы решетки $\mathbf{a}_i$ следующим образом:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]}{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3}; \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1]}{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3}; \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]}{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3}. \quad (21)$$

В целях наглядности удобно векторы $\mathbf{b}_i$ тоже рассматривать как элементарные базисные векторы периодической решетки в пространстве с размерностью обратной длины. Решетка, образованная этими базисными векторами, называется обратной. Она состоит из всевозможных трансляций элементарной ячейки, построенной на векторах $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$. Векторы $\mathbf{k}_g$ соединяют в узлы обратной ячейки, а приведенный волновой вектор $\mathbf{k}$ изменяется согласно условиям (20) в пределах элементарной ячейки обратной решетки. Объем ее с учетом (21) равен $\frac{8\pi^3}{v_0}$, где v_0 — объем прямой элементарной ячейки ($v_0 = \mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3$).

Принято область изменения приведенного волнового вектора — область вблизи точки $\mathbf{k} = 0$, в которой вектор $\mathbf{k}$ удовлетворяет неравенствам (20), называть первой зоной Бриллюэна (или часто просто — зоной Бриллюэна). Внутри зоны Бриллюэна энергия электрона ε изменяется непрерывно с изменением $\mathbf{k}$, и лишь на границах зоны могут иметь место разрывы непрерывности энергии. Заметим, кстати, что при значениях волнового вектора, соответствующих положениям точек на граничных поверхностях зоны Бриллюэна, должно наблюдаться брегговское отражение.

Геометрическое построение зоны Бриллюэна осуществляется так: из узла обратной решетки, выбранного как начало отсчета вектора $\mathbf{k}$, проводятся прямые, соединяющие начало отсчета с узлами обратной решетки. В средних точках этих прямых проводятся далее перпендикулярные к ним плоскости. Наименьший замкнутый объем обратной решетки, ограниченный указанными плоскостями, определяет зону Бриллюэна⁴. Легко проверить, что в случае простой кубической решетки с ребром элементарной ячейки a зона Бриллюэна тоже является кубом с ребром $\frac{2\pi}{a}$. В случае нецентрированной кубической решетки, как, например, у алмаза,

⁴ Иногда в литературе рассматривается не одна зона Бриллюэна, а несколько, т. е. рассматривается не только наименьший объем, ограниченный указанными плоскостями, но и следующие за ним объемы. Нам не понадобится рассмотрение более высоких зон Бриллюэна.

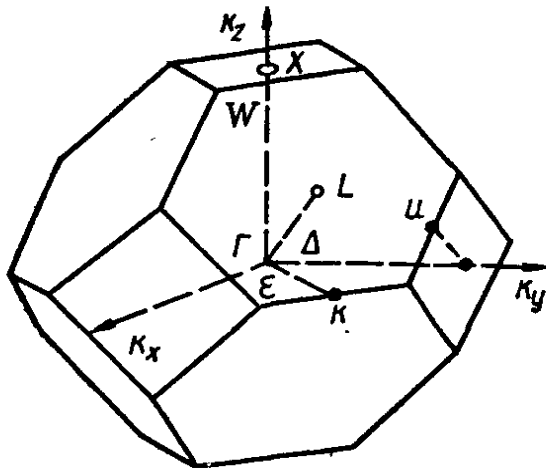


Рис. 1. Зона Бриллюэна гранецентрированной кубической решетки; буквами указаны принятые обозначения точек и линий симметрии.

кремния и германия, зона Бриллюэна представляется четырнадцатигранником, изображенным на рис. 1. Его объем равен $4 \left(\frac{2\pi}{a} \right)^3$, где a — ребро гранецентрированной кубической ячейки прямой решетки (напом-

ним, что объем элементарной ячейки прямой гранецентрированной кубической решетки равен $v_0 = \frac{a^3}{4}$).

При бесконечно большом объеме кристалла вектор $\mathbf{k}$ непрерывно заполняет все точки зоны Бриллюэна. Часто удобнее считать кристалл не бесконечно большим, а только достаточно большим с размерами $L_1 a_1$, $L_2 a_2$, $L_3 a_3$ в направлениях базисных векторов. Числа L_1 , L_2 , L_3 большие, но все же конечные. Иначе можно сказать, что удобно из бесконечно большого объема кристалла выделить для рассмотрения некоторую основную область $L_1 L_2 L_3 v_0$, и считать, что весь бесконечный кристалл может быть разбит на аналогичные области с тождественно повторяющимися свойствами. Такое предположение эквивалентно наложению условия периодичности (называемому условием Борна — Кармана), согласно которому волновая функция, в частности, при изменении координаты электрона на $L_i a_i (i = 1, 2, 3)$, тоже должна тождественно повторяться. Очевидно также, что при $L_i \gg 1$ все объемные свойства кристалла не должны зависеть от конкретных значений чисел L_i .

Тождественность волновой функции электрона при трансляции координаты $\mathbf{r}$ на $L_i \mathbf{a}_i$ требует по формуле (19) выполнения условия $\mathbf{k} L_i \mathbf{a}_i = 2\pi \mathbf{G}_i$, где G_i — целые числа ($i = 1, 2, 3$). В сочетании с формулой (20) такое условие ограничивает возможные значения G_i неравенствами

$$-\frac{L_i}{2} \leq G_i \leq \frac{L_i}{2} \quad (i = 1, 2, 3). \quad (22)$$

Отсюда видно, что в кристалле конечного объема (в основной области кристалла) волновой вектор электрона $\mathbf{k}$ принимает дискретные значения и всего в зоне Бриллюэна имеется $L_1 L_2 L_3$ различных значений $\mathbf{k}$.

Здесь следует сразу же оговориться, что относительный шаг дискретности изменения волнового вектора почти всегда можно считать практически бесконечно малым. Ведь даже в одном кубическом сантиметре кристалла, например, произведение $L_1 L_2 L_3$ равно по порядку величины 10^{22} . Поэтому относительный шаг дис-

кретности $\mathbf{k}$ в этом случае порядка $(L_1 L_2 L_3)^{-1/3} \approx 10^{-7}$ и, значит, с такой погрешностью, если нужно, можно вообще не принимать во внимание дискретный характер изменения волнового вектора, т. е. считать его квазинепрерывным. Здесь мы встречаемся с примером того, как в зависимости от требований задачи одна и та же физическая характеристика может считаться дискретной или квазинепрерывной.

Квазинепрерывность $\mathbf{k}$ часто весьма существенно упрощает процедуру вычислений. Как правило, вычисление какого-либо физического свойства кристалла⁵ связано с нахождением суммы от некоторой функции волнового вектора $f(\mathbf{k})$ по всем возможным в зоне Бриллюэна значениям $\mathbf{k}$ или по его значениям внутри некоторой ограниченной области зоны Бриллюэна. Иногда оказывается, что такую сумму удобно находить, учитывая дискретность $\mathbf{k}$. Чаще, однако, целесообразнее перейти от суммирования к интегрированию, исходя именно из указанного квазинепрерывного характера волнового вектора. Такой переход производится по правилу

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{V}{8\pi^3} \int f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k}, \quad (23)$$

поскольку из всех возможных $L_1 L_2 L_3$ значений $\mathbf{k}$ в зоне Бриллюэна (объем которой равен $\frac{8\pi^3}{v_0}$) в объеме обратной решетки $d^3\mathbf{k}$ будет $L_1 L_2 L_3 d^3\mathbf{k} / \left(\frac{8\pi^3}{v_0}\right)$, т. е. $\frac{V}{8\pi^3}$, значений; V — объем основной области.

Во многих задачах интегрируемая функция $f(\mathbf{k})$ оказывается функцией одной только энергии электрона ϵ . Когда известна зависимость энергии от волнового вектора $\mathbf{k}$, то в (23) целесообразно выделить интегрирование по энергии, преобразовав для этой цели $d^3\mathbf{k}$ так, чтобы одной из переменных интегрирования была энергия ϵ . По двум другим переменным (например, углам вектора $\mathbf{k}$ в пространстве обратной решетки) интегрирование часто может быть непосредственно выполнено. Оно приводит к появлению множителя $g(\epsilon)$ — плотности состояний. Плотность состояний играет важную роль при описании статистических свойств электронного газа. Явный вид функции плотности состояний определяется конкретным законом зависимости энергии ϵ от $\mathbf{k}$, которая в разных кристаллах, как будет позже видно, разная. В отличие от аналогичной функции в вакууме, в кристалле $\epsilon(\mathbf{k})$ не является однозначной функцией приведенного волнового вектора. Остановимся на этом вопросе несколько подробнее.

⁵ В данном контексте подразумеваются свойства кристалла, обусловленные электронами и их взаимодействием с решеткой и внешними полями.

§ 3. ЗОННАЯ СТРУКТУРА ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНА

Функция Блоха $\psi_k(\mathbf{r})$ является в кристалле собственной функцией оператора Гамильтона и одновременно (см. (19)) собственной функцией оператора трансляции координаты электрона на вектор решетки. Этот оператор T_n можно выразить в виде

$$T_n = \exp(i\mathbf{a}_n\mathbf{p}/\hbar), \quad (24)$$

где $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ — оператор импульса. Действительно, применим операцию T_n к функции $\varphi_k(\mathbf{r})$:

$$T_n\varphi_k \equiv \exp(i\mathbf{a}_n\mathbf{p}/\hbar)\varphi_k = e^{\mathbf{a}_n\nabla}\varphi_k = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} (\mathbf{a}_n\nabla)^s \varphi_k. \quad (25)$$

Легко убедиться, что правая часть (25) представляет не что иное, как разложение функции $\varphi_k(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)$ в ряд Тейлора.

Собственными значениями операторов T_n служат, как мы уже отмечали, выражения типа $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Нужно, однако, иметь в виду, что операторы T_n не образуют полного набора коммутирующих операторов [3]. Применительно к функциям электронов в кристаллической решетке имеется еще один набор операторов, коммутирующих с T_n и не выражающихся линейно через T_n . Такими операторами являются операторы τ_g :

$$\tau_g = \exp(i\mathbf{k}_g\mathbf{r}), \quad (26)$$

где $\mathbf{k}_g$ — векторы обратной решетки.

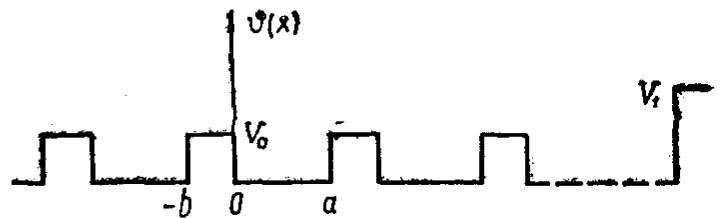
Коммутативность операторов T_n и τ_g с учетом того, что $\mathbf{a}_n\mathbf{k}_g$ равно целому кратному от 2π , доказывается по аналогии с (25):

$$\begin{aligned} T_n\tau_g &= e^{\mathbf{a}_n\nabla} e^{i\mathbf{k}_g\mathbf{r}} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} (\mathbf{a}_n\nabla)^s e^{i\mathbf{k}_g\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}_g\mathbf{r}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} (i\mathbf{a}_n\mathbf{k}_g + \mathbf{a}_n\nabla)^s = \\ &= e^{i\mathbf{k}_g\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{a}_n\mathbf{k}_g + \mathbf{a}_n\nabla)} = e^{i\mathbf{k}_g\mathbf{r}} e^{\mathbf{a}_n\nabla} = \tau_g T_n. \end{aligned} \quad (27)$$

Можно также доказать [3], что любые операторы, являющиеся функциями $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ и коммутирующие со всеми T_n и τ_n , могут зависеть только от T_n и τ_g . Следовательно, если любой оператор коммутирует с операторами T_n и τ_g , то он должен быть функцией только этих операторов. Это означает, что операторы T_n и τ_g при всевозможных $\mathbf{a}_n$ и $\mathbf{k}_g$ образуют полный набор коммутирующих операторов, а следовательно, произведения собственных функций этих операторов образуют полную систему функций.

Сформулированная здесь теорема показывает, что функция Блоха в виде (8) не описывает полностью состояния электрона в кристалле. Поэтому собственное значение ε оператора Гамильтона должно зависеть не только от $\mathbf{k}$, но и от некоторого дополнительного квантового числа α . Собственные волновые функции электрона,

Рис. 2. Потенциал Кронига — Пенни; V_1 — потенциал на границе линейной цепочки одномерного кристалла.



являющиеся, таким образом, собственными функциями линейно независимых операторов H и T_n , должны иметь вид

$$\varphi_{\alpha k}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) u_{\alpha k}(\mathbf{r}). \quad (28)$$

В силу эрмитовости H функции $\varphi_{\alpha k}(\mathbf{r})$ для каждого кристалла с конкретно заданной потенциальной энергией $V(\mathbf{r})$ образуют полную систему.

Наиболее наглядно физический смысл квантового числа α в кристалле может быть прослежен на примере простой модели, предложенной в работе Кронига и Пенни [4]. В этой модели кристалл аппроксимирован линейной цепочкой, представленной на рис. 2, со ступенчатым распределением потенциальной энергии электрона $V(x)$ вдоль цепочки. В целях облегчения вычислений в работе [4] параметр b на рис. 2 был устремлен к нулю при одновременном устремлении V_0 к бесконечности так, чтобы произведение $V_0 b$ оставалось неизменным.

В результате сравнительно простых вычислений было получено, что энергия электрона может принимать значения только в пределах определенных областей, разделенных энергетическими интервалами, в которых реальные значения энергии не могут иметь места. Таким образом расчет, основанный на указанной простой модели кристаллической решетки, непосредственно привел к зонной энергетической структуре, схематически изображенной на рис. 3. В пределах каждой разрешенной зоны энергия ε является непрерывной (точнее — квазинепрерывной) функцией волнового вектора $\mathbf{k}$. Переход электрона от одной зоны к другой должен

сопровождаться скачкообразным изменением энергии, которая, как видим, определяется не только $\mathbf{k}$, но и номером зоны. Этот номер зоны и описывается параметром α в формуле (28).

Зонная структура энергии электрона в кристалле обусловлена корпускуляр-

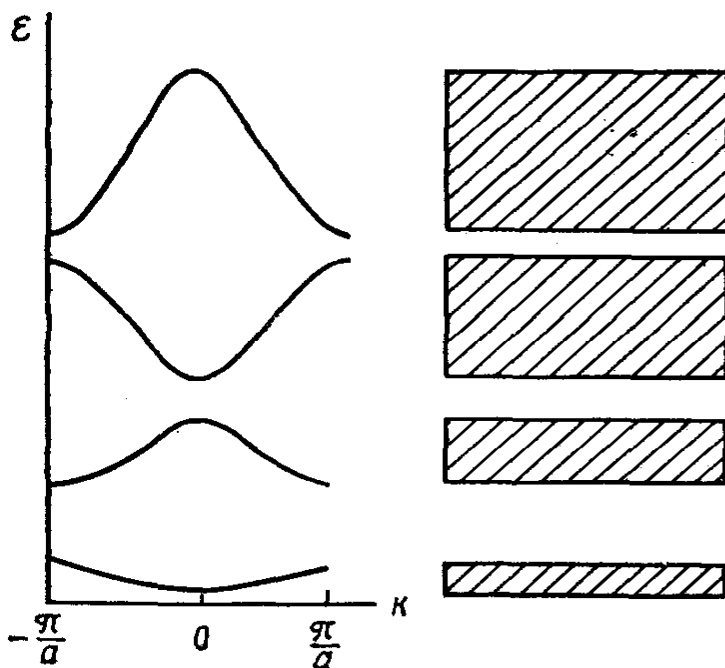


Рис. 3. Энергетическая структура в модели Кронига — Пенни: зависимость энергии ε от волнового вектора $\mathbf{k}$ (справа очерчены области разрешенных зон).

но-волновой природой электрона. Она по существу аналогична дискретной энергетической структуре атомов, из которых построен кристалл. Отсюда закономерности, полученные на основе простой модели, в известной мере сохраняются и при более строгом рассмотрении. Как и в простой модели, ширина разрешенных зон увеличивается с возрастающим номером зоны α , а ширина запрещенных зон уменьшается ⁶ (см. рис. 3). При этом более точная модель допускает, в согласии с опытом, возможность слияния и даже перекрытия различных разрешенных зон. Стоит заметить, что если бы такого перекрытия в принципе не могло быть, то, например, двухвалентные металлы, как Zn, Cd, при низких температурах вели бы себя подобно диэлектрикам.

Описание низко расположенных зон с достаточно хорошей точностью можно получить с помощью так называемого приближения сильно связанных электронов [7]. Приближение исходит из допущения, что потенциал в кристалле в точках, близко расположенных к атомным ядрам, очень слабо отличается от потенциала изолированного атома. Поэтому волновые функции электронов внутренних оболочек атома, эффективный радиус которых мал, в кристалле лишь слабо деформируются. Принципиально отличительным признаком, по сравнению с изолированным атомом, в кристалле является перекрытие «хвостовых» частей волновых функций соседних атомов. Это перекрытие (увеличивающееся с возрастанием энергии электронного состояния) обуславливает своего рода «обобществление» электронов в кристалле, возможность их перехода от одного атома к другому и, как следствие этого, «размытие» атомного электронного уровня. Идентичные атомные уровни по такой причине расщепляются в кристалле в зону дозволённых значений энергии.

У внутренних электронов атома перекрытие волновых функций совсем незначительно, и поэтому переход электрона к соседним атомам мало вероятен. Время такого перехода достаточно велико, и ширина разрешенной зоны энергии достаточно мала. У более высоко расположенных атомных уровней перекрытие волновых функций в кристалле становится больше и, соответственно, уменьшаются эффективные времена межатомных переходов. Ширина разрешенной зоны, образованной из таких уровней с более высокой энергией, увеличивается согласно уже отмеченной выше закономерности. Не исключена при этом также и возможность перекрытия зон, когда верхний край (потолок) зоны с номером α

⁶ В работе Тамма [5] модель Кронига — Пенни обобщена путем учета скачка потенциала на границе кристаллической решетки (см. рис. 2). Подобное обобщение привело к появлению одного уровня в каждой (кроме, может быть, первой нижней) запрещенной полосе энергии. Эти уровни, называемые теперь «таммовскими», носят чисто поверхностный характер, поскольку волновые функции электронов на этих уровнях экспоненциально спадают по обе стороны от границы. Работа [5] положила начало новому направлению по исследованию поверхностных состояний и поверхностных зон (см., например, [6]).

расположен в энергетической шкале кристалла выше нижнего края (дна) зоны с номером $\alpha + 1$ (возникшей в результате расщепления более высокого атомного уровня).

Далее нас будут главным образом интересовать зоны, образованные из уровней валентных электронов атомов⁷. Как правило, приближение сильно связанных электронов не в состоянии удовлетворительно количественно описать энергетическую структуру таких зон. В настоящее время в литературе разработаны многочисленные более эффективные методы расчета зон. Описание этих методов не входит в нашу задачу. Читатель может ознакомиться с ними не только по оригинальным статьям, но и по монографиям (см., например, [8—11]). Здесь мы остановимся лишь на некоторых важных для дальнейшего изложения определениях, не связанных с деталями расчета зон.

Подставим в уравнение (18) волновую функцию в виде (28). Это даст следующее уравнение для определения функции $u_{\alpha k}(\mathbf{r})$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + 2ik\nabla - k^2) u_{\alpha k}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) u_{\alpha k}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\alpha k} u_{\alpha k}(\mathbf{r}). \quad (29)$$

При изменении знака волнового вектора уравнение (29) заменится на

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta - 2ik\nabla - k^2) u_{\alpha, -k}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) u_{\alpha, -k}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\alpha, -k} u_{\alpha, -k}(\mathbf{r}). \quad (30)$$

Так как потенциальная и полная энергия электрона имеют реальное значение, то уравнение (30) оказывается не чем иным, как уравнением, определяющим комплексно сопряженную функцию $u_{\alpha k}^*$. Отсюда непосредственно можно заключить, что спектры энергии $\varepsilon_{\alpha k}$ и $\varepsilon_{\alpha, -k}$ совпадают. Иными словами, энергия электрона является четной функцией волнового вектора.

Четная зависимость энергии $\varepsilon_{\alpha k}$ от волнового вектора (в пренебрежении спином) характерна для всех кристаллических тел, независимо от их свойств симметрии. Она поэтому имеет место и в кристаллах без центра инверсии. Подчеркнем, однако, что свойства симметрии конкретных кристаллов, т. е. свойства преобразований, переводящих кристалл в себя самого, непосредственно отражаются на свойствах симметрии волновых функций, а значит, и на зависимости энергии электрона от волнового вектора. В этом можно убедиться, если применить любую из операций группы симметрии данного кристалла, например какую-либо операцию $\hat{R}$ к координате $\mathbf{r}$, и записать уравнение (29) для функции $u_{\alpha k}(\hat{R}\mathbf{r})$.

⁷ Часто именно только внешние электроны принимаются во внимание при обосновании одноэлектронного приближения (см. § 1). Кристаллическая решетка представляется в таком рассмотрении состоящей из ионов, расположенных в правильном периодическом порядке. Влияние электронов ионных остовов на валентные электроны описывается суммарным потенциалом ядер и электронов этих остовов.

Поскольку операция $\hat{R}$ здесь производит вещественное ортогональное преобразование координат, переводящее точку $\mathbf{r}$ в точку с такой же потенциальной энергией, то $V(\mathbf{r}) = V(\hat{R}\mathbf{r})$. Очевидно также, что преобразование $\hat{R}$ оставляет в (29) инвариантным оператор Δ , а скалярное произведение $\mathbf{k}(\hat{R}\mathbf{V})$ изменяет на равное ему произведение $(\hat{R}^{-1}\mathbf{k})\nabla$. Поэтому уравнение Шредингера для функции $u_{\alpha\mathbf{k}}(\hat{R}\mathbf{r})$ имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\Delta + 2i(\hat{R}^{-1}\mathbf{k})\nabla - k^2]u_{\alpha\mathbf{k}}(\hat{R}\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u_{\alpha\mathbf{k}}(\hat{R}\mathbf{r}) = \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}}u_{\alpha\mathbf{k}}(\hat{R}\mathbf{r}). \quad (31)$$

Как видим, уравнение (31) в точности совпадает с уравнением (29) для функции $u_{\alpha, \hat{R}^{-1}\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Функции $u_{\alpha\mathbf{k}}(\hat{R}\mathbf{r})$ и $u_{\alpha, \hat{R}^{-1}\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ являются, следовательно, решением одного и того же уравнения, а это говорит о том, что они собственные для одной и той же энергии.

Операция $\hat{R}^{-1}$ также является операцией симметрии кристалла, действующей на волновой вектор $\mathbf{k}$ в пространстве обратной решетки и переводящей его в вектор $\hat{R}^{-1}\mathbf{k}$. Доказанное выше утверждение $\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}} = \varepsilon_{\alpha, \hat{R}^{-1}\mathbf{k}}$ показывает, что энергия в пространстве обратной решетки обладает всеми свойствами симметрии, присущими потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$ в пространстве прямой решетки. Обратимся теперь к упомянутому в § 2 утверждению о непрерывной зависимости энергии от волнового вектора в каждой разрешенной зоне. Проще всего этот вопрос исследовать с помощью введенных Латтинджером и Коном [12] функций $\chi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$\chi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\mathbf{r}}\varphi_{\alpha\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \quad (32)$$

где $\mathbf{k}_0$ — точка в зоне Бриллюэна, вблизи которой исследуется непрерывность энергии; $\varphi_{\alpha\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ — функция Блоха с волновым вектором $\mathbf{k}_0$.

Функции Блоха здесь и ниже считаем нормированными внутри объема основной области кристалла V . Так как эти функции образуют полную систему, то

$$\int_{(V)} \varphi_{\alpha\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\alpha'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d\tau = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (33)$$

Удобно нормировочный множитель явно ввести в определение функции (28) и представить ее в виде

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (34)$$

после чего функции $u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ оказываются нормированными внутри объема элементарной ячейки v_0 :

$$\frac{1}{v_0} \int_{(v_0)} |u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d\tau = 1. \quad (35)$$

Можно доказать (см. приложение А), что функции Латтинже-ра — Кона (32) образуют полную ортонормированную систему и любая функция $f(\mathbf{r})$ разлагается по этим функциям так же, как и по функциям Блоха. В частности, и саму функцию Блоха при произвольном $\mathbf{k}$ тоже можно представить в виде ряда по функциям $\chi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ с фиксированным в них значением $\mathbf{k}_0$:

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha'} a_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) \chi_{\alpha'\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (36)$$

Подстановка (36) в уравнение Шредингера (18) при учете (32) дает

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha'} a_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) \left[\varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0} - \frac{i\hbar^2}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \nabla + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right] \varphi_{\alpha'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \\ = \varepsilon \sum_{\alpha'} a_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) \varphi_{\alpha'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (37)$$

Умножим уравнение (37) на $\varphi_{\alpha''\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r})$ и проинтегрируем по объему основной области кристалла. Такая процедура приводит к системе линейных однородных уравнений

$$\varepsilon a_{\alpha\alpha''}(\mathbf{k}) = \left[\varepsilon_{\alpha''\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right] a_{\alpha\alpha''} + \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \sum_{\alpha'} a_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) p_{\alpha''\alpha'}, \quad (38)$$

нетривиальное решение которой требует равенства нулю детерминанта

$$\text{Det} \| H_{\alpha''\alpha'} - \varepsilon \delta_{\alpha''\alpha'} \| = 0, \quad (39)$$

где

$$H_{\alpha''\alpha'} = \left[\varepsilon_{\alpha''\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right] \delta_{\alpha''\alpha'} + \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha''\alpha'} \quad (40)$$

и $p_{\alpha''\alpha'}$ — матричный элемент импульса на функциях Блоха с волновым вектором $\mathbf{k}_0$:

$$p_{\alpha''\alpha'} = \frac{\hbar}{i} \int \varphi_{\alpha''\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \nabla \varphi_{\alpha'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\tau. \quad (41)$$

Недиагональные элементы (40) являются непрерывной функцией волнового вектора $\mathbf{k}$. Они исчезают, когда $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_0$. При этом корнями уравнения (39) становятся значения $\varepsilon = \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0}$. Так как $\mathbf{k}_0$ может занимать произвольное положение внутри зоны Бриллюэна, то полученное соотношение $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0}$ при $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_0$ доказывает непрерывность и аналитичность энергии как функции волнового вектора в каждой разрешенной энергетической зоне α (с той точностью, с какой можно считать волновой вектор непрерывно изменяющимся).

Когда $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ мало, но все же отлично от нуля, недиагональные элементы матрицы (40) в уравнении (39) можно рассматривать как возмущение. Тогда с точностью до членов второго порядка

малости из уравнения (38) находим

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}} = \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha\alpha} + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 + \\ + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum'_{\alpha'} \frac{[(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha\alpha'}]^* [(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha\alpha'}]}{\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0}}. \end{aligned} \quad (42)$$

Формула (42) особенно полезна в тех случаях, когда вектор $\mathbf{k}_0$ соответствует экстремуму энергии. В силу доказанной выше аналитичности и четности энергии ε , она должна принимать, по крайней мере в точке $\mathbf{k}_0$, экстремальное значение. Возможно, однако, и это подтверждено для ряда кристаллов конкретными расчетами и данными опыта, что энергия экстремальна и в других точках зоны Бриллюена. В таких точках линейный по $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$ член в (42) исчезает и энергию вблизи $\mathbf{k}_0$ формально можно представить аналогично энергии свободной частицы с анизотропной (в общем случае) массой:

$$\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}} = \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} + \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij}^{(\alpha)} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)_i (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)_j. \quad (43)$$

Отсюда и из (42) определяется тензор обратной эффективной массы

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}}}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{1}{m} \delta_{ij} + \frac{2}{m^2} \sum'_{\alpha'} \frac{p_{\alpha\alpha',i} p_{\alpha\alpha',j}}{\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0}}. \quad (44)$$

В дальнейшем формулами (42) — (44) будем пользоваться для описания кинетических эффектов в невырожденных полупроводниках, несмотря на то что они получены только с точностью до членов порядка $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2$. Такая точность оказывается вполне достаточной, так как при кинетической энергии, которой обладают большинство носителей в невырожденных полупроводниках $\varepsilon \sim T$ (в энергетических единицах температуры), $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ по порядку величины равно $(3-5) \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$, что составляет лишь совсем незначительную часть возможных значений $|\mathbf{k}| \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$ в зоне Бриллюена. Поэтому фактически основная масса электронов находится у дна зоны проводимости (или основная масса незаполненных состояний — у потолка валентной зоны). Для описания таких электронов квадратичное приближение (43) является хорошим⁸ и удобно воспользоваться аналогией с описанием свободных частиц. Влияние кристаллической структуры и кристаллического потенциала проявляется при этом в значении эффективной массы (44).

Тензор обратной эффективной массы (44) удобно анализировать

⁸ Указанное значение $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ получается, например, при $T \sim 100 \text{ К}$ и $m^* \sim 10^{-27} \text{ г}$. В вырожденных полупроводниках примерно такое же значение $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ для частиц на уровне Ферми получается при $T = 0 \text{ К}$ и концентрации 10^{18} см^{-3} . Поэтому выражения (42) — (44) часто сохраняют силу и для вырожденных полупроводников.

после приведения его к главным осям. Компоненты тензора тогда имеют вид

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ii}^{(\alpha)} = \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{\alpha'}' \frac{|p_{\alpha\alpha',i}|^2}{\varepsilon_{\alpha k_0} - \varepsilon_{\alpha' k_0}}. \quad (45)$$

Равенства (44) и (45) называют правилом сумм для эффективной массы. Из (45) видно, что компоненты тензора эффективной массы могут быть и больше и меньше массы свободного электрона, а также положительными и отрицательными.

Часто в сумме (45) основную роль играет лишь одно слагаемое, обусловленное взаимодействием с ближайшей к α зоной. Так как $|p_{\alpha\alpha',i}|^2 > 0$, то знак второго слагаемого (45) определяется положением соседней зоны. Если эта зона, эффективно влияющая на данную, расположена ниже рассматриваемой, то знак положителен и $m_{ii}^* < m$. При противоположном расположении зон, компоненты тензора эффективной массы больше m или даже отрицательны. В ряде полупроводников (например, InSb) эффективная масса значительно меньше массы свободного электрона. В таких полупроводниках ширина запрещенной зоны, как правило, мала.

Значения энергии (42), (43) были получены в предположении, что в точке k_0 (экстремальной точке) энергия электрона в α -й зоне отлична от энергии в других зонах. Если это не так и в точке k_0 смыкается несколько зон, то задача становится вырожденной и требует другого решения. В отличие от (42), энергия тогда определяется всеми матричными элементами детерминанта (39), непосредственно связанными со смыкающимися зонами. Например, при слиянии в точке k_0 двух зон α и β ($\varepsilon_{\alpha k_0} = \varepsilon_{\beta k_0} = \varepsilon_{k_0}$) энергия ε при $k \rightarrow k_0$ согласно (39), (40) находится из уравнения

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (k - k_0)^2 + \frac{\hbar}{m} (k - k_0) p_{\alpha\alpha} - \varepsilon, & \frac{\hbar}{m} (k - k_0) p_{\alpha\beta} \\ \frac{\hbar}{m} (k - k_0) p_{\beta\alpha}, & \varepsilon_{k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (k - k_0)^2 + \frac{\hbar^2}{m} (k - k_0) p_{\beta\beta} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad (46)$$

корни которого равны:

$$\begin{aligned} \varepsilon = \varepsilon_{k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (k - k_0)^2 + \frac{\hbar}{2m} (k - k_0) (p_{\alpha\alpha} + p_{\beta\beta}) \pm \\ \pm \frac{\hbar}{2m} \sqrt{[(k - k_0) (p_{\alpha\alpha} - p_{\beta\beta})]^2 + 4 |(k - k_0) p_{\alpha\beta}|^2}. \end{aligned} \quad (47)$$

Отсюда видно, что при слиянии зон энергия ε в каждой из них вблизи точки слияния уже не является больше аналитической функцией волнового вектора. При отступлении от точки слияния зоны расщепляются согласно формуле (47) и энергия в каждой зоне снова становится аналитической функцией волнового вектора.

Учтем теперь наличие у электрона спина и спин-орбитальное взаимодействие. Обычно это взаимодействие достаточно слабо

и им можно пренебречь. В некоторых случаях, однако, оно играет особую роль и, в частности, служит причиной дополнительного расщепления зон. Гамильтониан (18) после включения в него члена, описывающего спин-орбитальное взаимодействие, имеет вид (см. [13])

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) - \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} [\hat{\sigma}, \nabla V(\mathbf{r})] \nabla, \quad (48)$$

где $\hat{\sigma}$ — спиновый оператор Паули:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Учет спин-орбитального взаимодействия, как видно из (48), не нарушает трансляционной инвариантности гамильтониана. Поэтому его собственными функциями остаются функции Блоха, периодическая по пространству часть которых определяется уравнением

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta + 2i\mathbf{k}\nabla - k^2) + V(\mathbf{r}) - \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} [\hat{\sigma}, \nabla V(\mathbf{r})] (i\mathbf{k} + \nabla) \right\} u_{\alpha\mathbf{k}s} = \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}s} u_{\alpha\mathbf{k}s}. \quad (50)$$

Здесь s описывает спиновое состояние (оно, вообще говоря, не является собственным состоянием оператора $\hat{\sigma}$) и принимает два значения: $+$ и $-$.

Замена в уравнении (49) знака $\mathbf{k}$ в общем случае не приводит, как было ранее, к уравнению, совпадающему с уравнением для комплексно сопряженной функции $u_{\alpha\mathbf{k}s}^*$. Спин-орбитальное взаимодействие нарушает, следовательно, четную зависимость энергии от волнового вектора. Можно показать, что при произвольной симметрии кристалла вместо равенства $\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}s} = \varepsilon_{\alpha, -\mathbf{k}s}$ имеет место более сложное равенство $\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}+} = \varepsilon_{\alpha, -\mathbf{k}-}$. Таким образом, энергия не изменяет своего значения только при одновременном изменении знаков у волнового вектора и спиновой координаты. Если же кристалл обладает центром инверсии и потенциальная энергия $V(\mathbf{r})$ инвариантна относительно изменения знака $\mathbf{r}$, то четность энергии относительно $\mathbf{k}$ сохраняется также и при учете спин-орбитального взаимодействия. В этом можно убедиться, если в уравнении (50) после замены $\mathbf{k}$ на $-\mathbf{k}$ перейти к системе координат $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ ⁹.

При указанной замене уравнения, определяющие функции $u_{\alpha\mathbf{k}s}$ и $u_{\alpha, -\mathbf{k}s}$, в точности совпадают и, следовательно, совпадают их собственные значения $\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}s} = \varepsilon_{\alpha, -\mathbf{k}s}$. Отсюда, а также из приведенного выше равенства $\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}+} = \varepsilon_{\alpha, -\mathbf{k}-}$ можно заключить, что в кри-

⁹ При преобразовании системы координат $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ оператор Δ остается неизменным, оператор ∇ меняет знак, а оператор $\hat{\sigma}$ как оператор момента количества движения (т. е. оператор типа $[\mathbf{r}\nabla]$) не изменяется.

сталлах с центром инверсии энергия является четной функцией как волнового вектора, так и спинового состояния. Иными словами, наличие центра инверсии удваивает в каждой точке зоны Бриллюэна число состояний с одинаковой энергией и по крайней мере в точке $k = 0$ определяет наличие экстремума энергии. Отсутствие центра инверсии расщепляет зоны с противоположными спинowymi состояниями и, в принципе, смещает положение экстремума (например, в In Sb). Впрочем, это смещение обычно крайне незначительно и во многих задачах им с полным основанием можно пренебречь.

§ 4. ИМПУЛЬС И СКОРОСТЬ ЗОННОГО ЭЛЕКТРОНА. МЕТОД ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ

При теоретическом рассмотрении электропроводности и других электрофизических свойств кристаллов удобно характеризовать электроны их значениями импульса и скорости. Разумеется, зонные электроны, описываемые функциями Блоха, т. е. модулированными по решетке плоскими волнами, не имеют определенных значений импульса и скорости. Можно находить лишь средние значения этих величин в смысле выражений, аналогичных (41).

Вычислим сперва среднюю скорость электрона. В соответствии с обычной рецептурой квантовой механики она определяется интегралом

$$\begin{aligned} v_{\alpha k} &= \langle \dot{r} \rangle_{\alpha k} = \frac{i}{\hbar} \int \Psi_{\alpha k}^* [H, r] \Psi_{\alpha k} d\tau = \\ &= \frac{i}{\hbar V} \int u_{\alpha k}^* e^{-ikr} [H, r] e^{ikr} u_{\alpha k} d\tau, \end{aligned} \quad (51)$$

где H — оператор Гамильтона (18) и интегрирование ведется по основной области кристалла. Для простоты здесь пренебрегаем спин-орбитальным взаимодействием, учет которого не представляет принципиальных затруднений.

Преобразуем правую часть (51), воспользовавшись следующим легко доказуемым тождеством [14]:

$$e^{-ikr} [H, r] e^{ikr} = -i \nabla_k (e^{-ikr} H e^{ikr}), \quad (52)$$

где ∇_k — операция градиента в пространстве волнового вектора. После этого скорость $v_{\alpha k}$ представится выражением

$$v_{\alpha k} = \frac{1}{\hbar V} \int u_{\alpha k}^* \nabla_k (e^{-ikr} H e^{ikr}) u_{\alpha k} d\tau. \quad (53)$$

Вместо $H e^{ikr}$ запишем

$$H e^{ikr} = e^{ikr} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta + 2ik \nabla - k^2) + V(r) \right\} \equiv e^{ikr} H_u, \quad (54)$$

где через H_u обозначен гамильтониан, действующий на периодическую часть функции Блоха. Согласно (29) $H_u u_{\alpha k} = \varepsilon_{\alpha k} u_{\alpha k}$.

Подставим (54) в формулу (53):

$$v_{\alpha k} = \frac{1}{\hbar V} \int u_{\alpha k}^* (\nabla_k H_u) u_{\alpha k} d\tau. \quad (55)$$

Операцию ∇_k здесь можно вынести за знак интеграла. Действительно, так как

$$\int [(\nabla_k u_{\alpha k}^*) u_{\alpha k} + u_{\alpha k}^* (\nabla_k u_{\alpha k})] d\tau = \nabla_k \int |u_{\alpha k}|^2 d\tau = 0$$

и $\varepsilon_{\alpha k}$ является собственным значением оператора H_u , то

$$\begin{aligned} \int u_{\alpha k}^* (\nabla_k H_u) u_{\alpha k} d\tau &= \nabla_k \int u_{\alpha k}^* H_u u_{\alpha k} d\tau - \\ &- \int [(\nabla_k u_{\alpha k}^*) H_u u_{\alpha k} + u_{\alpha k}^* H_u \nabla_k u_{\alpha k}] d\tau = \\ &= \nabla_k \int u_{\alpha k}^* H_u u_{\alpha k} d\tau - \varepsilon_{\alpha k} \int [(\nabla_k u_{\alpha k}^*) u_{\alpha k} + u_{\alpha k}^* \nabla_k u_{\alpha k}] d\tau = \\ &= \nabla_k \int u_{\alpha k}^* \varepsilon_{\alpha k} u_{\alpha k} d\tau. \end{aligned}$$

Окончательно согласно (55) и условиям нормировки (33) — (35) получаем

$$v_{\alpha k} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \varepsilon_{\alpha k}. \quad (56)$$

Как видим, средняя квантовомеханическая скорость зонного электрона является не чем иным, как групповой скоростью пакета волн. Независимо от конкретного вида закона дисперсии, т. е. закона, определяющего зависимость энергии электрона от волнового вектора, скорость электрона в кристалле и скорость свободного электрона в вакууме выражаются через энергию одинаковым образом. Такое совпадение, между прочим, позволяет также предположить, что $\hbar k$ выражает средний квантовомеханический импульс зонного электрона в полной аналогии с импульсом свободного электрона, описываемого плоской волной e^{ikr} .

Приведенное предположение $p = \hbar k$ можно обосновать и уточнить следующим простым доказательством. Известно, что волновые пакеты, составленные из функций, полученных из уравнения Шредингера, ведут себя аналогично классическим частицам. Поэтому средние квантовомеханические величины, характеризующие зонный электрон, могут быть найдены из соответствующих уравнений классической механики. Когда к кристаллу приложено поле, вызывающее силу F , действующую на электрон, то в соответствии с законами механики изменение энергии зонного электрона за единицу времени измеряется работой, выполненной силой F за то же время, т. е.

$$\frac{d\varepsilon_{\alpha k}}{dt} = v_{\alpha k} F. \quad (57)$$

Здесь принято, что сила F достаточно плавная и за рассматриваемый отрезок времени не переводит электрон из одной зоны в дру-

гую. Поэтому изменение энергии электрона должно связываться лишь с изменением его волнового вектора. Вместо формулы (57) можно, следовательно, записать

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}} = \mathbf{v}_{\alpha\mathbf{k}} \mathbf{F}. \quad (58)$$

Такое выражение должно быть справедливым при любом направлении и величине (в рамках сделанного выше предположения) силы $\mathbf{F}$. Отсюда и из (56) непосредственно получается формула

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}, \quad (59)$$

аналогичная известной формуле механики $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$.

Чтобы записать теперь соотношение между средним импульсом и волновым вектором, учтем, что только в точке экстремума энергии удобно считать импульс равным нулю. Если экстремум находится в точке $\mathbf{k}_0$, то импульс согласно (59) равен

$$\mathbf{p}_{\mathbf{k}} = \hbar (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0). \quad (60)$$

Когда экстремум находится в центре зоны Бриллюэна ($\mathbf{k}_0 = 0$), импульс зонного электрона $\mathbf{p}_{\mathbf{k}} = \hbar \mathbf{k}$ формально совпадает с импульсом свободного электрона. Нужно, впрочем, иметь в виду, что в общем случае импульс электрона в кристалле не выражается линейно через компоненты скорости $\mathbf{v}_{\alpha\mathbf{k}}$, как в классической механике. Скорость $\mathbf{v}_{\alpha\mathbf{k}}$ при произвольном законе дисперсии по формуле (56) сложным образом зависит от $\mathbf{k}$ и может даже отличаться от него знаком.

Рассмотрим теперь подробнее поведение кристаллического электрона в поле внешней силы $\mathbf{F}$. Пусть эта сила описывается градиентом потенциальной энергии $U(\mathbf{r})$. Условие плавности силы $\mathbf{F}$, а значит, и плавности $U(\mathbf{r})$ нужно понимать в смысле неравенства

$$a_i \nabla U(\mathbf{r}) \leq U(\mathbf{r}) \quad (i = 1, 2, 3), \quad (61)$$

где a_i — базисные векторы элементарной ячейки. Это неравенство означает, что потенциальная энергия электрона во внешнем поле $U(\mathbf{r})$, в противоположность потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$, лишь незначительно изменяется в пределах элементарной ячейки. На практике неравенство (61) всегда имеет место с большим запасом «прочности».

Уравнение Шредингера, описывающее движение электрона в кристалле при наличии внешнего потенциала, имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}). \quad (62)$$

Хотя в среднем при неравенстве (61) имеет место также и неравенство $|\nabla U(\mathbf{r})| \ll |\nabla V(\mathbf{r})|$, рассматривать $U(\mathbf{r})$ в уравнении (62) как малое возмущение и пользоваться теорией возмущений не представляется возможным. Это объясняется прежде всего тем, что спектр энергии невозмущенного гамильтониана (62) квазинепрерывен, что уже само по себе исключает применение теории возмущений. Практически воспользоваться теорией возмущений нельзя еще и по той простой причине, что полное решение невозмущенной задачи не известно. Ведь даже явный вид потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$ пока еще плохо известен, а попытки определения ее для некоторых кристаллов потребовали достаточно громоздких вычислений. Не известны поэтому волновые функции $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и энергия $\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}}$ невозмущенной задачи для всех значений α и $\mathbf{k}$. Полученные данные о законе дисперсии вблизи дна зоны проводимости или потолка валентной зоны, разумеется, недостаточны для их использования в аналитическом решении задачи.

Заманчивой представляется возможность такого приближенного решения уравнения (62), которое позволило бы вообще исключить в нем кристаллический потенциал $V(\mathbf{r})$ и заменить одновременно массу свободного электрона на некоторую эффективную массу (или тензор эффективной массы) электрона в кристалле. Обоснование такой возможности и пределы ее применимости на примере задачи о поляроне были даны Пекаром [15] в предложенном им методе «эффективной массы». Мы рассмотрим сейчас этот метод применительно к кристаллам с произвольным законом дисперсии, следуя в основном работе [12].

Разложим функцию $\psi(\mathbf{r})$ по функциям Латтинжера — Кона (32):

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha'\mathbf{k}'} a_{\alpha'\mathbf{k}'} \chi_{\alpha'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha'\mathbf{k}'} a_{\alpha'\mathbf{k}'} \overline{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}_0)\mathbf{r}}} \varphi_{\alpha'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (63)$$

и подставим в уравнение (62). Умножим далее обе части уравнения на $\chi_{\alpha\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ и проинтегрируем по основной области кристалла. Учтя ортонормировку функций $\chi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, получим

$$\sum_{\alpha'\mathbf{k}'} (H^{(0)} + U)_{\alpha\mathbf{k}, \alpha'\mathbf{k}'} a_{\alpha'\mathbf{k}'} = \varepsilon a_{\alpha\mathbf{k}}. \quad (64)$$

Матричный элемент невозмущенного гамильтониана $H_{\alpha\mathbf{k}, \alpha'\mathbf{k}'}^{(0)}$ имеет вид

$$H_{\alpha\mathbf{k}, \alpha'\mathbf{k}'}^{(0)} = \int e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\mathbf{r}} \varphi_{\alpha\mathbf{k}_0}^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}_0)\mathbf{r}} \varphi_{\alpha'\mathbf{k}_0} d\tau. \quad (65)$$

По аналогии с доказательством, приведенным в приложении А, легко убедиться, что матричный элемент (65) отличен от нуля только при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Простые вычисления дают

$$H_{\alpha\mathbf{k}, \alpha'\mathbf{k}'}^{(0)} = \left[\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right] \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \mathbf{p}_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (66)$$

где $\mathbf{p}_{\alpha\alpha'}$ — матричный элемент импульса (41).

Для вычисления матричного элемента $U_{\alpha k, \alpha' k'}$ наложим на потенциальную энергию $U(\mathbf{r})$ (как и ранее на волновые функции $\varphi_{\alpha k}$) условия цикличности Борна — Кармана. Это позволит нам разложить $U(\mathbf{r})$ в ряд Фурье и представить в виде

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (67)$$

где

$$U_{\mathbf{q}} = \frac{1}{V} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d\tau \quad (68)$$

(напомним, что здесь V — объем основной области кристалла).

Матричный элемент $U_{\alpha k, \alpha' k'}$ после учета (67), а также (32) и (34) записывается так:

$$U_{\alpha k, \alpha' k'} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \int U_{\mathbf{q}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q})\mathbf{r}} u_{\alpha k_0}^*(\mathbf{r}) u_{\alpha' k_0}(\mathbf{r}) d\tau. \quad (69)$$

Целесообразно произведение $u_{\alpha k_0}^* u_{\alpha' k_0}$, как периодическую функцию с периодом элементарной ячейки, разложить в ряд

$$u_{\alpha k_0}^*(\mathbf{r}) u_{\alpha' k_0}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} B_{\mathbf{g}}^{\alpha\alpha'} e^{i\mathbf{k}_g \mathbf{r}}, \quad (70)$$

где $\mathbf{k}_g$ — уже встречавшийся ранее целочисленный вектор обратной решетки, а коэффициент $B_{\mathbf{g}}^{\alpha\alpha'}$ равен

$$B_{\mathbf{g}}^{\alpha\alpha'} = \frac{1}{v_0} \int_{(v_0)} e^{-i\mathbf{k}_g \mathbf{r}} u_{\alpha k_0}^*(\mathbf{r}) u_{\alpha' k_0}(\mathbf{r}) d\tau. \quad (71)$$

После подстановки (70) в (69) получим

$$U_{\alpha k, \alpha' k'} = \sum_{\mathbf{g}} B_{\mathbf{g}}^{\alpha\alpha'} U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{k}_g}. \quad (72)$$

Выражение (72) можно приближенно заменить более простым, если учесть, что функция $U(\mathbf{r})$ является плавной функцией, почти не изменяющейся (см. (61)) в пределах элементарной ячейки. У такой функции значительны только те коэффициенты Фурье (68), у которых модуль $\mathbf{q}$ близок к нулю или, по крайней мере, меньше модуля целочисленного вектора обратной решетки. Поскольку в методе эффективной массы нас интересуют (как отмечалось выше) только электроны с волновыми векторами $\mathbf{k}$, близкими к $\mathbf{k}_0$, то $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ тоже значительно меньше целочисленного вектора обратной решетки¹⁰. Поэтому в сумме (72) основную роль играет только одно слагаемое и с достаточной точностью можно положить $U_{\alpha k, \alpha' k'} \cong B_0^{\alpha\alpha'} U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$. Согласно (71) и (33) — (35) $B_0^{\alpha\alpha'} = \delta_{\alpha\alpha'}$. Отсюда

$$U_{\alpha k, \alpha' k'} \cong U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (73)$$

¹⁰ Ниже будет видно, что метод эффективной массы вообще оправдан только тогда, когда энергия электрона близка к экстремальной.

Система уравнений (64) после подстановки в нее матричных элементов (66) и (73) приобретает вид

$$\left[\varepsilon_{\alpha \mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right] a_{\alpha \mathbf{k}} + \\ + \sum_{\alpha'} \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \mathbf{p}_{\alpha \alpha'} a_{\alpha' \mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'} a_{\alpha \mathbf{k}'} = \varepsilon a_{\alpha \mathbf{k}}. \quad (74)$$

Как видим, каждое уравнение системы (74) содержит слагаемые, описывающие взаимодействие данной зоны со всеми остальными. Между тем, рассматривая движение электрона во внешнем поле $U(\mathbf{r})$, было бы желательно исключить это взаимодействие и получить вместо системы только одно уравнение, описывающее электрон в данной зоне α . Точно реализовать подобную программу, разумеется, нельзя. Приближенно, однако, ее реализовать оказывается можно. Для этого запишем сперва систему (74) в матричном виде

$$H A \equiv (H_1^{(0)} + H_2^{(0)} + U) A = \varepsilon A \quad (75)$$

и осуществим унитарное преобразование

$$A = e^S C, \quad \mathcal{H} = e^{-S} H e^S, \quad \mathcal{H} C = \varepsilon C. \quad (76)$$

В (75) компонентами вектора A являются коэффициенты $a_{\alpha \mathbf{k}}$, а матричными элементами операторов $H_1^{(0)}$, $H_2^{(0)}$ и U — соответственно первое слагаемое (66), второе слагаемое (66) и (73). Матрицу S выберем так, чтобы ее элементы были пропорциональны $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$. Поскольку в методе эффективной массы учитываются члены не выше второй степени параметра $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$, целесообразно в (76) разложить оператор $\mathcal{H}$ по степеням S и ограничиться членами порядка S^2 включительно:

$$\mathcal{H} = H + [H, S] + \frac{1}{2} [[H, S], S] + \dots = \\ = H_1^{(0)} + H_2^{(0)} + U + [H_1^{(0)}, S] + [H_2^{(0)}, S] + [U, S] + \frac{1}{2} \times \\ \times [[H_1^{(0)}, S], S] + \frac{1}{2} [[U, S], S] + \dots \quad (77)$$

Указанная задача выбора матрицы S удовлетворится, если положить в (77)

$$H_2^{(0)} + [H_1^{(0)}, S] = 0. \quad (78)$$

Это условие в первом приближении по $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$ исключает в уравнении (76) все матричные элементы, связанные с межзональными переходами. Из (78) находим

$$S_{\alpha \mathbf{k}, \alpha' \mathbf{k}'} = - \frac{\hbar (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \mathbf{p}_{\alpha \alpha'}}{m (\varepsilon_{\alpha \mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha' \mathbf{k}_0})} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \quad (\alpha \neq \alpha'). \quad (79)$$

В дальнейшем примем, что точка $\mathbf{k}_0$ соответствует положению экстремума энергии в α -й зоне. Ведь именно вблизи экстремума

(дна зоны проводимости или потолка валентной зоны) имеет смысл применение метода эффективной массы. Поэтому, считая точку $\mathbf{k}_0$ экстремальной, нужно иметь в виду, что $p_{\alpha\alpha} = 0$ (см. (42)), а значит, и матричный элемент $S_{\alpha\mathbf{k},\alpha'\mathbf{k}'}$ тоже равен нулю.

Дальнейшие вычисления дают

$$[H_2^{(0)}, S] + \frac{1}{2} [[H_1^{(0)}, S], S] = \frac{1}{2} [H_2^{(0)}, S], \quad (80)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [H_2^{(0)}, S]_{\alpha\mathbf{k},\alpha'\mathbf{k}'} &= \frac{\hbar^2}{2m^2} \sum_{\alpha''}' ((\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha\alpha''}) ((\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha''\alpha'}) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha''\mathbf{k}_0}} + \frac{1}{\varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha''\mathbf{k}_0}} \right) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \end{aligned} \quad (81)$$

$$[U, S]_{\alpha\mathbf{k},\alpha'\mathbf{k}'} = \frac{\hbar}{m} \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha\alpha'}}{\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0}} U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}. \quad (82)$$

Знаменатели выражений (81), (82) содержат разности энергии между различными зонами при одном и том же значении волнового вектора. Для очень широкого класса полупроводников эта разность значительно больше средней кинетической энергии электронов или дырок. Поэтому матричный элемент (82) намного меньше (73), и, по крайней мере, с точностью до членов порядка $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2$ им можно пренебречь.

Формулы (77) — (82) позволяют теперь уравнения (74) записать приближенно, с точностью до членов порядка $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2$ включительно:

$$\begin{aligned} &\left\{ \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 + \frac{\hbar^2}{m^2} \times \right. \\ &+ \left. \sum_{\alpha''}' \frac{[(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha\alpha''}]^* [(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) p_{\alpha\alpha''}]}{\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha''\mathbf{k}_0}} \right\} C_{\alpha\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} C_{\alpha\mathbf{k}'} = \varepsilon C_{\alpha\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (83)$$

Здесь учтено, что $p_{\alpha\alpha''}^* = p_{\alpha''\alpha}$, а также и то, что из матричных элементов (81) основной вклад вносит только диагональный элемент.

Выражение в фигурных скобках (83)¹¹ является не чем иным, как определением энергии $\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}}$ (42) в α -й зоне вблизи ее экстремума в точке $\mathbf{k}_0$. Это позволяет записать уравнение (83) в более компактном виде

$$\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}} C_{\alpha\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} C_{\alpha\mathbf{k}'} = \varepsilon C_{\alpha\mathbf{k}}. \quad (84)$$

¹¹ Формально в уравнение (83) должны войти также и междוזонные матричные элементы (81): $\frac{1}{2} \sum_{\alpha''}' [H_2^{(0)}, S]_{\alpha\mathbf{k},\alpha'\mathbf{k}'} C_{\alpha'\mathbf{k}'}$. С помощью унитарного преобразования, аналогичного (71), они могут быть устранены и заменены выражениями более высокого порядка по параметру $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$. Так как такие выражения в методе эффективной массы не учитываются, то они и не включены в уравнение (83).

Удобно далее перейти от представления $C_{\alpha k}$ к координатному. Пусть коэффициенты $C_{\alpha k}$ являются Фурье-компонентами некоторой функции $f(\mathbf{r})$, которую при достаточно большом объеме основной области кристалла тоже можно считать удовлетворяющей условиям цикличности. Итак, пусть

$$f_{\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\alpha k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (85)$$

Умножим уравнение (83) на $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ и просуммируем по всем значениям $\mathbf{k}$ в пределах первой зоны Бриллюэна. Учтем, что

$$\sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) C_{\alpha k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = (-i\nabla - \mathbf{k}_0) \sum_{\mathbf{k}} C_{\alpha k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = (-i\nabla - \mathbf{k}_0) f_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (86)$$

и что согласно (69), (73)

$$\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} C_{\alpha k'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\alpha k'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} = U(\mathbf{r}) f_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (87)$$

Вместо (83) получим такое уравнение:

$$\left\{ \varepsilon_{\alpha k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} (-i\nabla - \mathbf{k}_0)^2 + \frac{\hbar^2}{m^2} \times \right. \\ \left. \times \sum_{\alpha'} \frac{[(-i\nabla - \mathbf{k}_0) \mathbf{p}_{\alpha\alpha'}^*] [(-i\nabla - \mathbf{k}_0) \mathbf{p}_{\alpha\alpha'}]}{\varepsilon_{\alpha k_0} - \varepsilon_{\alpha' k_0}} + U(\mathbf{r}) \right\} f_{\alpha}(\mathbf{r}) = \varepsilon f_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (88)$$

Это уравнение и есть уравнение метода эффективной массы. В более удобном виде его можно записать так:

$$[\varepsilon_{\alpha}(-i\nabla) + U(\mathbf{r})] f_{\alpha}(\mathbf{r}) = \varepsilon f_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (89)$$

Здесь $\varepsilon_{\alpha}(-i\nabla)$ — энергия (43), в выражении которой переменная $\mathbf{k}$ заменена оператором $(-i\nabla)$. Если, например, дно зоны проводимости, от которого отсчитывается энергия, находится в центре зоны Бриллюэна ($\mathbf{k}_0 = 0$) и эффективная масса m^* изотропна, то уравнение (89) по виду совпадает с обычным уравнением Шредингера для электрона в поле $U(\mathbf{r})$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] f_{\alpha}(\mathbf{r}) = \varepsilon f_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (90)$$

При более сложном законе дисперсии тоже нетрудно записать дифференциальное уравнение, аналогичное (90). В это уравнение вместо скалярной эффективной массы в общем случае будет входить тензор эффективной массы (44). После приведения тензора к главным осям и замены $f_{\alpha}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}} f_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{r})$ оно формально лишь слегка будет отличаться от (90):

$$\left[-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i^*} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + U(\mathbf{r}) \right] f_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{r}) = \varepsilon f_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{r}). \quad (91)$$

Примечательно, что уравнения (89), (91) описывают движение электрона лишь в одной зоне. Метод эффективной массы действительно позволил устранить из расчета кристаллический потенциал

$V(\mathbf{r})$. Значения компонент тензора эффективной массы для многих кристаллов надежно определены. Эти значения нами будут использованы в ряде задач, в которых электроны кристалла, в соответствии с методом эффективной массы, рассматриваются как свободные частицы с известной (в общем случае анизотропной) эффективной массой. При отсутствии внешнего поля $U(\mathbf{r})$ такие электроны описываются волновой функцией типа $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, при наличии внешнего поля — функцией (63), которая, с учетом того, что согласно (76), (79) $a_{\alpha\mathbf{k}} \approx C_{\alpha\mathbf{k}}$, имеет вид

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha'\mathbf{k}'} a_{\alpha'\mathbf{k}'} \chi_{\alpha'\mathbf{k}'} \approx \sum_{\alpha'\mathbf{k}'} C_{\alpha'\mathbf{k}'} \chi_{\alpha'\mathbf{k}'} = \sum_{\alpha'\mathbf{k}'} C_{\alpha'\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}_0)\mathbf{r}} \varphi_{\alpha'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \\ &= \sum_{\alpha'} f_{\alpha'}^{(1)}(\mathbf{r}) \varphi_{\alpha'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (92)$$

Здесь учтены еще разложение (85) и связь между функциями $f_{\alpha'}(\mathbf{r})$ и $f_{\alpha'}^{(1)}(\mathbf{r})$.

Формула (92), как ясно из вывода уравнений (88)—(90), имеет смысл в том случае, когда (при отсутствии вырождения зон в точке $\mathbf{k}_0$) коэффициенты $C_{\alpha'\mathbf{k}}$ отличны от нуля лишь при одном значении α . Поэтому, рассматривая движение электрона в определенной α -й зоне, нужно принять

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = f_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{r}) \varphi_{\alpha\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (93)$$

Изложенный метод легко обобщается на случай, когда наряду с постоянным во времени внешним полем к кристаллу приложено еще переменное электромагнитное поле, описываемое вектор-потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Уравнение Шредингера в такой задаче имеет вид

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (94)$$

Волновую функцию $\psi(\mathbf{r}, t)$ здесь, как и выше, можно представить рядом (63) с той разницей, что коэффициенты $a_{\alpha'\mathbf{k}'}$ теперь нужно считать зависящими от времени. Рецепт вычислений остается прежней. Дополнительные слагаемые в уравнениях (74), (83), возникшие из-за наличия $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, легко находятся по аналогии. Приведем в качестве примера матричный элемент $S_{\alpha\mathbf{k}, \alpha'\mathbf{k}'}$ матрицы преобразования S :

$$S_{\alpha\mathbf{k}, \alpha'\mathbf{k}'} = \frac{\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \mathbf{p}_{\alpha'\alpha}}{m(\varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0})} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{e}{mc} \cdot \frac{\mathbf{A}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}(t) \mathbf{p}_{\alpha\alpha'}}{\varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0}} \quad (\alpha \neq \alpha'), \quad (95)$$

где $\mathbf{A}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}(t)$ — Фурье-компонента $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$.

После несложных вычислений и перехода к координатному представлению приходим к уравнению (88), дополненному слагаемыми, содержащими $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$:

$$\left\{ \varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(-i\nabla + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} - \mathbf{k}_0 \right)^2 + \right.$$

$$\begin{aligned}
& \left[\left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} - \mathbf{k}_0 \right) \mathbf{p}_{\alpha\alpha'} \right] \times \\
& + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\alpha'}' \frac{\times \left[\left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} - \mathbf{k}_0 \right) \mathbf{p}_{\alpha\alpha'} \right]}{\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0}} + U(\mathbf{r}) \Big\} f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \\
& = i\hbar \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t}. \quad (96)
\end{aligned}$$

Фигурная скобка в (96) при $U(\mathbf{r}) = 0$ совпадает с энергией электрона (43) в α -й зоне, если заменить переменную $\mathbf{k}$ в (43) на операторную переменную $-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}$. Поэтому более компактно уравнение (96) удобно записать так:

$$[\varepsilon_{\alpha} + U(\mathbf{r})] f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t}; \quad \varepsilon_{\alpha} \equiv \varepsilon_{\alpha} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right). \quad (97)$$

Итак, в случае переменного (в пространстве и времени) электромагнитного поля метод эффективной массы тоже приводит к уравнению Шредингера с устраненным кристаллическим потенциалом $V(\mathbf{r})$. Необходимо только, чтобы электромагнитное поле было достаточно плавной в пространстве функцией (в смысле условия (61)) и чтобы характерная частота ω изменения $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ во времени удовлетворяла неравенству

$$\left| \frac{\hbar\omega}{\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0}} \right| \ll 1. \quad (98)$$

Энергетический зазор $|\varepsilon_{\alpha\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\alpha'\mathbf{k}_0}|$, как уже упоминалось, должен значительно превосходить среднюю кинетическую энергию ϵ . При наличии магнитного поля он должен также быть больше расстояния между уровнями Ландау.

Если энергетический зазор между данной зоной и ближайшей к ней достаточно мал по сравнению с энергетическим расстоянием до других зон, метод эффективной массы может быть обобщен. В этом случае условие (98) следует понимать как малость $\hbar\omega$ по сравнению с расстоянием к более далеким зонам. Нам, впрочем, в дальнейшем такое обобщение не понадобится. Читатель может детально ознакомиться с ним, например, по монографии [16].

§ 5. ЗОННАЯ СТРУКТУРА НЕКОТОРЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Как можно заключить из предыдущего изложения, фундаментальную роль в теории электронных процессов в кристаллах играет знание закона дисперсии энергии электронов, т. е. закона, определяющего зависимость энергии электрона от его волнового вектора. Решение широкого класса задач в первую очередь упирается в необходимость этого знания. Между тем теоретические вычисле-

ния $\epsilon_{\alpha}(\mathbf{k})$, как правило, связаны со значительными, часто не только принципиальными, но и чисто техническими трудностями. Поэтому в каждом конкретном случае для нахождения $\epsilon_{\alpha}(\mathbf{k})$ наряду с теоретическими построениями широко используются данные эксперимента.

В настоящее время уже накоплен и продолжает интенсивно накапливаться огромный экспериментальный материал по зонной структуре многих кристаллов. Сюда относятся данные по циклотронному резонансу, магнетосопротивлению, эффектам де-Гааза—ван Альфена, Шубникова — де-Гааза, оптическому поглощению и другие. Эти данные в сочетании с теоретико-групповыми соображениями позволили установить положения экстремумов в зонах проводимости и в валентной зоне, значения компонент тензора эффективной массы, ширину запрещенной зоны и ее температурную зависимость в полупроводниках типа алмаза, $A_{III}B_V$ и $A_{II}B_{VI}$, а также форму Ферми-поверхности у многих металлов. Широко исследуются основные характеристики более сложных полупроводников и полупроводников с исчезающей шириной запрещенной зоны.

Установлено, что практически у всех детально изученных полупроводников закон дисперсии энергии отличается от стандартного — параболического закона с изотропной эффективной массой $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$. Экстремумы энергии в зонах, соответствующие наименьшей энергии электронов проводимости (или наибольшей энергии в валентной зоне), не всегда находятся в точке $k = 0$, и эффективная масса не всегда изотропна. Начнем, однако, с рассмотрения полупроводников с изотропной эффективной массой у дна зоны проводимости и у потолка валентной зоны. К таким полупроводникам принадлежат, в частности, полупроводники $A_{III}B_V$, широко применяемые в различных областях науки и техники.

Кристаллическая структура $A_{III}B_V$ может быть описана двумя параллельно вставленными друг в друга гранецентрированными кубическими решетками — одна из атомов A , другая — из атомов B . Решетки сдвинуты друг относительно друга по пространственной диагонали куба на одну четверть длины этой диагонали в элементарном кубе. Зона Бриллюэна этих веществ, как и вообще кристаллов с гранецентрированной кубической решеткой, представляется четырнадцатигранником, изображенным на рис. 1. Центром инверсии решетка $A_{III}B_V$ не обладает.

Наиболее полное теоретическое рассмотрение зонной структуры полупроводников $A_{III}B_V$ и, в частности, InSb впервые было выполнено Кейном [17] в 1957 г. К этому времени уже было известно, что минимум энергии в зоне проводимости InSb дважды вырожден по спину и находится в центре зоны Бриллюэна (речь идет о нижайшем минимуме энергии в зоне проводимости). Были измерены эффективные массы у дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, ширина запрещенной зоны и ее температурная

зависимость, определены коэффициенты оптического поглощения в собственной области и многие другие характеристики материала. Все это позволило выбрать рациональный путь решения задачи, учесть, что малость ширины запрещенной зоны в InSb обуславливает взаимное влияние зон друг на друга и приобретает важное значение.

Исходя из сказанного, нужно заключить, что в задаче о зонной структуре уравнение Шредингера не может описывать состояние электрона в одной только зоне, а должно исходить из возможности учета суперпозиции состояний разных зон. Запишем поэтому уравнение (50) для пространственно периодической части функции Блоха $u_k(\mathbf{r})$ в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta + 2i\mathbf{k}\nabla) + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{4im^2c^2} [\sigma \nabla V(\mathbf{r})] (i\mathbf{k} + \nabla) \right\} u_k(\mathbf{r}) = \varepsilon'_k u_k(\mathbf{r}), \quad (99)$$

где

$$\varepsilon'_k = \varepsilon_k - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (100)$$

а ε_k — энергия состояния с волновым вектором $\mathbf{k}$.

Примем, следуя Кейну [17], что известны решения волнового уравнения

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right\} U_\alpha = \varepsilon_\alpha U_\alpha(\mathbf{r}), \quad (101)$$

и воспользуемся функциями $U_\alpha(\mathbf{r})$ в качестве базиса представления. Функции, относящиеся к зоне проводимости, обладают свойствами симметрии s -функций относительно всех преобразований симметрии группы тетраэдра. Они дважды вырождены по спину и будут обозначаться в дальнейшем как S_+ и S_- . Функции U_α , относящиеся к валентным зонам, обладают симметрией p -функций. Обозначим их $X_\pm, Y_\pm, Z_\pm$, имея в виду, что при преобразованиях симметрии группы тетраэдра они преобразуются как атомные p -функции x, y, z соответственно. Каждая из функций предполагается нормированной. Они дважды вырождены по спину, что, как и у s -функций, отмечается индексами $+$ и $-$.

На первых порах целесообразно в последнем слагаемом оператора (99) пренебречь $i\mathbf{k}$ по сравнению с ∇ . Такое пренебрежение оправдано тем, что импульс электрона в кристалле $\hbar\mathbf{k}$ значительно меньше атомного импульса $\mathbf{p}$ вблизи центра атома, где, собственно, и наиболее существенно спин-орбитальное взаимодействие. При необходимости в дальнейшем может быть внесена поправка, учитывающая вклад отброшенного слагаемого.

В соответствии со стандартной процедурой подставим линейную суперпозицию функций $S_\pm, X_\pm, Y_\pm, Z_\pm$ в уравнение (99) без отброшенного слагаемого и вычислим матрицу гамильтониана H на этих функциях. Удобнее, впрочем, в качестве базиса выбрать

следующие линейные сочетания указанных функций:

$$\begin{aligned} U_1 &= iS_-; \quad U_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_+ - iY_+); \quad U_3 = Z_-; \quad U_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_+ + iY_+); \\ U_5 &= iS_+; \quad U_6 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(X_- + iY_-); \quad U_7 = Z_+; \quad U_8 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_- - iY_-). \end{aligned} \quad (102)$$

Здесь верхний ряд функций и написанный под ними нижний ряд определяют соответственно вырожденные состояния. Наш выбор (102) позволяет частично диагонализировать восьмирядную матрицу гамильтониана и представить ее в квазидиагональном виде

$$\begin{bmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{bmatrix},$$

где H — четырехрядная матрица:

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon_s & 0 & \mathbf{kP} & 0 \\ 0 & \varepsilon_p - \frac{1}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta & 0 \\ \mathbf{kP} & \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta & \varepsilon_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_p + \frac{1}{3}\Delta \end{bmatrix}, \quad (103)$$

ε_s и ε_p — собственные значения гамильтониана (101), относящиеся соответственно к зоне проводимости и валентной зоне; $\mathbf{P}$ и Δ — матричные элементы, по определению равные:

$$\mathbf{P} = -\frac{\hbar^2}{m} \langle S | \nabla_z | Z \rangle, \quad (104)$$

$$\Delta = \frac{3\hbar^2}{4m^2c^2} \left\langle X \left| \frac{\partial V}{\partial x} \nabla_y - \frac{\partial V}{\partial y} \nabla_x \right| Y \right\rangle. \quad (105)$$

При вычислении матричных элементов (103) учитывался вид спиновых матриц (49), симметрия функций $U_i(\mathbf{r})$ и потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$ в кристалле InSb, а также и то, что для упрощения вычислений вектор $\mathbf{k}$ принимался направленным по оси OZ ¹².

Секулярное уравнение, соответствующее матрице (103), определяет в принятом приближении четыре собственных значения уравнения (99) по числу независимых базисных функций (102). Одно из них находится непосредственно:

$$\varepsilon'_k = \varepsilon_p + \frac{1}{3}\Delta. \quad (106)$$

Так как энергия (106) относится к энергии валентной полосы и не зависит от значения волнового вектора, целесообразно отождествить ее с положением потолка валентной зоны, т. е. положить

¹² Такое предположение не является ограничением общности. Если $\mathbf{k}$ не параллелен OZ , то соответствующим поворотом координатных осей можно снова придти к матрице (103).

$\epsilon'_k = -\epsilon_g$, где ϵ_g — ширина запрещенной зоны, и вести отсчет энергии от дна зоны проводимости. При этом согласно (106) следует

$$\epsilon_p = -\epsilon_g - \frac{1}{3}\Delta, \quad (107)$$

и по принятому теперь определению

$$\epsilon_s = 0. \quad (108)$$

Три остальных собственных значения секулярного уравнения (103) с учетом (107) и (108) находятся из кубического уравнения

$$\epsilon'_k (\epsilon'_k + \epsilon_g) (\epsilon'_k + \epsilon_g + \Delta) - k^2 P^2 \left(\epsilon'_k + \epsilon_g + \frac{2}{3}\Delta \right) = 0. \quad (109)$$

Корни этого уравнения определяют зависимость энергии ϵ'_k от волнового вектора в зоне проводимости, валентной зоне легких дырок и отщепленной из-за спин-орбитального взаимодействия валентной зоне. Для нас достаточно здесь не приводить точных значений ϵ'_k , а ограничиться такими приближенными формулами:

а) при малых k можно пользоваться приближением параболических зон; в этом приближении согласно (100), (106) и (109) энергия во всех четырех зонах представляется в виде

$$\epsilon_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{k^2 P^2}{3} \left(\frac{2}{\epsilon_g} + \frac{1}{\epsilon_g + \Delta} \right), \quad (110)$$

$$\epsilon_{v_1}(k) = -\epsilon_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (111)$$

$$\epsilon_{v_2}(k) = -\epsilon_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2}{3} \frac{k^2 P^2}{\epsilon_g}, \quad (112)$$

$$\epsilon_{v_3}(k) = -\epsilon_g - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{3} \frac{k^2 P^2}{\epsilon_g + \Delta}; \quad (113)$$

б) в InSb реализуется неравенство $\Delta \gg \epsilon_g$; если к тому же еще имеет место неравенство $\Delta \gg kP$, то согласно (106) и (109) приближенные значения энергии ϵ_k четырех зон получаются равными¹³:

$$\epsilon_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2} \left[-\epsilon_g + \sqrt{\epsilon_g^2 + \frac{8}{3} k^2 P^2} \right], \quad (114)$$

¹³ Формулы (114), (116) получены при дополнительном неравенстве $\Delta \gg |\epsilon|$. В InSb $\Delta \cong 0,9$ эВ в то время, как $\epsilon_g \cong 0,25$ эВ при $T = 77$ К. Поэтому принятые неравенства в InSb хорошо удовлетворяются при всех актуальных значениях энергии. Заметим, что состояния (110) — (113) и (114) — (117) классифицируются не по орбитальному моменту l , а по полному $J = l + s$. В состояниях зоны проводимости и отщепленной $J = \frac{1}{2}$, в состояниях зон тяжелых и легких дырок $J = 3/2$.

$$\varepsilon_{v_1} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varepsilon_g, \quad (115)$$

$$\varepsilon_{v_2}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{2} \left[\varepsilon_g + \sqrt{\varepsilon_g^2 + \frac{8}{3} k^2 P^2} \right], \quad (116)$$

$$\varepsilon_{v_3}(k) = -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{3} \frac{k^2 P^2}{\varepsilon_g + \Delta} - \varepsilon_g. \quad (117)$$

В приведенных выражениях энергии (110) — (113) и (114) — (117), формулы (113) и (117) определяют закон дисперсии в валентной зоне, отщепленной вследствие спин-орбитального взаимодействия. Они совпадают, так как для этой зоны оба рассмотренных приближения в InSb практически оказались идентичными. В других зонах формулы (114), (116) с ростом k^2 уже заметно отличаются от соответствующих формул (110), (112). Закон дисперсии с ростом k^2 становится существенно непараболическим. Непараболическость в зоне проводимости еще более наглядно проявится, если записать формулу (114) так:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*} = \varepsilon_c \left(1 + \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_g} \right), \quad (118)$$

где m_c^* — эффективная масса электрона у дна зоны проводимости¹⁴,

$$m_c^* = \frac{3\hbar^2 \varepsilon_g}{4P^2}. \quad (119)$$

По данным опыта, m_c^* в InSb примерно в сто раз меньше массы свободного электрона.

Ниже будем широко пользоваться формулой (118) для описания закона дисперсии электронов проводимости в InSb. Теперь уже имеется довольно большое количество самых разнообразных доказательств, подтверждающих справедливость (118) не только применительно к InSb, но также и ко всем изученным полупроводниковым соединениям типа $A_{III}B_V$. Отклонения от этой формулы начинают проявляться только при достаточно больших энергиях электронов, не актуальных для таких явлений, как явления переноса в относительно слабых полях, распространения электромагнитных волн радиочастотного и инфракрасного диапазона и других. Отклонения обусловлены в первую очередь влиянием более далеких зон и линейным по k членом спин-орбитального взаимодействия в гамильтониане (99). Учет этих факторов иллюстрирует рис. 4, на котором представлена вычисленная в работе [17] зависимость энергии ε от k^2 во всех четырех зонах InSb.

Из рис. 4 видно, что в зоне проводимости влияние удаленных зон на закон дисперсии нижней зоны становится заметным при энергиях электронов больше $\sim 0,5$ эВ, т. е. при энергиях, в 2—3

¹⁴ Малость m_c^* по сравнению с m позволяет в правой части (114) пренебречь первым слагаемым. После этого сразу получается формула (118).

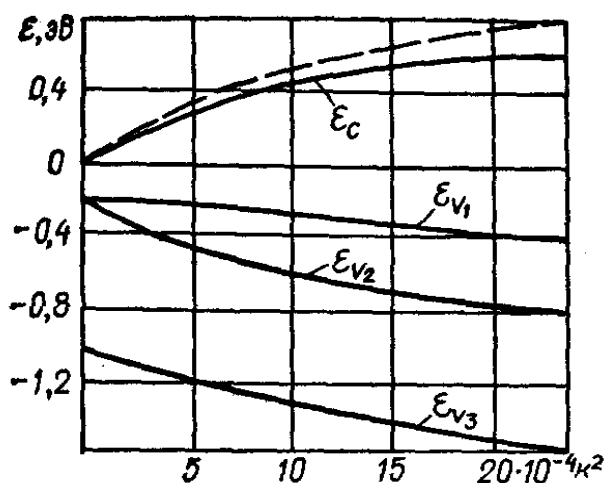


Рис. 4. Зависимость энергии электрона ϵ (в атомарных единицах) от k^2 во всех четырех зонах InSb (штрихами указана энергия электрона в зоне проводимости, не исправленная учетом влияния более далеких зон).

раза превышающих ширину запрещенной зоны. Такими энергиями, как правило, обладает только относительно незначительное число электронов. Их влиянием на проводимость, гальваномаг-

нитные и другие эффекты в полях, не изменяющих существенно среднюю энергию электронов, как уже отмечалось ранее, можно пренебречь. Линейные же по k члены в энергетической зависимости электронов зоны проводимости вообще не проявляются. Зато они важны для правильного определения закона дисперсии в валентной зоне и особенно — в более высоко расположенной валентной зоне тяжелых дырок (v_1), для которой формулы (111), (115) должны быть уточнены в соответствии с рис. 4. При вычислениях, не требующих высокой точности, закон дисперсии в этой зоне InSb можно считать параболическим с эффективной массой $m_{v_1}^* \cong 0,5m$.

Масса $m_{v_1}^*$ является наибольшей из эффективных масс во всех четырех рассматриваемых зонах. Эффективная масса в третьей валентной зоне (v_3) InSb, согласно (117) и (119), примерно в 10 раз больше массы электрона у дна зоны проводимости. Во второй валентной зоне (v_2) у ее потолка эффективная масса по порядку величины такая же, как масса m_c^* . Закон дисперсии в этой зоне (зоне v_2) тоже непараболический, аналогичный закону (118). Будем считать его изотропным, хотя линейные по k члены вносят некоторую незначительную анизотропию в зависимость ϵ от k .

Каждая из четырех зон (114) — (117) в принятом выше формализме остается дважды вырожденной по спину. Учет линейных по k членов снимает это вырождение в зонах (v_1) и (v_2) (кроме направления $[100]$ в зоне (v_1) и направлений $[100]$, $[111]$ в (v_2)). Соответствующие расщепления, однако, достаточно малы, и в дальнейшем нами не будут приниматься во внимание. Не будет приниматься во внимание также и предсказываемый более точным решением весьма незначительный сдвиг максимумов энергии в зонах (v_1) и (v_2) от точки $k = 0$. Отметим сейчас только одно обстоятельство, которое вообще не отражено в теории Кейна [17], а именно влияние температуры на закон дисперсии. Экспериментальные данные указывают на вполне заметную зависимость ширины запрещенной зоны, а значит, и, согласно (119), эффективной массы от температуры. Не вдаваясь пока в объяснение этого факта, представим формально температурную зависимость ширины запрещенной

Таблица 1

Параметр	GaAs	GaSb	InP	InAs	InSb
Эффективная масса m_c^*	0,0655 m	0,047 m	0,067 m	0,022 m	0,013 m
Ширина запрещенной зоны $\varepsilon_g^{(0)}$, эВ ($T = 0^\circ \text{K}$)	1,58	0,20	1,48	0,46	0,265
Температурный коэффициент α , эВ/град	$1,20 \cdot 10^{-4}$	$1,16 \cdot 10^{-4}$	$0,50 \cdot 10^{-4}$	$0,78 \cdot 10^{-4}$	$1,12 \cdot 10^{-4}$
Статическая диэлектрическая постоянная κ_0	12,90	15,00	12,30	14,55	18,70
Высокочастотная диэлектрическая постоянная κ_∞	10,92	13,80	9,56	11,78	16,76
Температура Дебая, К	420	346	501	350	278
Плотность ρ , г/см ³	5,36	5,66	4,83	5,71	5,82
Скорость звука, км/с	5,24	4,36	5,16	4,28	3,80
Акустический деформационный потенциал, эВ	7,0	6,7	6,5	4,9	7,2

зоны (в интервале температур от 0 К до 300—400 К) в виде

$$\varepsilon_g = \varepsilon_g^{(0)} - \alpha T, \quad (120)$$

где α — температурный коэффициент изменения ширины запрещенной зоны, а $\varepsilon_g^{(0)}$ — ширина ее при $T = 0 \text{ K}$.

Изменение ε_g с температурой можно объяснить изменением постоянной решетки с температурой. В пользу такого объяснения говорит, в частности, экспериментально доказанное изменение ширины запрещенной зоны с давлением. Однако кроме этого на величину ε_g влияет еще электрон-фононное взаимодействие, интенсивность которого существенно зависит от температуры. Это обстоятельство было отмечено, например, Равичем [18]. Выполненная им работа позволила обобщить теорию Кейна на температуры, отличные от абсолютного нуля. Основные черты теории при этом остались, естественно, неизменными. Поэтому мы в дальнейшем будем продолжать пользоваться формулой (118), внося необходимую поправку на ε_g по эмпирической формуле (120).

Теория Кейна оказала удивительно плодотворное воздействие на исследование полупроводников $A_{III}B_V$. Некоторые результаты этих исследований можно найти в монографиях [19, 20]. Ниже нам еще придется неоднократно ссылаться на различные исследования полупроводников $A_{III}B_V$, стимулированные и объясненные знанием их зонной структуры. Поэтому здесь ограничимся заимствованной из работы [21] сводкой некоторых важных параметров этих соединений (табл. 1) и остановимся коротко на весьма

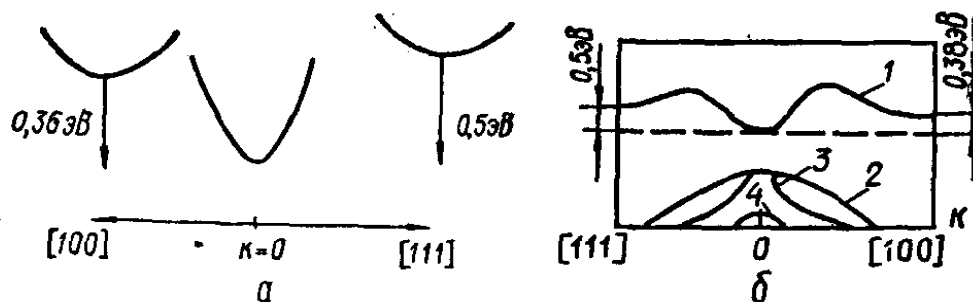


Рис. 5. Зонная структура полупроводников $A_{III}B_V$:

а — схематическое изображение зависимости энергии ε от величины и направления волнового вектора в зоне проводимости; б — зонная структура GaAs; 1 — зависимость $\varepsilon(k)$ в зоне проводимости, 2 — $\varepsilon(k)$ тяжелых дырок, 3 — $\varepsilon(k)$ легких дырок, 4 — $\varepsilon(k)$ отщепленной валентной зоны. Указаны положения дополнительных минимумов в зоне проводимости.

интересном явлении, которое имеет место в полупроводниках $A_{III}B_V$ при наличии приложенного к ним относительно сильного (но не пробивного) электрического поля¹⁵. В таком поле наблюдаются отрицательная дифференциальная проводимость и электрическая неустойчивость, приводящая в конечном счете к генерации электромагнитных колебаний. Изучение этих вопросов показало, что в зоне проводимости, наряду с минимумом энергии ε_c , в точке $k = 0$ имеются еще дополнительные минимумы¹⁶ в направлениях волнового вектора [100] (точка X) и [111] (точка L, см. рис. 1). В энергетической шкале они расположены выше основного минимума, и закон дисперсии вблизи них характеризуется значительно большей эффективной массой, чем масса (119) (рис. 5). В слабых полях эти минимумы (долины) практически не заселены. С ростом поля энергия электронов возрастает и все большее их число забрасывается в дополнительные долины. Так как в этих долинах эффективная масса электронов больше, чем в основной, а значит, подвижность меньше, средняя подвижность электронов будет уменьшаться с полем и будет уменьшаться ток. На вольт-амперной характеристике появится участок с отрицательной дифференциальной проводимостью. Этот эффект и основанный на нем эффект возбуждения колебаний — эффект Гана [23—25] — сейчас интенсивно исследуется, и уже имеется огромная литература, специально посвященная ему [26, 27].

¹⁵ В литературе встречаются значения параметров полупроводников $A_{III}B_V$, отличающиеся (и иногда заметно) от приведенных в табл. 1. Так, по данным работы [22], у GaAs температурный коэффициент $\alpha = 4,0 \times 10^{-4}$ эВ/град, а у InP $\alpha = 2,8 \cdot 10^{-4}$ эВ/град. У InSb, согласно [28], $\kappa_0 = 17,88$, $\kappa_\infty = 15,67$; ширина зоны $\varepsilon_g^{(0)} = 0,235$ эВ.

¹⁶ По данным работы [22], у n -InSb, кроме основного минимума в точке $k = 0$, в той же точке зоны Бриллюэна имеется еще дополнительный минимум отделенный от основного на величину $\Delta = 0,30 \pm 0,04$ эВ. Эффективная масса на дне этого минимума $0,92$ — $0,95m$. У некоторых соединений $A_{III}B_V$, как, например, AlSb, нижайший минимум вырожден и находится не в точке $k = 0$, а на направлении [100].

Здесь уместно в общих чертах остановиться на механизме прохождения тока в полупроводниках. Ниже мы еще вернемся к нему и рассмотрим более подробно. При температуре, превышающей абсолютный нуль, электрический ток определяется электронами в зоне проводимости или отсутствием электронов в валентных зонах — дырками¹⁷. В беспримесных (собственных) полупроводниках электроны и дырки играют соизмеримую роль в переносе заряда.

Электроны попадают в зону проводимости при воздействии тепла, света или других факторов из валентных зон, а также, что более актуально, из доноров, т. е. примесей и других нарушений кристаллической решетки, энергетические уровни которых находятся в запрещенной зоне вблизи дна зоны проводимости. Если концентрация электронов в зоне проводимости n , то плотность переносимого ими электрического тока j выражается простой формулой

$$j = env_{dr} \equiv en\mu F, \quad (121)$$

где v_{dr} — средняя скорость электронов в направлении поля (дрейфовая скорость); μ — подвижность электронов; F — напряженность приложенного электрического поля. Значения n и μ могут зависеть от температуры решетки и поля F .

Дырки в валентной зоне образуются при переводе электрона в зону проводимости или на энергетические уровни примесных центров — акцепторов, расположенных в запрещенной зоне, как правило, вблизи потолка валентной. Не лишне отметить, что понятие дырки как носителя заряда является достаточно сложным. Строго говоря, дырка с волновым вектором k должна описываться на языке многоэлектронной теории детерминантом (10), у которого исключена функция φ_k , или лучше — линейной комбинацией таких детерминантов, представляющих волновой пакет, распространяющийся со скоростью v_k .

Скорость дырки, как и скорости валентных электронов с близкими к k значениями волнового вектора, определяется формулой (56). Это обстоятельство позволяет с хорошим приближением заменить многоэлектронное описание дырки одночастичным, а часто вообще представить дырку как классическую частицу с положительным электрическим зарядом и положительной эффективной массой, равной абсолютному значению массы валентного электрона с тем же волновым вектором. Действительно, перепишем формулу (121) мгновенной плотности тока в виде, учитывающем фактические скорости каждого электрона в своей зоне:

$$j = e \sum_{k,s} f_{ks} v_{ks} = -e \sum_{k,s} (1 - f_{ks}) v_{ks}. \quad (122)$$

¹⁷ Мы имеем в виду температуры, при которых проводимость по примесной зоне или так называемая прыжковая проводимость не играют сколько-нибудь заметной роли.

Здесь $f_{k,s}$ равно 1 или 0 в зависимости от того, заполнено состояние с волновым вектором k и спином s или не заполнено. Суммирование проводится по всем возможным значениям k, s в зоне Бриллюэна. Поэтому $\sum_{k,s} v_{ks} = 0$. В записи вида (122) суммирование в левой части проводится фактически только по состояниям, заполненным электронами, а в правой части формулы — по состояниям, не заполненным электронами, т. е. по дырочным состояниям. В валентной зоне дырок относительно мало, и удобнее, конечно, пользоваться правой суммой (122). Видно, что ток определяется при этом потоком частиц с зарядом, равным, но противоположным по знаку электронному заряду.

Еще одно простое доказательство высказанного утверждения можно получить, если рассмотреть мгновенное изменение дырочного тока со временем, вызванное полем F . Согласно (122), (56), (59), (44) имеем

$$\begin{aligned} \frac{dj}{dt} &= -e \sum_{k,s} (1 - f_{ks}) \frac{dv_{ks}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \sum_{k,s} (1 - f_{ks}) \frac{d}{dt} (\nabla_k \epsilon_{ks}) = \\ &= -\frac{e}{\hbar} \sum_{k,s} (1 - f_{ks}) (\nabla_k (\nabla_k \epsilon_{ks})) \frac{dk}{dt} = -\frac{e^2}{\hbar^2} \sum_{k,s} (1 - f_{ks}) \times \\ &\times (\nabla_k (\nabla_k \epsilon_{ks})) F = -e^2 \sum_{k,s} (1 - f_{ks}) \left(\frac{\hat{1}}{m^*} \right) F. \end{aligned} \quad (123)$$

В соответствии с принципом минимума энергии, дырки заполняют главным образом состояния вблизи потолка валентной зоны, где энергия электронов ϵ_k максимальна и где, следовательно, компоненты тензора обратной эффективной массы $\left(\frac{\hat{1}}{m^*} \right)$ отрицательны. Наличие знака минус в формуле (123) показывает, что дырки ведут себя, как частицы с положительной массой. Отсюда, кстати, можно заключить, что кинетическая энергия дырок растет по мере удаления от потолка валентной зоны, т. е. растет в направлении, в котором энергия электронов ϵ_k уменьшается.

Показанная возможность отождествления дырок с положительно заряженными частицами позволит нам в дальнейшем единым образом описывать явления переноса как в зоне проводимости, так и в валентных зонах. Эти последние вообще целесообразно рассматривать как дырочные зоны и характеризовать их по значениям эффективных масс дырок. Например, зону (v_1) в соединениях $A_{III}B_V$ будем считать зоной тяжелых дырок, зону (v_2) — зоной легких дырок, а спин-отщепленную зону (v_3) — зоной дырок с промежуточной эффективной массой.

Обратимся теперь к зонной структуре германия и кремния. Эти полупроводники наиболее подробно изучены как экспериментально, так и теоретически. Их кристаллическая структура (структура решетки алмаза), как и в полупроводниках $A_{III}B_V$, состоит

Таблица 2

	ε_g , эВ	$m_{\parallel}$	$m_{\perp}$	A	B	C	Δ , эВ
Si	1,165	0,98 m	0,19	$4,0 \frac{\hbar^2}{2m}$	$1,1 \frac{\hbar^2}{2m}$	$4,1 \frac{\hbar^2}{2m}$	0,044
Ge	0,746	1,59 m	0,082 m	$13,3 \frac{\hbar^2}{2m}$	$8,6 \frac{\hbar^2}{2m}$	$12,5 \frac{\hbar^2}{2m}$	0,29

из двух гранецентрированных кубических подрешеток, вставленных друг в друга на $\frac{1}{4}$ часть пространственной диагонали элементарного куба. В отличие от $A_{III}B_V$ обе подрешетки в структуре алмаза состоят из одинаковых атомов. Эти атомы четырехвалентны и каждый окружен четырьмя ближайшими соседями. Здесь, как и в $A_{III}B_V$, две верхние валентные зоны смыкаются в точке $k = 0$, а третья валентная зона с промежуточной эффективной массой дырок отщеплена благодаря спин-орбитальному взаимодействию. Для явлений переноса, оптических, электрооптических и многих других эффектов в германии и кремнии актуальными чаще всего оказываются только две верхние валентные зоны (легких и тяжелых дырок) и, разумеется, зона проводимости.

Первые теоретические исследования структуры зоны проводимости и валентных зон Ge и Si относятся еще к началу 40-х годов. С тех пор уже появилась большая литература по данному вопросу, представление о которой может быть получено, например, из монографий [29—31]. Исследования продолжаются и по настоящее время. Расчеты основаны на применении специальных методов, изложение которых представляет самостоятельную тему. Кроме того, они весьма трудоемки. Поэтому мы ограничимся здесь лишь некоторой сводкой результатов, необходимой для дальнейшего.

Зависимость энергии ε от волнового вектора $\mathbf{k}$ в валентных зонах германия и кремния вблизи $k = 0$ имеет схожий характер. Энергия дырок, отсчитываемая от потолка двух верхних валентных зон, определяется формулой

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)]^{1/2}. \quad (124)$$

В отщепленной валентной зоне энергия дырок имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \Delta + A_1k^2, \quad (125)$$

где Δ — энергетический зазор между потолками валентных зон. В германии спин-орбитальное взаимодействие значительно сильнее, чем в кремнии, и поэтому отщепленная зона в Ge удалена от потолка двух других почти на порядок дальше.

В (124) направления осей x, y, z выбраны по главным кристаллографическим осям. Константы A, B, C выражаются через

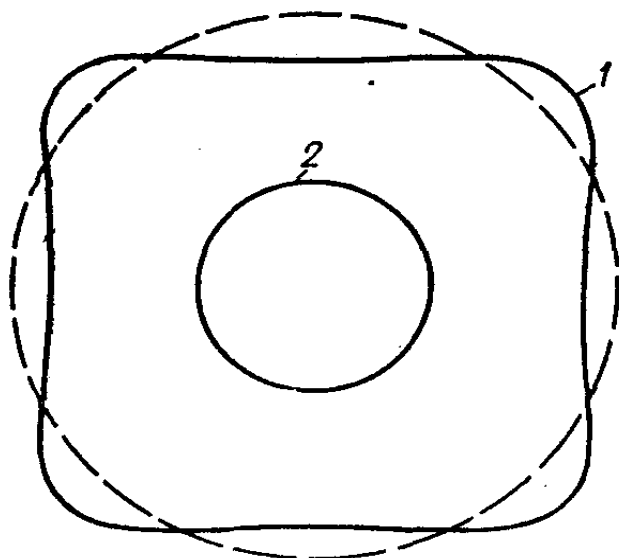


Рис. 6. Изоэнергетические поверхности тяжелых (1) и легких (2) дырок в германии.

произведения и суммы матричных элементов импульса. Мы их не приводим, поскольку на практике эти константы все равно нужно рассматривать как параметры, определяемые из опыта (табл. 2). Отрицательный знак в (124) соответствует энергии тяжелых дырок, положительный — легких.

Изоэнергетическими поверхностями тяжелых и легких дырок

по формуле (124) являются рифленые поверхности, сечение которых плоскостью $k_x = 0$ представлено на рис. 6. Из рис. 6 и данных табл. 2 видно, что изоэнергетическая поверхность легких дырок практически имеет сферическую форму. Изоэнергетическая поверхность тяжелых дырок отклоняется от сферической. Во многих случаях, впрочем, целесообразно усреднить формулу (124) по различным направлениям $\mathbf{k}$ и пользоваться более удобным выражением энергии вида

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \left[A \pm \left(B^2 + \frac{1}{5} C^2 \right)^{1/2} \right] k^2. \quad (126)$$

Погрешность, вносимая применением (126), легко может быть оценена¹⁸. В табл. 2 приведены основные параметры зонной структуры германия и кремния при гелиевой температуре [33].

При значительном удалении от точки $k = 0$ формулы (124) — (126) уже теряют силу. Численные (скорректированные экспериментальными данными) расчеты зависимости ε от $\mathbf{k}$ во всем диапазоне изменения волнового вектора для двух наиболее важных направлений $\mathbf{k}$ [100] и [111] представлены на рис. 7 и 8 кривыми, заимствованными из работы [34]. На рисунках отчетливо проявляется отклонение ε тяжелых дырок от значений, задаваемых (124), по мере приближения $\mathbf{k}$ к границе зоны Бриллюэна.

Интересно рассмотреть кривые зон проводимости на рис. 7 и 8. Прежде всего обращает на себя внимание заметное отличие этих кривых у германия и кремния. Точка $k = 0$ у германия соответствует минимуму энергии, но не наименьшему значению энергии. В этой точке у кремния энергия принимает максимальное значение

¹⁸ В работе [32] сделана попытка получения аналитической зависимости $\varepsilon(\mathbf{k})$ легких и тяжелых дырок в Ge и Si. Полученные в ней формулы приближенно описывают непараболичность зон легких и тяжелых дырок, обусловленную влиянием отщепленной зоны. При $\mathbf{k}$, параллельном направлениям [100], ε , согласно [32], хорошо описывается даже простой параболической зависимостью. Наибольшее отклонение от параболичности — в направлениях $\mathbf{k}$, параллельных [110].

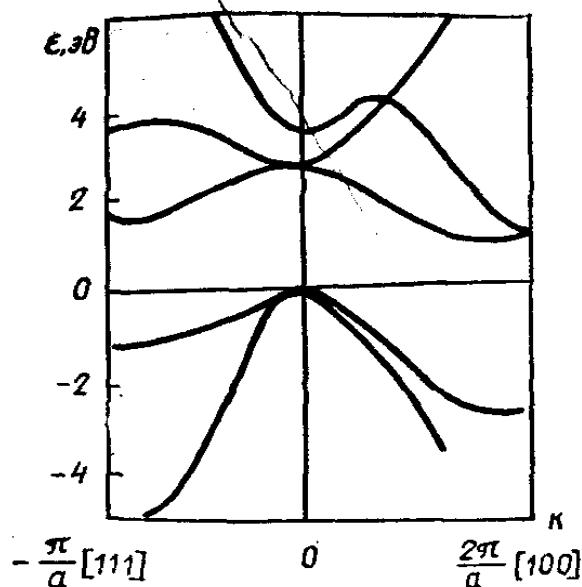


Рис. 7. Зонная структура кремния. Дно зоны проводимости находится на линии Δ в точке $k_0 \approx 0,8 \frac{2\pi}{a}$.

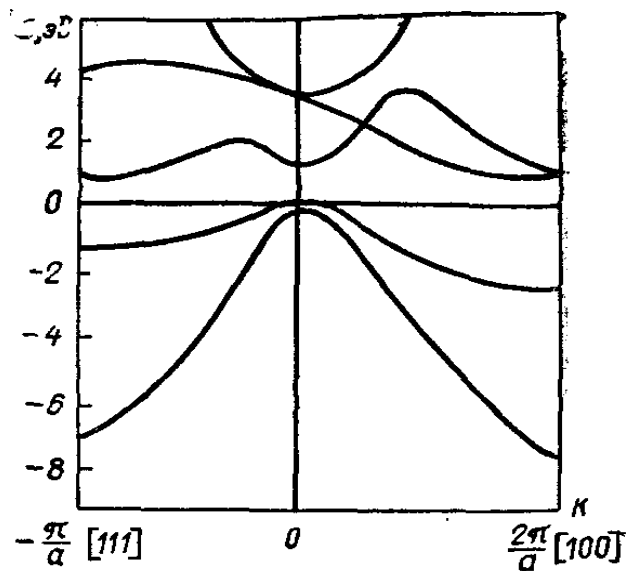


Рис. 8. Зонная структура германия. Дно зоны проводимости находится в точках L зоны Бриллюэна.

(но, конечно, не наибольшее). Нижайшие минимумы энергии у германия находятся на границе зоны Бриллюэна в направлениях $[111]$ (в точках L , см. рис. 1); у кремния нижайшие минимумы находятся на направлениях $[100]$ примерно на расстояниях $0,15 \frac{2\pi}{a}$ от границы зоны Бриллюэна (от точки X , см. рис. 1).

Выше мы уже заметили, что для явлений переноса актуальными являются области k -пространства, непосредственно примыкающие к нижайшим минимумам энергии. Зависимость энергии ε от k в этих областях определяется формулой (43). Вычисления и опытные данные, особенно данные по циклотронному резонансу, показали, что изоэнергетическими поверхностями здесь являются эллипсоиды вращения, большая ось которых совпадает с линией, соединяющей точку минимума с точкой $k = 0$. В прямоугольной системе координат k -пространства, при выборе направления оси k_3 по большей оси эллипсоида, закон дисперсии выражается формулой

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{m_{\perp}} + \frac{k_3^2}{m_{\parallel}} \right). \quad (127)$$

Значения продольной и поперечной эффективной массы германия и кремния приведены в табл. 2. Анизотропия эффективной массы электронов германия, как видно из таблицы, значительно больше, чем кремния.

Наличие в зоне проводимости нескольких областей с наименьшей энергией ε — нескольких энергетических долин — указывает на многодолинную структуру зоны проводимости германия и кремния. Переход электрона из одной долины в другую требует преодоления энергетического барьера. В равновесном состоянии

электроны равномерно распределены между эквивалентными долинами (четырьмя в германии и шестью в кремнии). Внешние поля и деформация кристалла могут существенно изменить характер заполнения долин¹⁹.

Деформация кристалла изменяет закон дисперсии и смещает положения экстремальных точек k_m . В многодолинных полупроводниках положение края каждой долины смещается по-своему. Это приводит, естественно, к перераспределению электронов. Преимущественно заполняются долины с более низко расположенными минимумами.

При обычно встречающихся деформациях можно считать, что смещение края α -й долины $\delta\epsilon_\alpha$ пропорционально деформации:

$$\delta\epsilon_\alpha = \sum_{i,j} D_{ij}^{(\alpha)} s_{ij}, \quad (128)$$

где s_{ij} — компоненты тензора деформации в кристаллографических осях; $D_{ij}^{(\alpha)}$ — компоненты тензора деформационного потенциала α -й долины в тех же осях.

Деформационный потенциал играет важную роль в характере взаимодействия носителей с колебаниями решетки, и мы еще неоднократно будем к нему обращаться. Из общих теоретико-групповых соображений можно доказать, что у германия и кремния главные оси тензоров $\hat{D}$ и обратной эффективной массы совпадают. В этих осях имеются всего две различные компоненты тензора $\hat{D}$: $D_\perp$ и $D_\parallel$. Их численные значения берутся из опыта. В литературе часто применяются две другие константы деформационного потенциала:

$$\Xi_d = D_\perp; \quad \Xi_u = D_\parallel - D_\perp. \quad (129)$$

По данным Баранского и Коломоеца [36], численные значения этих констант для германия при температуре $T = 77$ К равны: $\Xi_u = 16,4$ эВ, $\Xi_d = 6,4$ эВ²⁰.

Всесторонняя равномерная деформация смещает положения краев зон, но не изменяет их положений друг относительно друга. На эксперименте эффективно для различных целей применяется

¹⁹ В германии точки k_m , соответствующие минимуму энергии ϵ , расположены, как указывалось, в точках L зоны Бриллюэна. Поскольку точки L и $-L$ по условию (20) должны считаться одной точкой, долин в германии не 8, а 4. Заметим еще, что здесь не имеются в виду более высокие долины (как, например, долина вблизи $k = 0$ в германии), практически пустые при комнатных и более низких температурах. Не имеются в виду также температуры, близкие к абсолютному нулю, когда вследствие флуктуаций заполнения эквивалентных долин могут различаться [35].

²⁰ Значения констант деформационного потенциала, полученные разными авторами, несколько различаются. Так, для Ge в работе [37] приведены такие значения: $\Xi_u = 15,2$ эВ при 90 К и 14,6 эВ при 290 К. В работе [38] получено: $\Xi_u = 17,2$ эВ при 300 К. Встречаются еще большие значения. Приведенные в тексте значения, по-видимому, ближе всего к точным.

односторонняя деформация, в особенности сжатие по направлению одной из осей вращения изоэнергетической поверхности. В германии таким направлением является, например, направление [111]. По формулам (128), (129) край долины вблизи $k = \frac{\pi}{a}$ [111] смещается на величину

$$\delta\epsilon_1 = \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \Delta + 2\Xi_u s_{xy}. \quad (130)$$

Здесь Δ — относительное изменение объема при деформации, равное следу тензора деформации ($\Delta = s_{xx} + s_{yy} + s_{zz}$); учтено, что в кристаллографических осях германия при указанной деформации тензор $\hat{s}$ симметричен и

$$s_{xy} = s_{yz} = s_{zx} = \frac{1}{3} (s_{\parallel} - s_{\perp}).$$

Смещения краев остальных трех долин германия при деформации сжатия вдоль направления [111] одинаковы. Выразив компоненты тензора деформации в системе главных осей соответствующих эллипсоидов, легко убедиться, что смещения равны

$$\delta\epsilon_2 = \delta\epsilon_3 = \delta\epsilon_4 = \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \Delta - \frac{2}{3} \Xi_u s_{xy}. \quad (131)$$

Из этих формул видно, что долина с осью вращения, направленной вдоль [111], при сжатии понижается относительно других долин на величину $\delta\epsilon_1 - \delta\epsilon_2 = \frac{8}{3} \Xi_u s_{xy}$. Поэтому заполнение электронами этой долины будет большим, чем других. По данным работы [38], при одноосном давлении $1,5 \cdot 10^{10}$ дин/см² ($T = 300$ К) уменьшение длины вырезанного по [111] образца германия составило 0,99%, и этого оказалось достаточно для практически полного перехода всех электронов в долину [111]. Кристалл из многодолинного для явлений переноса стал однодолинным.

В дырочных германии и кремнии деформация в общем случае тоже по-разному смещает положения краев дырочных зон. Закон дисперсии (124) легких и тяжелых дырок обобщается [16], и энергия ϵ в системе кристаллографических осей, отсчитанная от потолка валентной зоны недеформированного кристалла, представляется в виде

$$\epsilon(\mathbf{k}) = Ak^2 + a\Delta \pm [\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 + \mathcal{E}_3]^{1/2}, \quad (132)$$

где

$$\mathcal{E}_1 = B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2), \quad (133)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_2 = bB [3 (s_{xx} k_x^2 + s_{yy} k_y^2 + s_{zz} k_z^2) - k^2 \Delta] + \\ + 2Dd (s_{xy} k_x k_y + s_{yz} k_y k_z + s_{zx} k_z k_x), \end{aligned} \quad (134)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_3 = \frac{1}{2} b^2 [(s_{xx} - s_{yy})^2 + (s_{yy} - s_{zz})^2 + (s_{zz} - s_{xx})^2] + \\ + d^2 (s_{xy}^2 + s_{yz}^2 + s_{zx}^2). \end{aligned} \quad (135)$$

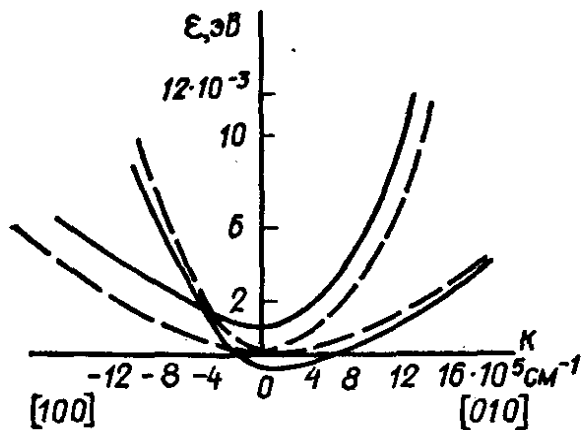


Рис. 9. Зависимость $\varepsilon(k)$ легких и тяжелых дырок в p — Ge при деформации кристалла в направлении $[100]$. Штриховые кривые определяют $\varepsilon(k)$ недеформированного германия.

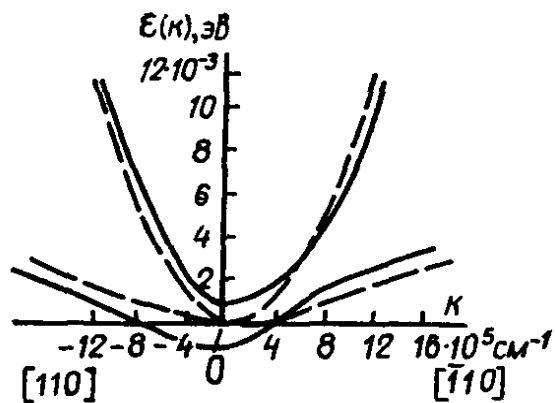


Рис. 10. Зависимость $\varepsilon(k)$ легких и тяжелых дырок в p — Ge при деформации кристалла в направлении $[110]$.

Здесь A, B, C — те же константы, что и в формуле (124), $D^2 = C^2 + 3B^2$. Смысл констант a, b, c, d станет ясным из последующего.

При изотропной деформации ($s_{xy} = s_{yz} = s_{zx} = 0$, $s_{xx} = s_{yy} = s_{zz} = \frac{1}{3} \Delta$) поправочные слагаемые ε_2 и ε_3 в (132) обращаются в нуль и обе дырочные зоны смещаются на величину

$$\delta\varepsilon_{1,2} = a\Delta. \quad (136)$$

Анизотропная деформация расщепляет зоны, и расщепление зависит от величины и направления вектора $\mathbf{k}$. На рис. 9 и 10 представлены по данным [16] кривые зависимости $\varepsilon(k)$ легких и тяжелых дырок германия при деформациях вдоль направлений $[100]$ и $[110]$. В точке $k = 0$ эти зоны согласно (132) и (135) расщепляются на величину

$$\delta\varepsilon_+(0) - \delta\varepsilon_-(0) = 2s_{xx}|b| \quad (137)$$

при деформации по оси x и на величину

$$\delta\varepsilon_+(0) - \delta\varepsilon_-(0) = 2\sqrt{3}s_{xy}|d| \quad (138)$$

при деформации по оси $[111]$. В формулах (137), (138) компоненты s_{xx} и s_{xy} положительны при растяжении и отрицательны при сжатии. Из этих формул видно, что константы b и d определяют расщепление зон в точке $k = 0$ при одноосной деформации соответственно в направлениях $[100]$ и $[111]$.

При анизотропной деформации кристалла ($\varepsilon_3 \neq 0$) функция $\varepsilon(k)$ зон тяжелых и легких дырок становится аналитической в точке $k = 0$. При малых k функцию (132) можно разложить в ряд. Если ограничиться квадратичными по компонентам вектора $\mathbf{k}$ членами, то изоэнергетическими поверхностями окажутся эллипсоиды.

Например, при деформации по оси [111] разложение (132) даст

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = a\Delta \pm \sqrt{3} s_{xy}d + Ak^2 \pm \frac{1}{\sqrt{3}} D (k_x k_y + k_y k_z + k_z k_x). \quad (139)$$

В прямоугольной системе координат с осью z' , направленной по [111], уравнение (139) имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = a\Delta \pm \sqrt{3} s_{xy}d + \left(A \mp \frac{D}{2\sqrt{3}} \right) (k_{x'}^2 + k_{y'}^2) + \\ + \left(A \pm \frac{D}{\sqrt{3}} \right) k_{z'}^2. \end{aligned} \quad (140)$$

Отсюда эффективная масса легких и тяжелых дырок получается равной:

$$m_{\parallel} = \frac{\hbar^2}{2 \left(A \pm \frac{D}{\sqrt{3}} \right)}, \quad m_{\perp} = \frac{\hbar^2}{2 \left(A \mp \frac{D}{2\sqrt{3}} \right)} \quad (141)$$

и, как видно, не зависит от величины деформации. Эта независимость сохраняется также при других направлениях деформации. Нужно, впрочем, помнить, что такой вывод, как и вывод об эллипсоидальной форме изоэнергетических поверхностей дырок, оправдан только для малых кинетических энергий и когда $\mathcal{E}_3 \gg \mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$. При больших кинетических энергиях, или при слабой деформации, когда $\mathcal{E}_1 \gg \mathcal{E}_2$ и $\mathcal{E}_1 \gg \mathcal{E}_3$, деформацию уже нужно рассматривать как возмущение и проводить соответствующим образом разложение (132). Вопрос о том, до каких энергий можно считать изоэнергетические поверхности эллипсоидами, должен решаться всякий раз в зависимости от деформации.

В этом параграфе мы остановились на описании зонной структуры только тех полупроводников, электрические свойства которых в электрических и магнитных полях будут рассмотрены в последующих главах. Выше мы отметили, что именно эти полупроводники лучше всего изучены. Однако сейчас уже достаточно подробно изучены зонные структуры других полупроводников, особенно двойных соединений типа $A_{II}B_{VI}$, $A_{IV}B_{VI}$. Интенсивно изучаются также тройные и еще более сложные соединения (см., например, [39—42]). Появилась возможность в зависимости от установленных значений эффективных масс электронов и дырок, ширины запрещенной зоны, сил осцилляторов, механизмов рассеяния носителей и других параметров и характеристик выбрать область таких физических явлений, где применение того или иного полупроводника может быть наиболее эффективно.

В полупроводниках $A_{II}B_{VI}$, таких, как, например, CdS, CdSe, ZnS, ширина запрещенной зоны сравнительно велика (порядка 2—4 эВ), и поэтому они изучаются главным образом с точки зрения их фотоэлектрических и люминесцентных свойств. В халькогенидах свинца (PbS, PbSe, PbTe) ширина запрещенной зоны на порядок меньше ($\sim 0,3$ — $0,4$ эВ). Это позволяет использовать их в инфракрасной оптике и термоэлектрических приборах.

Таблица 3

Соединение	ε_g , эВ, $T = 300$ К	Эффективная масса		Подвижность, $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ ($T = 300$ К)	
		$\frac{m_n^*}{m}$	$\frac{m_p^*}{m}$	μ_n	μ_p
ZnS гексагональный	3,74	0,28 $\perp C$	1,49 $\perp C$ 1,4 $\parallel C$	140	5
ZnS кубический	3,66	0,39			
ZnO	3,25	0,28	1,8 $\perp C$	110	
ZnSe	2,73	0,17	0,6		
ZnTe	2,23	0,09	0,6	530	28
CdS	2,53	0,205	0,7 $\perp C$ 5,0 $\parallel C$	340 $\perp C$ 350 $\parallel C$	110 15
CdSe	1,85	0,13	0,45 $\perp C$ >1 $\parallel C$	720	75
CdTe	1,50	0,096	0,41	1000	70

Примечание. Символы $\parallel C$ и $\perp C$ указывают на то, что значения эффективной массы и подвижности связаны с направлением $\parallel$ или $\perp$ оси C кристалла гексагональной структуры.

Характерной особенностью зонной структуры халькогенидов свинца является совпадение в зоне Бриллюэна точек k_0 , соответствующих положению дна зоны проводимости, и потолка валентной зоны при разрешенном правилами отбора прямом оптическом переходе между ними. Эти точки находятся на границе зоны Бриллюэна в направлениях $[111]$ (точки L на рис. 1). Вблизи них изоэнергетические поверхности электронов и дырок представляются сильно вытянутыми в направлениях $[111]$ эллипсоидами вращения. Малость ширины запрещенной зоны определяет существенную роль межзонного взаимодействия и приводит к непараболичности закона дисперсии энергии электронов и дырок.

К сожалению, рамки данной книги не позволяют более подробно остановиться на зонной структуре и свойствах полупроводниковых материалов $A_{II}B_{VI}$ и $A_{IV}B_{VI}$. Приведем только значения некоторых параметров (табл. 3) этих веществ, заимствованные из обзора Георгобиани [43], и отошлем читателя к специальной литературе, в частности к монографиям [42, 44], где приведена также подробная библиография.

В последние годы внимание исследователей в значительной мере привлечено к изучению свойств так называемых бесщелевых полупроводников, т. е. полупроводников с нулевой шириной запрещенной зоны [45—47]. К таким полупроводникам относятся некоторые сплавы и твердые растворы, как, например, $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, $\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x}\text{Te}$, $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Te}$, а также такие вещества, как α — Sn, HgTe, HgSe и некоторые другие.

Бесщелевое состояние у названных тройных соединений образуется из-за случайного вырождения зоны проводимости и валент-

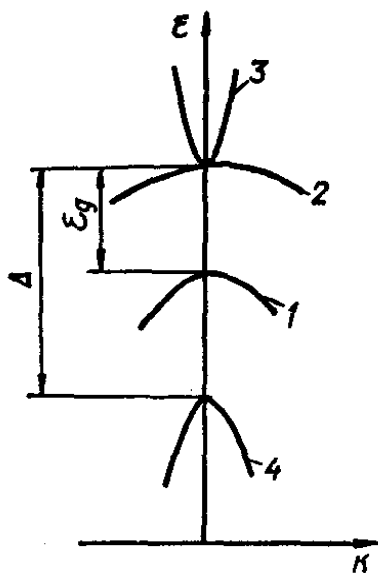


Рис. 11. Инверсная схема зон:

1 — зона s -симметрии (расположена ниже зон p -симметрии и имеет отрицательную кривизну); 2 и 3 — зоны с $j = \frac{3}{2}$; 4 — спин-отщепленная зона.

ной зоны. Оно может возникнуть только при определенном процентном соотношении между компонентами соединения и разрушается под влиянием любого возмущения. В противоположность этому бесщелевое состояние серого олова и халькогенидов ртути определяется самой симметрией кристаллической решетки²¹. Оно устойчиво до тех пор, пока внешнее воздействие не понизит симметрию решетки. Естественно, именно полупроводники такого типа представляются наиболее интересными для изучения и практического использования.

Интерес к бесщелевым полупроводникам определяется не только чисто научной стороной дела, но и заманчивой перспективой их возможного практического использования. По-видимому, такие полупроводники окажутся эффективными генераторами и приемниками электромагнитных колебаний в инфракрасной области спектра, чувствительными датчиками электрических и магнитных полей и, вообще, будут служить в качестве основы различных быстродействующих полупроводниковых приборов. Рассмотрим поэтому в общих чертах их зонную структуру.

Впервые условия возникновения в кристаллах бесщелевого состояния теоретически были рассмотрены Абрикосовым и Бенеславским [48]. Ими показано, что в кубических кристаллах (а иногда и в кристаллах меньшей симметрии) возможно смыкание зоны проводимости с валентной зоной в одной точке k -пространства — точке высокой симметрии. При этом оказалось, что в одноэлектронном приближении (когда движение электрона рассматривается в усредненном периодическом поле ионов и остальных электронов) вблизи точки соприкосновения зон закон дисперсии $\epsilon(k)$ выражается линейной или квадратичной функцией волнового вектора k .

Мы не станем останавливаться на дальнейшем развитии и уточнении теории, а перейдем непосредственно к краткому описанию общепризнанной теперь зонной структуры бесщелевых полупроводников. Экспериментальным обоснованием для нее послужили опытные данные по ширине запрещенной зоны ϵ_g и эффективной массе электрона у α — Sn и HgTe, не укладывавшиеся в известные соотношения между этими величинами у алмазоподобных и полу-

²¹ Серое олово (α — Sn) кристаллизуется в решетку типа алмаза. Халькогениды ртути (HgTe) обладают структурой цинковой обманки. Такая решетка уже была описана выше. Она состоит из двух вставленных друг в друга гранецентрированных кубических решеток, отличающихся сортом атомов, из которых они построены.

проводников $A_{III}B_V$. Так, ширина запрещенной зоны, например, $HgTe$, измеренная по гальваномагнитным эффектам, оказалась не больше $\sim 10^{-3}$ эВ. При столь малом значении ϵ_g и незапрещенном прямом переходе между валентной и зоной проводимости ($p_{c,v} \neq 0$) эффективная масса электрона у дна зоны проводимости согласно (119) должна была бы быть тоже очень малой (примерно пропорциональной ϵ_g). В действительности же она оказалась приблизительно такой, как у антимонида индия, ширина запрещенной зоны которого, по крайней мере, почти на два порядка больше.

Чтобы устранить указанное противоречие, Гровс и Пол [49] предположили, что, в отличие от зонной структуры всех ранее изученных полупроводников, $HgTe$ обладает инверсной зонной структурой. В прямой зонной структуре, о которой выше шла речь и которая иллюстрировалась рис. 5, зона проводимости вблизи ее дна описывалась функциями s -симметрии и зависимость энергии ϵ от волнового вектора $\mathbf{k}$ характеризовалась положительной кривизной. Валентные зоны описывались функциями p -симметрии, и кривые $\epsilon(\mathbf{k})$ во всех направлениях $\mathbf{k}$ вблизи $k = 0$ имели отрицательную кривизну.

При инверсной зонной структуре (рис. 11) зона с s -симметрией имеет отрицательную кривизну и расположена ниже двух зон p -симметрии со значением полного момента $J = \frac{3}{2}$. Одна из этих зон, $J = \frac{3}{2}$, а именно зона легких дырок, в результате инверсии тоже изменяет свою кривизну и тем самым уже характеризует состояния не дырок, а электронов проводимости. Таким образом, слияние в точке $k = 0$ двух зон $J = \frac{3}{2}$, обладающих различной кривизной, фактически соответствует исчезновению запрещенной зоны. Подчеркнем еще, что в такой зонной модели исчезновение запрещенной зоны не связано со случайным внешним воздействием, а вытекает из основных свойств симметрии кристаллической решетки.

МЕХАНИЗМЫ
РАССЕЯНИЯ
НОСИТЕЛЕЙ

§ 1. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ

Количественное описание явлений переноса в твердых телах основано, как и описание любых других явлений, обусловленных очень большим числом частиц, на применении методов статистической физики. В равновесных условиях, т. е. в условиях, при которых в полупроводнике отсутствуют всякие макроскопические потоки электронов и дырок, вероятность заполнения энергетического уровня с волновым вектором $\mathbf{k}$ определяется функцией Ферми — Дирака:

$$f_e(\mathbf{k}) = \left[\exp\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \zeta}{T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (1)$$

для электронов и

$$f_h(\mathbf{k}) = 1 - f_e(\mathbf{k}) = \left[\exp\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_g + \zeta}{T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (2)$$

для дырок в валентной зоне, отстоящей от дна зоны проводимости на величину ϵ_g . Здесь T — абсолютная температура в энергетических единицах, ζ — в обеих формулах — положение уровня химического потенциала, отсчитываемого от дна зоны проводимости, $\epsilon_{\mathbf{k}}$ — положительная энергия электронов или дырок, отсчитываемая от дна зоны проводимости или потолка валентной зоны соответственно.

Когда газ носителей не вырожден, т. е. когда уровень химического потенциала расположен в запрещенной зоне и имеют место неравенства

$$-\frac{\zeta}{T} \gg 1, \quad (3)$$

$$\frac{\epsilon_g + \zeta}{T} \gg 1, \quad (4)$$

Функции (1) и (2) упрощаются и переходят в функции максвелловского вида:

$$f_e(\mathbf{k}) = e^{\frac{\zeta}{T}} e^{-\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{T}}, \quad (5)$$

$$f_h(\mathbf{k}) = e^{-\frac{\epsilon_g + \zeta}{T}} e^{-\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{T}}. \quad (6)$$

Во многих случаях целесообразно перейти от функций, определяющих вероятность заполнения энергетического уровня, к функциям, задающим число носителей в единичном фазовом объеме. Обозначим эти функции $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ или $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$, имея в виду, что с учетом оговорок, отмеченных в § 4, гл. 1, импульс $\mathbf{p}$ электрона или дырки вблизи каждого экстремума энергии однозначно связан с волновым вектором $\mathbf{k}$ формулой (1.60). Здесь предполагается, что электроны и дырки могут быть описаны одновременным заданием их координат $\mathbf{r}$ и импульсов $\mathbf{p}$. Соответствующие критерии законности такого описания будут приведены ниже.

Итак, пусть $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}$ задает число носителей в момент t , заполняющих фазовый объем $d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}$ вблизи точек $\mathbf{r}, \mathbf{p}$. В равновесном состоянии $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ — функция распределения носителей — пропорциональна выражениям (1) или (2). Она не зависит от времени и пространственных координат. Для невырожденного газа носителей эта функция, как упоминалось, является максвелловской. В неравновесном состоянии, возникающем при наличии внешних полей, функция распределения отличается от максвелловской (или фермиевской).

Знание функции распределения равносильно знанию всех макроскопических свойств и поведения системы носителей во внешних полях, а значит, знанию электрических, гальвано- и термоманнитных свойств исследуемого объекта. Действительно, с помощью $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, например, зависимость концентрации носителей n и плотности заряда ρ от $\mathbf{r}$ и t находится простым интегрированием этой функции по всем возможным значениям импульса:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p}; \quad \rho(\mathbf{r}, t) = en(\mathbf{r}, t). \quad (7)$$

Аналогично вычисляются плотность электрического тока $\mathbf{j}$ и плотность потока энергии $\mathbf{Q}$:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = e \int \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p}, \quad (8)$$

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{v}(\mathbf{p}) \varepsilon(\mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p}. \quad (9)$$

Формулы (7) — (9) могут быть затем использованы для определения коэффициентов термо- и гальваномагнитных эффектов, определения показателей преломления и поглощения электромагнитных волн в веществе и т. д.

Ниже в качестве объектов исследования будем в основном рассматривать полупроводники, у которых число носителей в зоне проводимости и валентных зонах не изменяется ни с температурой, ни с величиной приложенного поля. Это широко применяемые на практике полупроводники, легированные примесями донорного или акцепторного типа, с энергетическими уровнями, близко расположенными к краю зоны проводимости или соответственно к потолку валентной зоны. Такие примеси в широком интервале температур остаются почти полностью ионизованными (доноры) или

отрицательно заряженными (акцепторы) и тем самым обеспечивают постоянство числа носителей в зонах. Разумеется, при этом мы исключаем из рассмотрения собственные полупроводники, у которых основное число носителей образовано температурным забросом электронов в зону проводимости из валентных зон. Концентрация носителей в таких полупроводниках, естественно, очень сильно зависит от температуры. Кроме того, из рассмотрения исключаем слишком низкие температуры, заметно увеличивающие долю нейтральных примесей, слишком высокие температуры, при которых полупроводники приближаются к собственным (уравниваются концентрации электронов и дырок), а также электрические поля, близкие к пробойным.

Пусть теперь к полупроводнику с фиксированным при данной температуре числом носителей приложены произвольные поля, суммарное действие которых на каждый носитель описывается силой $\mathcal{F}$. В общем случае эта сила является функцией $\mathbf{r}$, t и $\mathbf{p}$. Чтобы найти функцию распределения носителей в поле $\mathcal{F}$, нужно для каждого сорта носителей записать и решить свое уравнение — кинетическое уравнение Больцмана. Мы получим это уравнение для полупроводника с одним только типом носителей, для определенности, электронов. Обобщение на несколько типов носителей не представляет труда.

Возьмем бесконечно малый объем фазового пространства ²² $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}$. В момент t число электронов в нем равно

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}. \quad (\text{a})$$

За время dt точка $\mathbf{r}$ переместится и в момент $t + dt$ займет положение $\mathbf{r} + \mathbf{v}dt$, импульс $\mathbf{p}$ также изменится и станет равным $\mathbf{p} + \mathcal{F}dt$, но фазовый объем $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}$ по теореме Лиувилля останется неизменным. Число электронов в момент $t + dt$ вблизи $\mathbf{r} + \mathbf{v}dt$, $\mathbf{p} + \mathcal{F}dt$ равно

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{p} + \mathcal{F}dt, t + dt) d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}. \quad (\text{б})$$

Если бы электроны не взаимодействовали друг с другом и со всеми нарушениями периодичности решетки полупроводника, то выражения (а) и (б) равнялись бы друг другу. В действительности, такие взаимодействия имеют место и они играют по существу определяющую роль во всех явлениях переноса.

Учтем сначала чисто формально влияние указанных взаимодействий на число электронов в выбранном фазовом объеме $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}$. Будем рассматривать эти взаимодействия как столкновения электронов с примесями, колебаниями решетки (фононами) и другими нарушениями периодической структуры кристаллической решетки. Исключим пока столкновения электронов друг с другом (о них еще будет речь впереди).

²² Имеется в виду малость в физическом его понимании. В таком объеме еще содержится число электронов, достаточное для применения статистических методов описания.

Обозначим через $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') d^3\mathbf{p}'$ вероятность того, что за единицу времени электрон с импульсом $\mathbf{p}$ в результате столкновения попадет в часть фазового объема $d^3\mathbf{p}'$ вблизи импульса $\mathbf{p}'$. Через $W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) d^3\mathbf{p}$ обозначим вероятность обратного процесса, т. е. вероятность столкновения за единицу времени, при котором электрон из объема $d^3\mathbf{p}'$ вблизи $\mathbf{p}'$ приобретет импульс $\mathbf{p}$. Изменение в результате столкновений числа электронов в фазовом объеме $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}$ за время dt равно, очевидно, в случае невырожденного электронного газа следующему интегралу по всем возможным значениям $\mathbf{p}'$:

$$d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}dt \int [f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) W(\mathbf{p}', \mathbf{p})] d^3\mathbf{p}' \quad (10)$$

и аналогичному (но с учетом принципа Паули) интегралу в случае вырожденного газа.

Полное изменение числа электронов в фазовом объеме $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}$ равно (10) с обратным знаком, и поэтому на основании (а), (б) и (10) имеем

$$\{f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{p} + \mathcal{F}dt, t + dt) + \\ + dt \int [f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) W(\mathbf{p}', \mathbf{p})] d^3\mathbf{p}'\} d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p} = 0. \quad (11)$$

Отсюда сразу получается кинетическое уравнение ²³

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathcal{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \int [W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) - \\ - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)] d^3\mathbf{p}', \quad (12)$$

правая часть которого называется интегралом столкновений и часто обозначается как $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c$ или $-If$. Сокращенно поэтому кинетическое уравнение записывают в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathcal{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c. \quad (13)$$

Из (12) и (13) видно, что кинетическое уравнение в общем случае является довольно сложным интегро-дифференциальным уравнением в частных производных. Точное решение такого уравнения, как правило, найти не удастся, и приходится удовлетворяться приближенными решениями. Некоторые из них будут рассмотрены ниже. Интересно, однако, что, даже не решая кинетического уравнения, из него можно получить важные феноменологические соотношения. Так, если умножить уравнение (13) на $e d^3\mathbf{p}$ и проинтегрировать по всему пространству импульсов, получим,

²³ Когда в полупроводнике имеется несколько типов носителей, функция распределения каждого из них находится из уравнения (13), в правой части которого нужно учесть взаимодействие носителей данного типа со всеми остальными. При этом уже получается система связанных друг с другом кинетических уравнений.

имея в виду определения (7) и (8), уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0. \quad (14)$$

Здесь учтено, что

$$\int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c d^3 \mathbf{p} = 0,$$

поскольку столкновения носителей с решеткой не изменяют их числа, и

$$\int \mathcal{F}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} d^3 \mathbf{p} = 0,$$

поскольку на границах интегрирования функция распределения исчезает²⁴.

Если умножить (13) на $\varepsilon(\mathbf{p}) d^3 \mathbf{p}$ и проинтегрировать по всему пространству импульсов, получим закон сохранения энергии

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{Q} - \frac{1}{e} \mathbf{j} \mathcal{F} = \mathcal{E}(\mathbf{r}, t); \quad \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) \equiv \int \varepsilon \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c d^3 \mathbf{p}, \quad (15)$$

где $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ — плотность энергии газа носителей; $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ — энергия, передаваемая носителями единичному объему решетки за единицу времени. Когда, например, к однородному полупроводнику приложено постоянное электрическое поле и сила $\mathcal{F} = eE$ (E — напряженность поля), а $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} = 0$, соотношение (15) выражает известный закон: энергия, полученная носителями от внешнего поля, передается решетке в виде джоулевого тепла. В более общем случае закон сохранения энергии (15) требует еще учета переноса энергии и изменения ее плотности во времени.

Умножая далее на различные степени $\mathbf{v}$, $\mathbf{p}$ или ε , можно получить и другие феноменологические уравнения, полезные для интерпретации различных физических результатов. Заметим, кстати, что подобная процедура может служить также в качестве приближенного метода решения кинетического уравнения (так называемого метода моментов). В этом методе функция распределения $f(\mathbf{p})$ заранее аппроксимируется в виде некоторого полинома с заданной зависимостью его слагаемых от $\mathbf{p}$. Полином подставляется в кинетическое уравнение, которое затем последовательно умножается на различные степени $\mathbf{p}$ и интегрируется, после чего получается алгебраическая система уравнений для определения коэффициентов полинома. Более подробно к методу моментов мы еще вернемся.

²⁴ Как правило, функция распределения экспоненциально убывает с ростом энергии носителей, а их средняя энергия у полупроводников Ge, Si, $A_{III}B_V$, $A_{II}B_{VI}$ намного меньше ширины разрешенной зоны. Это позволяет с достаточной точностью (если условиями задачи не требуются более точные решения) распространить до бесконечности пределы интегрирования по импульсу, где функция распределения равна нулю.

Удобно искать приближенное решение кинетического уравнения, разлагая зависимость функции распределения от импульса — в ряд по сферическим функциям $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ от углов ϑ, φ между импульсом $\mathbf{p}$ и диктуемой условиями задачи полярной осью пространства импульсов:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_{l,m} f_{lm}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \text{ или } f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_{l,m} f_{lm}(\mathbf{r}, \varepsilon, t) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (16)$$

Ряд (16) можно оборвать на некотором значении l , определяемом требованиями точности решения.

Преимущество разложения (16) состоит в том, что подстановка его в интеграл столкновений (10) при многих актуальных механизмах рассеяния электронов в решетке приводит к сумме, аналогичного с (16) вида

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = L_p f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \sum_{l=1,m} \frac{f_{lm}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\tau_{lm}(\mathbf{p})} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (17)$$

где L_p — оператор, действующий на зависимость нулевого члена разложения (16) от модуля импульса, а величины $\tau_{lm}(\mathbf{p})$ являются функциями только модуля импульса. При некоторых механизмах рассеяния (они будут ниже рассмотрены) τ_{lm} оказываются одинаковыми для всех значений индексов l и m .

Формула (17) позволяет в кинетическом уравнении (13) перейти от интегро-дифференциального к цепочке дифференциальных уравнений. В случае слабых полей эту цепочку оказывается достаточно оборвать на значении $l = 1$. Величина $\tau_1(\mathbf{p})$ тогда приобретает смысл времени релаксации. Действительно, в слабом поле функция распределения только незначительно отличается от равновесной. Это отклонение при изотропном законе дисперсии равно $f - f_0 \cong f_1 \cos \vartheta$, где $f_0(\mathbf{p})$ — равновесная функция распределения. Так как в равновесии интеграл столкновений (10) обращается в нуль, то и $L_p f_0 = 0$. Формулу (17) тогда можно записать так:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \cong - \frac{f - f_0}{\tau_1}. \quad (18)$$

Значение приведенной формулы (18) легче всего понять, если применить ее к полупроводнику, к которому было приложено слабое однородное электрическое поле и в момент $t = 0$ выключено. Кинетическое уравнение (13) в этом случае согласно (18) обращается при $t \geq 0$ в уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{f - f_0}{\tau_1}, \quad (19)$$

из решения которого

$$f = f_0 e^{-t/\tau_1} \quad (20)$$

и следует, что τ_1 характеризует время релаксации.

Явные выражения $\tau_1(p)$ и в общем случае $\tau_{lm}(p)$ определяются вероятностными функциями $W(p, p')$ и $W(p', p)$. Не вдаваясь пока в рассмотрение конкретных механизмов взаимодействия электронов решетки, найдем общее соотношение между указанными функциями, справедливое при всех механизмах.

Выше уже отмечалось, что в равновесии интеграл столкновений (10) равен нулю. В соответствии с принципом детального равновесия нулю должен равняться не только интеграл (10), но и его подынтегральное выражение, т. е.

$$W(p', p) f_0(p') - W(p, p') f_0(p) = 0. \quad (21)$$

У невырожденного электронного газа функция распределения имеет максвелловский вид (5). Поэтому из формулы (21) следует

$$\frac{W(p', p)}{W(p, p')} = \exp \left[\frac{\varepsilon(p') - \varepsilon(p)}{T} \right]. \quad (22)$$

Это соотношение далее будет использовано и проверено на разных конкретных примерах, к рассмотрению которых мы перейдем. Предварительно, однако, остановимся на критериях применимости кинетического уравнения к полупроводникам.

Характерной особенностью кинетического уравнения Больцмана (12), как мы видели, является одновременное задание координаты и импульса электрона (дырки). Чтобы такое задание было законным, необходимо, чтобы пространственная неопределенность координаты Δx , равная по порядку величины $\frac{\hbar}{\Delta p}$, была значительно меньше длины свободного пробега l . Так как Δp не может быть больше импульса p , то должно удовлетворяться неравенство

$$\frac{\hbar}{p} \equiv \lambda_D \ll l, \quad \left(l \approx \frac{p}{m^*} \tau_1 \right), \quad (23)$$

где λ_D — здесь длина волны электрона.

Напряженности полей, входящих в кинетическое уравнение, могут зависеть от времени. Обычно эта зависимость не учитывается в интеграле столкновений. Чтобы такое приближение было оправдано, характерная частота изменения поля со временем ω , умноженная на $\hbar$, должна быть значительно меньше средней энергии электрона $\bar{\varepsilon}$ или, в случае вырожденного электронного газа, меньше химического потенциала ζ :

$$\hbar\omega \ll \bar{\varepsilon} \quad \text{или} \quad \hbar\omega \ll \zeta. \quad (24)$$

Наконец, нужно иметь в виду, что так же, как волновая функция системы многих частиц сводится к набору одночастичных функций лишь приближенно (например, в рассмотренном выше методе Хартри — Фока), так и замкнутое уравнение для функции распределения $f(p)$ является приближенным. Оно оправдано лишь при наличии в системе некоторого малого параметра. Таким параметром

может быть отношение энергии взаимодействия сталкивающихся частиц к их средней кинетической энергии $\bar{\epsilon}$, или отношение радиуса сил взаимодействия к среднему расстоянию между частицами. Только в этом случае тройные, четверные и т. д. столкновения вносят незначительный вклад в кинетическое уравнение и можно ограничиться учетом одних лишь парных соударений, как и было сделано выше.

Обычно в полупроводниках указанные критерии хорошо выполняются вплоть до очень низких температур. Следует, однако, помнить, что в сильно легированных и особенно в узкозонных полупроводниках при понижении температуры возможно вырождение газа носителей, наступающее при

$$m^*T \approx \hbar^2 n^{2/3} \quad (25)$$

(m^* — средняя по плотности состояний эффективная масса, n — концентрация носителей). В этом случае каждое столкновение должно еще рассматриваться с точки зрения незанятости конечного состояния, т. е. с точки зрения удовлетворения принципу Паули.

§ 2. ИНТЕГРАЛЫ СТОЛКНОВЕНИЙ

В данном параграфе рассмотрим различные механизмы взаимодействия носителей тока в полупроводниковых кристаллах. Этой теме, как одной из важнейших в физике твердого тела, уделено достаточно много места в периодической и монографической литературе [1, 9, 50—53]. Поэтому некоторые результаты приведем здесь без подробностей, лишь в качестве справок, и остановимся более детально на вопросах, не нашедших пока достаточного отражения в монографиях и учебниках.

Начнем с рассмотрения взаимодействия электронов с акустическими колебаниями решетки и определим введенную в предыдущем параграфе вероятность рассеяния на акустических фононах, которую обозначим $W_a(p, p')$. Акустические колебания описываются набором плоских волн с частотой ω_q и волновым вектором q . По порядку величины q у волн, эффективно взаимодействующих с электроном, совпадает с волновым вектором последнего k (а вообще $q \leq 2k$). Так как в полупроводниках (с невырожденным электронным газом) средняя энергия носителей $\epsilon \sim T$, то k намного меньше модуля вектора обратной решетки ($k^2 \sim \frac{m^*T}{\hbar^2}$, $k \sim 10^{-6} \text{ см}^{-1}$ при $T = 100 \text{ К}$). Следовательно, и q намного меньше модуля вектора обратной решетки. Иными словами, во взаимодействии с электронами (дырками) принимают участие только длинноволновые фононы. Это позволяет для наших целей пользоваться континуальной моделью кристалла и представить амплитуду смещения точки r при тепловых колебаниях $U(r)$ в виде набора пло-

ских волн с волновыми векторами $\mathbf{q}$:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}V} \right)^{1/2} \xi_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}), \quad (26)$$

где ρ — плотность кристалла и V — его объем; $\xi_{\mathbf{q}}$ — единичный вектор поляризации волны; $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ и $a_{\mathbf{q}}$ — операторы рождения и уничтожения фонона с волновым вектором $\mathbf{q}$. Формула (26) записана лишь для существенных ниже продольных смещений $\xi_{\mathbf{q}} \parallel \mathbf{q}$.

Гамильтониан системы (зонный электрон и акустические колебания решетки) складывается из гамильтониана электрона (1.18), собственными функциями которого являются функции Блоха $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, гамильтониана фононов с собственными функциями осцилляторного вида и гамильтониана взаимодействия $H'_a(\mathbf{r})$ электрона с фононами. Последний рассматривается как возмущение и ввиду малости отклонений $U_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ представляется суперпозицией типа $H'_a(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} H'_{qa}(\mathbf{r})$.

В методе деформационного потенциала [54] $H'_{qa}(\mathbf{r})$ отождествляется со сдвигом края зоны $\delta\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{r})$, который образуется в точке $\mathbf{r}$ при деформации, вызванной смещением $U_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$. Согласно (1.128) для изотропной зоны (более сложный случай будет рассмотрен в свое время) имеем

$$H'_{qa}(\mathbf{r}) = D_{\perp} \Delta_{\mathbf{q}} \equiv D_{\perp} \operatorname{div} U_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}V} \right)^{1/2} \times \\ \times iD_{\perp} \mathbf{q} \xi_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - a_{\mathbf{q}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}). \quad (27)$$

Здесь $\Delta_{\mathbf{q}}$ — относительное изменение объема при деформации, вызванной $\mathbf{q}$ -волной; $D_{\perp}$ — введенная ранее компонента тензора деформационного потенциала.

Из формулы (27) видно, что электроны взаимодействуют только с продольными акустическими колебаниями. Кроме того, видно (из-за наличия операторов рождения и уничтожения фононов), что матричный элемент перехода $(H'_{qa})_{\mathbf{k}, N_{\mathbf{q}}; \mathbf{k}', N'_{\mathbf{q}}}$ из состояния $\mathbf{k}, \dots, N_{\mathbf{q}} \dots$ ($\dots N_{\mathbf{q}} \dots$ — набор квантовых чисел фононов) в состояние $\mathbf{k}', \dots, N'_{\mathbf{q}} \dots$ отличен от нуля только при $N'_{\mathbf{q}} = N_{\mathbf{q}} \pm 1$ и $\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}$. Он имеет вид

$$\langle \mathbf{k}, \dots, N_{\mathbf{q}} \dots | H'_{qa}(\mathbf{r}) | \mathbf{k}', \dots, N'_{\mathbf{q}} \dots \rangle = \\ = \pm iD_{\perp} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}V} \right)^{1/2} |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| \left(N_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)^{1/2} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \mp \mathbf{q}} \quad (28)$$

(верхний знак соответствует испусканию фонона $\omega_{\mathbf{q}}, \mathbf{q}$, нижний — поглощению).

Выполнение стандартной процедуры дает далее следующее

выражение введенной в § 1 вероятности $W_a(p, p')$:

$$W_a(p, p') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} |\langle \mathbf{k}, \dots, N_q \dots | H' | \mathbf{k}', \dots, N_q' \dots \rangle|^2 \times \\ \times \delta(\varepsilon - \varepsilon' \pm \hbar\omega_q) = \frac{D_{\perp}^2}{8\pi^2\hbar^5\rho\omega_q} (p - p')^2 \times \\ \times \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta[\varepsilon(p) - \varepsilon(p') \pm \hbar\omega_q], \quad (29)$$

где $p' - p = \pm \hbar q$.

Здесь и ниже будем считать, что кристалл находится в «термостате» и что электронно-дырочные потоки относительно невелики и не нарушают равновесного распределения фононов, задаваемого функцией Планка

$$N_q = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_q}{T}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (30)$$

Подставим (29) в (12) и учтем, что у акустических фононов $\omega_q = sq$, где s — скорость звука в материале. Интеграл столкновений с акустическими фононами невырожденного газа носителей получится тогда следующим:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a = \frac{D_{\perp}^2}{8\pi^2\hbar^4 s \rho} \int |\mathbf{p} - \mathbf{p}'| d^3\mathbf{p}' \{ [f(p') (N_q + 1) - f(p) N_q] \times \\ \times \delta[\varepsilon(p') - \varepsilon(p) - \hbar sq] + [f(p') N_q - f(p) (N_q + 1)] \times \\ \times \delta[\varepsilon(p') - \varepsilon(p) + \hbar sq] \}, \quad (p' = p \pm \hbar sq). \quad (31)$$

Обычно в полупроводниках, вплоть до температур порядка нескольких градусов Кельвина, энергия фононов, эффективно взаимодействующих с электронами, $\hbar sq \ll T$ и, следовательно, $\hbar sq \ll \varepsilon(p)$. Это означает²⁵, что столкновения носителей с акустическими фононами являются почти упругими ($\varepsilon(p') \approx \varepsilon(p)$). Акустические фононы являются, таким образом, в основном только причиной рассеяния носителей, и, когда имеются эффективные механизмы неупругого взаимодействия, членом $L_p f_0$ на акустических фононах в уравнении (17) можно пренебречь. Вычисление $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a$ тогда значительно упрощается. Оно упрощается еще и потому, что при учете взаимодействия с акустическими фононами можно вместо (30) пользоваться более простым выражением

$$N_q \cong \frac{T}{\hbar sq} \gg 1. \quad (32)$$

²⁵ В изотропной зоне с монотонной зависимостью энергии от импульса неравенство $\hbar sq \ll \varepsilon(p)$ справедливо при всех p , за исключением очень малых. Плотность состояний таких p мала, и они практически не проявляются в явлениях переноса.

В пьезоэлектрических кристаллах колебания решетки, аналогичные акустическим, вызывают возникновение электрического поля. При относительно низких температурах это поле может стать одной из главных причин рассеяния носителей. Его напряженность, поскольку колебания не нарушают локальную нейтральность кристалла ($\text{div } \mathbf{D} = 0$, где $\mathbf{D}$ — электростатическая индукция), выражается формулой [55, 56]:

$$E_\alpha = - \sum_{\beta, \gamma=1}^3 h_{\alpha\beta\gamma} s_{\beta\gamma}, \quad (33)$$

где $h_{\alpha\beta\gamma}$ — компоненты пьезоэлектрического тензора; $s_{\beta\gamma}$ — компоненты тензора деформации:

$$s_{\beta\gamma} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial U_\gamma}{\partial x_\beta} \right).$$

В континуальном приближении компонента смещения $U_\beta(\mathbf{r})$, как и выше, представляется набором плоских волн со всеми возможными значениями волнового вектора $\mathbf{q}$. Компонента амплитуды одной из таких волн, например волны с волновым вектором $\mathbf{q}$, направленным по оси x_3 кубического кристалла, при учете нормировки имеет следующий вид:

$$U_{q\beta} = \left(\frac{\hbar\omega_q}{2Vc_\beta} \right)^{1/2} \frac{1}{q} (a_q e^{iqx_3} + a_q^+ e^{-iqx_3}). \quad (34)$$

Здесь $c_\beta = c_{\beta 3 \beta 3}$ — компонента тензора модулей упругости. В кубическом кристалле (см. [57]) могут быть только три различные компоненты этого тензора: типа c_{3333} , $c_{\beta\beta 33}$ и $c_{\beta\beta\beta\beta}$. Поэтому в таком кристалле амплитуда продольных волн ($\beta = 3$), вообще говоря, отличается от амплитуды двух поперечных, которые, как показывает формула (34), оказываются одинаковыми.

Напряженность электрического поля E_α , возникшего в результате деформации кристалла, вызванного волнами, распространяющимися в направлении x_3 , после подстановки амплитуд (34) в формулу (33) и суммирования по q и β (с учетом также свойств симметрии пьезоэлектрического тензора $h_{\alpha\beta\gamma} = h_{\alpha\gamma\beta}$) получается в виде

$$E_\alpha = - \sum_q \sum_{\beta, \gamma=1}^3 h_{\alpha\beta\gamma} s_{\beta\gamma} = -i \sum_q \sum_{\beta=1}^3 \left(\frac{\hbar\omega_q}{2c_\beta V} \right)^{1/2} h_{\alpha\beta 3} (a_q e^{iqx_3} - a_q^+ e^{-iqx_3}). \quad (35)$$

Потенциальная энергия электрона $H'_{\text{пэ}}(\mathbf{r})$ в таком поле равна:

$$H'_{\text{пэ}} \cong -e \int E_3 dx_3 = \sum_q \sum_\beta e \left(\frac{\hbar\omega_q}{2c_\beta V} \right)^{1/2} \frac{1}{q} h_{3\beta 3} (a_q e^{iqx_3} + a_q^+ e^{-iqx_3}). \quad (36)$$

Отсюда матричный элемент $\langle \mathbf{k}, \dots N_q \dots | H'_{\text{пз}} | \mathbf{k}', \dots N'_q \dots \rangle$ имеет вид

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{k}, \dots N_q \dots | H'_{\text{пз}} | \mathbf{k}', \dots N'_q \dots \rangle = \\ & = e \sum_{\beta} \left(\frac{\hbar \omega_q}{2c_{\beta} V} \right)^{1/2} \frac{1}{q} h_{3\beta 3} \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)^{1/2} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \mp \mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (37)$$

Здесь N_q определяет равновесное, описываемое формулой Планка (30), распределение пьезоэлектрических фононов.

Вероятность рассеяния носителей на пьезоэлектрическом потенциале $W_{\text{пз}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ выражается через матричный элемент (37) аналогично (29):

$$\begin{aligned} W_{\text{пз}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} |\langle \mathbf{k}, \dots N_q \dots | H'_{\text{пз}} | \mathbf{k}', \dots N'_q \dots \rangle|^2 \times \\ & \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} \pm \hbar\omega_q) = \sum_{\beta} \frac{e^2 h_{3\beta 3}^2 \omega_q}{8\pi^2 \hbar c_{\beta}} \cdot \frac{1}{\hbar^2 q^2} \times \\ & \times \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') \pm \hbar\omega_q]. \end{aligned} \quad (38)$$

Целесообразно выражение (38) усреднить по различным направлениям вектора q и значениям $h_{3\beta 3}$, c_{β} , записав его в виде

$$\begin{aligned} W_{\text{пз}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= \frac{e^2 \omega_q}{8\pi^2 \hbar} \ll \frac{\hbar^2}{c} \gg \frac{1}{(\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2} \times \\ & \times \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') \pm \hbar\omega_q], \quad (\mathbf{p}' - \mathbf{p} = \pm \hbar \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (39)$$

где скобки «...» обозначают указанное выше усреднение.

Интеграл столкновений носителей (12) с пьезоэлектрическими фононами после подстановки в него вероятности $W_{\text{пз}}$ (39) получается таким:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{пз}} &= \frac{e^2}{8\pi^2 \hbar} \ll \frac{\hbar^2}{c} \gg \int \frac{\omega_q}{(\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2} \{ [f(\mathbf{p}') (N_q + 1) - f(\mathbf{p}) N_q] \times \\ & \times \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') + \hbar\omega_q] + [f(\mathbf{p}') N_q - f(\mathbf{p}) (N_q + 1)] \times \\ & \times \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \hbar\omega_q] \} d^3 \mathbf{p}'. \end{aligned} \quad (40)$$

Этот интеграл, как и интеграл (31), тоже можно заметно упростить, если учесть, что чаще всего приходится иметь дело с полупроводниками при температурах решетки, значительно превосходящих энергию пьезоэлектрического фонона ($T \gg \hbar\omega_q$). Столкновения носителей с такими фононами являются квазиупругими. Поэтому, как правило, пьезофононы играют роль в основном лишь причины рассеяния электронов (дырок), но не изменения их энергии.

Как акустические, так и пьезоэлектрические колебания имеют место в кристаллах с произвольным числом атомов в элементарной ячейке, в том числе в одноатомных кристаллах. Однако в кри-

сталлах, элементарная ячейка которых содержит более одного атома, появляются еще оптические ветви колебаний. У типичных представителей атомарных полупроводников, таких, как рассмотренные выше германий и кремний, в элементарной ячейке содержится два атома. Длинноволновые колебания у этих полупроводников, в соответствии с шестью степенями свободы атомов элементарной ячейки, имеют шесть ветвей колебаний: три ветви акустических колебаний и три ветви оптических.

Амплитуды смещений точек кристалла, вызванные оптическими колебаниями, формально можно выразить так же, как и ранее, формулой (26). Так же, как и ранее, с носителями эффективно взаимодействуют только длинноволновые оптические фононы. Оператор этого взаимодействия при изотропной зоне (более сложные зоны будут рассмотрены в другом месте) можно тоже принять в виде (27), но со своей характерной константой D_0 вместо D_1 . Существенное отличие от предыдущего состоит в том, что дисперсия длинноволновых оптических фононов крайне мала и ею можно пренебречь. Кроме того, отличие состоит еще в том, что энергия оптического фонона $\hbar\omega_0$ не мала, а, как правило, превосходит температуру решетки (у германия $\hbar\omega_0 = 420$ К, у кремния $\hbar\omega_0 = 730$ К). Поэтому столкновения носителей с оптическими фононами (сопровождающиеся поглощением или испусканием фонона) являются неупругими.

Строгое вычисление матричного элемента оператора взаимодействия $H'_{q\text{оп}}(\mathbf{r})$ носителя с оптическими фононами представляется достаточно сложным. Обычно применяется разложение по степеням $q = \pm(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. Харрисон [58] показал, что в отличие от матричного элемента оператора $H'_{qa}(\mathbf{r})$ матричный элемент перехода, связанного с рождением или излучением фонона $\hbar\omega_0$, содержит не только слагаемые с q в первой и более высоких степенях, но допускает²⁶ также и слагаемое в нулевой степени. Это слагаемое по величине значительно превосходит остальные и, согласно Зейтцу [59], его можно считать пропорциональным $D_0 K$, где K — элементарный вектор обратной решетки. Матричный элемент оператора $H'_{q\text{оп}}(\mathbf{r})$ поэтому совпадает с (28), если заменить в последнем D_1 на D_0 , $(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ на K и ω_q на постоянную частоту длинноволнового оптического фонона ω_0 :

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{k}, \dots N_q \dots | H'_{q\text{оп}} | \mathbf{k}', \dots N_q' \dots \rangle = \\ & = iD_0 K \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_0 V} \right)^{1/2} \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)^{1/2} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' \mp \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (41)$$

²⁶ В некоторых ситуациях, определяемых симметрией положений $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ в зоне Бриллюэна, матричный элемент $H'_{q\text{оп}}$ может не содержать слагаемого с нулевой степенью q . Вклад оптических фононов в рассеяние носителей тогда обусловлен высшими степенями q и, как правило, мал по сравнению со вкладом, вносимым рассеянием на акустических фононах.

Отсюда плотность вероятности столкновения с оптическими фононами $W_{\text{оп}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, при котором $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'$, по аналогии с (29) запишем так:

$$W_{\text{оп}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{D_0^2 K^2}{8\pi^2 \hbar^3 \omega_0 \rho} \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') \pm \hbar\omega_0]; \quad (42)$$

$$(\mathbf{p}' = \mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{q}).$$

Интеграл столкновений имеет вид

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{оп}} = \frac{D_0^2 K^2}{8\pi^2 \hbar^3 \omega_0 \rho} \int \{ [f(\mathbf{p}') (N_0 + 1) - f(\mathbf{p}) N_0] \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') + \hbar\omega_0] + [f(\mathbf{p}') N_0 - f(\mathbf{p}) (N_0 + 1)] \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \hbar\omega_0] \} d^3\mathbf{p}'. \quad (43)$$

Вторую строку в (43) нужно считать равной нулю, когда $\varepsilon(\mathbf{p}) < \hbar\omega_0$. Как и выше, примем, что оптические фононы тоже находятся в тепловом равновесии и N_0 определяется формулой Планка (30).

При высоких температурах решетки или сильных полях средняя энергия носителей может превосходить энергию оптического фонона. Если будет удовлетворяться неравенство $\overline{\varepsilon(\mathbf{p})} \gg \hbar\omega_0$ ($\overline{\varepsilon(\mathbf{p})}$ — средняя энергия носителя), то рассеяние на оптических фононах тоже станет почти квазиупругим и тогда интеграл (43) допускает разложение по параметру $\frac{\hbar\omega_0}{\overline{\varepsilon(\mathbf{p})}}$. Это значительно облегчает дальнейшие вычисления. Чаше, однако, реализуется противоположное неравенство, соответствующее неупругому рассеянию. Подынтегральное выражение (43) тогда остается выражением в конечных разностях, и все времена релаксации τ_{lm} в формуле (17) тоже получаются в виде конечных разностей. Их явные значения будут найдены позже.

В ионных полупроводниках оптические колебания решетки вызывают поляризацию кристалла. Поэтому в таких полупроводниках взаимодействие носителей с оптическими колебаниями определяется в основном не деформационным потенциалом, а потенциалом возникающего электрического поля, намного превосходящим деформационный.

В решетке, состоящей из двух противоположно заряженных ионов в каждой элементарной ячейке, тепловые колебания оптических ветвей, смещающие эти ионы на величины U_1 и U_2 , приводят к появлению локального диполя с моментом $\mathbf{p} = e^* (U_1 - U_2)$, где e^* — эффективный заряд каждого иона (имеется в виду абсолютная величина заряда). Поляризация кристалла при этом определяется дипольным моментом единицы объема $\mathcal{P}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}}{v_0}$ (v_0 — объем элементарной ячейки), а взаимодействие носителя с поляризованным кристаллом, как обычно, — выражением

$$H_{p0} = e \int \frac{\mathcal{P}(\mathbf{r}') (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3\mathbf{r}'. \quad (44)$$

Здесь нужно обратить внимание на то, что не вся поляризация кристалла, образованная при оптических колебаниях решетки, влияет на состояние носителя. Аналогичная ситуация встречалась в теории поляронов [15, 60]. Вследствие того что скорости носителей значительно больше скоростей колебаний ионов и значительно меньше эффективных скоростей внутренних электронов ионных оболочек, носители взаимодействуют только с инерционной частью поляризации. Последняя связана со смещением ионов со своих равновесных положений и только той частью деформации электронных оболочек ионов, которая жестко связана с их смещениями. Высокочастотная поляризация, описываемая диэлектрической проницаемостью κ_∞ , на носители не влияет. Она адиабатически следует за движением носителя.

По формулам электростатики плотность потенциальной энергии, обусловленная инерционной частью поляризации кристалла $\mathcal{P}_{\text{ин}}(\mathbf{r}) = \mathcal{P}_0(\mathbf{r}) - \mathcal{P}_\infty(\mathbf{r})$, равна

$$2\pi \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right)^{-1} \mathcal{P}_{\text{ин}}^2(\mathbf{r}), \quad (45)$$

где κ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость.

Выразим $\mathcal{P}_{\text{ин}}(\mathbf{r})$ — набором плоских волн подобно тому, как это было сделано выше. Можно показать, что: 1) носители с изотропной эффективной массой взаимодействуют главным образом с длинноволновыми продольными поляризационными колебаниями решетки, частота которых ω_0 из-за незначительной дисперсии практически не зависит от волнового вектора и 2) разложение поляризации $\mathcal{P}_{\text{ин}}$ (являющейся действительной величиной) по плоским волнам, соответствующее правильному значению потенциальной энергии (45), должно быть записано так:

$$\mathcal{P}_{\text{ин}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4V^{1/2}} \left(\frac{2\hbar\omega_0}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}). \quad (46)$$

Подставим (46) в (44). После несложных вычислений гамильтониан взаимодействия носителя с полярными оптическими колебаниями $H'_{p0}(\mathbf{r})$ получится таким (см. также [61]):

$$H'_{p0}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - a_{\mathbf{q}}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}), \quad (47)$$

где

$$V_{\mathbf{q}} = -\frac{ie}{q} \left(\frac{2\pi\hbar\omega_0}{V} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right)^{1/2}. \quad (48)$$

Матричный элемент перехода на операторе (47) равен:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}, \dots N_{\mathbf{q}} \dots | H'_{p0}(\mathbf{r}) | \mathbf{k}', \dots N'_{\mathbf{q}} \dots \rangle = \\ = \pm V_{\mathbf{q}} \left(N_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)^{1/2} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \mp \mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (49)$$

Следовательно, плотность вероятности $W_{p0}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ столкновения $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'$ с рождением или поглощением оптического фонона в полярных кристаллах запишется в виде

$$W_{p0}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{e^2 \omega_0}{2\pi \hbar} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \frac{1}{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2} \times \\ \times \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') \pm \hbar \omega_0]. \quad (50)$$

Интеграл столкновений с полярными оптическими колебаниями, считая снова, что не нарушено тепловое равновесие решетки, по формуле (50) представляется в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{p0} = \frac{e^2 \omega_0}{2\pi \hbar} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) [e^{\frac{\hbar \omega_0}{T}} - 1]^{-1} \int \{ [e^{\hbar \omega_0/T} f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})] \times \\ \times \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') + \hbar \omega_0] + [f(\mathbf{p}') - e^{\hbar \omega_0/T} f(\mathbf{p})] \times \\ \times \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \hbar \omega_0] \} \frac{d^3 \mathbf{p}'}{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2}. \quad (51)$$

Здесь, как и в формуле (43), вторую строку следует считать равной нулю, когда $\varepsilon(\mathbf{p}) < \hbar \omega_0$. Формула (51) показывает, что рассеяние на полярных оптических фононах является существенно неупругим, если средняя энергия носителя меньше или порядка $\hbar \omega_0$.

§ 3. РАССЕЯНИЕ НА КУЛОНОВСКИХ И НЕЙТРАЛЬНЫХ ЦЕНТРАХ

Перейдем теперь к рассмотрению кулоновских механизмов рассеяния. Они определяют взаимодействие однотипных носителей друг с другом, взаимодействие разного типа носителей (например, дырок с электронами или легких дырок с тяжелыми) и, наконец, взаимодействие носителей с заряженными примесными центрами. Хотя кулоновские механизмы не изменяют энергию всей системы носителей, тем не менее они, как будет видно, очень часто оказываются наиболее важными и во многом определяющими состояние системы.

Количественное описание кулоновского взаимодействия носителей сопряжено с трудностями, возникающими из-за бесконечно большого радиуса действия кулоновских сил и бесконечно больших сил на коротких расстояниях. Разными авторами [62—67] предлагались методы преодоления отмеченных трудностей и вычисления интеграла столкновений. Мы приведем здесь вывод этого интеграла, придерживаясь примерно работы Ландау [68], преимуществом которой является ее общность и независимость от выбора закона дисперсии энергии носителей.

Пусть $f(\mathbf{p})$ — функция распределения по импульсам $\mathbf{p}$ носителей одного типа и $\varphi(\mathbf{\pi})$ — функция распределения по импульсам $\mathbf{\pi}$ носителей другого типа. В частности, когда рассматриваются

столкновения одинаковых носителей (например, электронов друг с другом), функции f и φ совпадают. Обозначим через dW вероятность (в единицу времени) столкновения, при котором носитель с импульсом p изменит его на величину a , а носитель с импульсом π изменит его на величину α . В силу закона сохранения импульса a и α связаны соотношением $a + \alpha = 0$. Это соотношение позже будет использовано, но на первых порах удобно во всех формулах считать a и α независимыми.

Число столкновений в единичном фазовом объеме (по p) в единицу времени, переводящих носители с импульсами p , π в носители с импульсами соответственно $p + a$, $\pi + \alpha$, равно $f(p) \times \varphi(\pi) dW$. Число обратных столкновений, при которых импульсы $p + a$, $\pi + \alpha$ становятся равными p , π , запишем в виде $f(p + a) \varphi(\pi + \alpha) dW'$, где dW' — вероятность такого обратного столкновения.

Вероятности dW и dW' являются функциями импульсов и их изменений, т. е.

$$dW \equiv dW(p, \pi, a, \alpha); \quad dW' \equiv dW'(p + a, \pi + \alpha, a, \alpha). \quad (52)$$

Запишем эти вероятности как функции более симметрично выраженных аргументов, а именно:

$$\begin{aligned} dW &\equiv dW\left(p + \frac{1}{2}a, \pi + \frac{1}{2}\alpha, a, \alpha\right); \\ dW' &\equiv dW'\left(p + \frac{1}{2}a, \pi + \frac{1}{2}\alpha, -a, -\alpha\right). \end{aligned} \quad (53)$$

Так как, исходя из принципа детального равновесия, вероятности прямых и обратных столкновений должны быть одинаковы, то из (53) можно заключить, что вероятности dW и dW' должны быть четными функциями аргументов a и α .

Интеграл столкновений рассматриваемых частиц друг с другом имеет вид

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_q &= \int [f(p + a) \varphi(\pi + \alpha) - f(p) \varphi(\pi)] \times \\ &\times dW\left(p + \frac{1}{2}a, \pi + \frac{1}{2}\alpha, a, \alpha\right). \end{aligned} \quad (54)$$

Интегрирование в (54) проводится по всем значениям импульса π (в пределах зоны Бриллюэна) и по всем значениям параметров, характеризующих столкновение. Чтобы явно указать на это, запишем вероятность dW в виде

$$\begin{aligned} dW\left(p + \frac{1}{2}a, \pi + \frac{1}{2}\alpha, a, \alpha\right) &= w\left(p + \frac{1}{2}a, \pi + \right. \\ &\left. + \frac{1}{2}\alpha, a, \alpha\right) d^3\pi d\tau_{\alpha}. \end{aligned} \quad (55)$$

Теперь, с учетом (55), интеграл столкновений (54) примет такой вид:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_q = \int w \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{a}, \boldsymbol{\pi} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{a}, \boldsymbol{\alpha} \right) [f(\mathbf{p} + \mathbf{a}) \varphi(\boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\alpha}) - f(\mathbf{p}) \varphi(\boldsymbol{\pi})] d^3 \pi d\tau_{\alpha}, \quad (56)$$

где $d\tau_{\alpha}$ — элементарный объем переменных, описывающих столкновение.

До сих пор мы не сделали никаких предположений о характере столкновений, кроме предположения о том, что интеграл (54) определяется только парными столкновениями. Чтобы продвинуться дальше, нужно найти явную зависимость функции w от ее аргументов, учитывая специфику кулоновского характера взаимодействия и в первую очередь — медленное спадание потенциала взаимодействия с расстоянием между сталкивающимися частицами, которое приводит к бесконечно большому поперечнику рассеяния. В силу этого преобладающими будут далекие столкновения, т. е. столкновения с большим прицельным расстоянием b , при котором изменения импульса $\mathbf{a}$ и $\boldsymbol{\alpha}$ малы по сравнению с $\mathbf{p}$ и $\boldsymbol{\pi}$. Доказано [69], что при кулоновском потенциале именно эффект многих далеких соударений превышает эффект реже встречающихся близких соударений. Поэтому пока мы близкие соударения не станем принимать во внимание, а их влияние на интеграл столкновений и функцию распределения оценим несколько позже.

Малость величин $\mathbf{a}$ и $\boldsymbol{\alpha}$ позволяет разложить подынтегральное выражение (56) по компонентам этих векторов a_i, α_i . При таком разложении остаются только члены второго и более высокого порядка малости. Члены нулевого порядка непосредственно сокращаются. Члены первого порядка содержат слагаемые $w \varphi(\boldsymbol{\pi}) \frac{\partial f}{\partial p_i} a_i$

и $w f(\mathbf{p}) \frac{\partial \varphi}{\partial \pi_i} \alpha_i$ (здесь предполагается суммирование по одинаковым индексам). Они тоже исчезают после интегрирования по $d\tau_{\alpha}$ из-за четности функции w от a_i, α_i , а значит, нечетности произведений $wa_i, w\alpha_i$.

Ограничившись членами второго порядка малости, получим ²⁷

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_q = \frac{1}{2} \int \left\{ f \frac{\partial w}{\partial p_i} \frac{\partial \varphi}{\partial \pi_k} a_i \alpha_k + w \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial \varphi}{\partial \pi_k} a_i \alpha_k + \right.$$

²⁷ Подынтегральное выражение (56) состоит из семи слагаемых второго порядка малости. Одно из них, а именно $f \frac{\partial w}{\partial p_i} \frac{\partial \varphi}{\partial \pi_k} \alpha_i \alpha_k$, после интегрирования по частям по координате π_k сокращается со слагаемым $f w \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \pi_i \partial \pi_k} \alpha_i \alpha_k$.

Слагаемое $\varphi \frac{\partial w}{\partial \pi_i} \frac{\partial f}{\partial p_k} \alpha_i a_k$ после интегрирования по частям становится подобным одному из других слагаемых и вместе с ним входит в (57). Предполагается, что на границах интегрирования функция $\varphi(\boldsymbol{\pi})$ зануляется.

$$+ \varphi \frac{\partial w}{\partial \pi_i} \frac{\partial f}{\partial p_k} a_i a_k + \varphi \frac{\partial^2 f}{\partial p_i \partial p_k} w a_i a_k \} d^3 \pi d\tau_\alpha =$$

$$= \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{1}{2} \int w(p, \pi) \left[f \frac{\partial \varphi}{\partial \pi_k} a_i a_k + \varphi \frac{\partial f}{\partial p_k} a_i a_k \right] d^3 \pi d\tau_\alpha. \quad (57)$$

Выполним далее интегрирование по параметрам столкновения. Они задаются величиной и ориентацией прицельного расстояния одной частицы относительно другой. Удобно поэтому их определить в координатной системе относительного движения — в координатной системе, жестко связанной с носителем второго типа. В такой системе столкновение с большим прицельным расстоянием можно рассматривать как процесс, в котором относительная скорость u приближенно остается неизменной, а небольшое изменение импульса

$$a_\perp = e_1^* e_2^* b \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{(u^2 t^2 + b^2)^{3/2}} = \frac{2e_1^* e_2^*}{ub} \quad (58)$$

происходит в направлении, перпендикулярном к u (e_1^* и e_2^* — эффективные заряды сталкивающихся частиц). Число столкновений с такой передачей импульса за единицу времени пропорционально относительной скорости и площади попадания $b db d\gamma$, где γ — полярный угол в удобной здесь цилиндрической системе координат, ось которой совпадает с u :

$$w d\tau_\alpha = u b db d\gamma. \quad (59)$$

Интегрирование по параметрам столкновения при учете (58), (59) сводится к интегралам типа

$$I_{ik} = \frac{1}{2} \int w a_i a_k d\tau_\alpha = \frac{2e_1^{**} e_2^{**}}{u} \int \frac{b_i b_k}{b^3} db d\gamma; \quad (60)$$

b_i, b_k ($i, k = x, y$) — проекции b на координатные оси в плоскости, перпендикулярной u . Очевидно,

$$I_{xy} = 0; \quad I_{xx} = I_{yy} = \frac{2\pi e_1^{**} e_2^{**}}{u} \int \frac{db}{b}. \quad (61)$$

Интеграл (61) расходится логарифмически на обеих границах интегрирования 0 и ∞ . Принятое предположение о несущественности близких соударений и применение формулы (58) требуют также, чтобы нижняя граница интеграла (61) была отлична от нуля. Во всяком случае естественно считать наименьшим значением параметра столкновения b_0 такое, при котором кулоновская энергия взаимодействия сталкивающихся частиц $\frac{e_1^* e_2^*}{b_0}$ становится порядка средней кинетической энергии. По оценке Спитцера [70], $b_0 = \left| \frac{e_1^* e_2^*}{3T} \right|$.

Верхнюю границу интеграла (61) определим равной дебаевскому радиусу экранирования ρ_D , предполагая, что в нейтральной полупроводниковой плазме за пределами дебаевского радиуса кулоновские силы практически полностью экранируются. Разумеется, что для оправдания такого допущения нужно, чтобы в сфере радиуса ρ_D было достаточно большое число частиц, т. е. чтобы имело место неравенство

$$\frac{4}{3} \pi \rho_D^3 n \gg 1. \quad (62)$$

При температуре 100 К (и более высокой) и концентрации $n = 10^{15} \div 10^{16} \text{ см}^{-3}$ неравенство (62) у типичных полупроводников хорошо удовлетворяется. Оно удовлетворяется, по существу, всегда, когда актуальны кулоновские механизмы взаимодействия.

В указанных границах интегрирования I_{xx} и I_{yy} равны:

$$I_{xx} = I_{yy} = \frac{2\pi e_1^{*2} e_2^{*2}}{u} \ln \frac{\rho_D}{b_0}. \quad (63)$$

При переходе к лабораторной системе координат с произвольно ориентированными относительно направления u осями, I_{xx} , I_{yy} и I_{xy} преобразуются как компоненты тензора, т. е. в лабораторной системе координат компоненты $I_{ik}^{(0)}$ равны:

$$I_{ik}^{(0)} = I_{xx} \frac{u^2 \delta_{ik} - u_i u_k}{u^2} = 2\pi e_1^{*2} e_2^{*2} \frac{u^2 \delta_{ik} - u_i u_k}{u^3} \ln \frac{\rho_D}{b_0}, \quad (64)$$

где u_i , u_k — проекции относительной скорости частиц до столкновения (в лабораторной системе координат).

Подставив (64) в (57), получим интеграл столкновений в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_q = 2\pi e_1^{*2} e_2^{*2} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right) \frac{\partial}{\partial p_i} \int \left(\varphi \frac{\partial f}{\partial p_k} - f \frac{\partial \varphi}{\partial p_k} \right) \frac{u^2 \delta_{ik} - u_i u_k}{u^3} d^3 \pi. \quad (65)$$

Здесь уже на завершающем этапе вычислений учтен закон сохранения импульса $a_k = -\alpha_k$.

Как можно заключить из приведенного вывода, формулы (63) — (65) справедливы только тогда, когда $\rho_D \gg b_0$. При этом условии интеграл Ландау (из-за наличия логарифмической зависимости) не очень чувствителен к погрешностям в определении ρ_D и b_0 . Он нечувствителен также к поправкам, предложенным, например, в работе [67]. Нужно, впрочем, помнить, что поскольку тут рассматривались только парные соударения, то b_0 должно быть значительно меньше среднего расстояния между частицами, т. е.

$$b_0 \ll d. \quad (66)$$

Это неравенство налагает дополнительно к (23) ограничение на температуру и концентрации. В работе [71] показано, что при удовлетворении приведенных неравенств $\rho_D \gg b_0$, $b_0 \ll d$ полученные формулы правильно учитывают последовательные столкновения, распространенные на прицельные расстояния больше d , несмотря

на то что фактически такие столкновения уже нельзя отнести к независимым.

Нужно сказать, что некоторая искусственность, допущенная при выводе интеграла столкновений Ландау (65), может быть в известной мере устранена методами статистической физики, разработанными Н. Н. Боголюбовым [72]. В настоящее время известны [73—76] более строгие выводы этого интеграла и установлены границы его применимости. Показано, в частности, что учет динамической поляризации плазмы автоматически устраняет расходимость при больших прицельных параметрах. Новые методы позволили также, кроме вклада парных столкновений, учесть еще и вклад, вносимый взаимодействием электронов с коллективными колебаниями системы носителей [73]. Оценки, впрочем, показали, что этот вклад в полупроводниковой плазме обычно мал по сравнению с парным взаимодействием, и мы его учитывать не будем.

Применительно к электрон-электронным столкновениям интеграл (65) записывается так:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e = 2\pi e^{**} \ln\left(\frac{\rho_D}{b_0}\right) \frac{\partial}{\partial p_i} \int \left[f(p') \frac{\partial f}{\partial p_k} - f(p) \frac{\partial f}{\partial p'_k} \right] \frac{u^2 \delta_{ik} - u_i u_k}{u^3} d^3 p', \quad (67)$$

где e^* — эффективный заряд электрона (дырки). Он равен элементарному заряду, разделенному на показатель преломления.

Дебаевский радиус ρ_D определяется выражением

$$\rho_D = \left(\frac{T}{4\pi n e^{**}} \right)^{1/2}. \quad (68)$$

В приведенной записи (67) интеграл столкновений справедлив при произвольном законе дисперсии. В тех случаях, когда энергетическая структура полупроводника многодолинна и функции распределения в разных долинах различны, значение $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e$ для которой заданной долины определяется суммой выражений типа (65) и (67) по всем долинам, включая и рассматриваемую. Если имеется несколько типов носителей, то $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e$ для каждого типа носителей должен определяться также суммой интегралов (65) и (67).

Интеграл столкновений (65) значительно упрощается при рассеянии электронов (дырок) на примесных ионах. Скорость ионов, колеблющихся вблизи своих равновесных положений в решетке, гораздо меньше скорости электронов. Поэтому можно, считая относительную скорость u равной скорости электрона v , легко осуществить интегрирование по импульсам примесных ионов. Оно сводится фактически к интегралу нормировки. В результате получим

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i = 2\pi Z^2 e^{**} N \ln\left(\frac{\rho_D}{b_0}\right) \frac{\partial}{\partial p_i} \left[\frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{v^2 \delta_{ik} - v_i v_k}{v^3} \right]. \quad (69)$$

Здесь Ze^* — эффективный заряд иона; N — концентрация ионов. Обычно, $Z = 1$ и N у легированных (но не компенсированных) полупроводников равно концентрации электронов n (или концентрации дырок).

При стандартном законе дисперсии $\varepsilon = \frac{p^2}{2m^*}$ формула (69) имеет вид

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_I = 2\pi Z^2 e^{*2} m^* N \ln\left(\frac{\rho_D}{b_0}\right) \left[\frac{1}{p} \left(\Delta_p f - \frac{\partial^2 f}{\partial p^2} \right) - \frac{2}{p^2} \cdot \frac{\partial f}{\partial p} \right]. \quad (70)$$

Отсюда видно, что при разложении $f(p)$ в ряд (16) сферически симметричная часть $f_0(p)$ функции распределения в формуле (70) выпадет ($L_p f_0 = 0$). Это и означает, что в принятом приближении $u \approx v$ рассеяние носителей на заряженных центрах является чисто упругим. Применительно к полупроводникам такое допущение оправдано, поскольку энергообмен носителей с фононами более эффективен, чем с ионами. В газоразрядной плазме, и особенно в полностью ионизованной плазме, энергообмен электронов с ионами (и нейтральными атомами, молекулами, если они имеются в значительном количестве) является практически единственным механизмом энергообмена. Чтобы учесть его, нужно учесть скорость ионов (тяжелых частиц). Целесообразно все же малость отношения скорости электрона к скорости иона $\frac{v_I}{v}$ использовать и разложить относительную скорость u по степеням $\frac{v_I}{v}$. В таком разложении достаточно ограничиться членами второй степени отношения $\frac{v_I}{v}$.

Распределение ионов по скоростям или импульсам с большой точностью может считаться максвелловским с температурой решетки. Учтя это, подставив в (65) вместо $\phi(\pi)$ максвелловскую функцию и выполнив указанное разложение u , после несложных вычислений получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_I = 2\pi Z^2 e^{*2} m^* N \ln\left(\frac{\rho_D}{b_0}\right) \left\{ \frac{1}{p} \left(\Delta_p f - \frac{\partial^2 f}{\partial p^2} \right) - \right. \\ \left. - \frac{2}{p^2} \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{2m^*}{M} \frac{1}{p^2} \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{m^{*2} T}{M} \frac{1}{p^3} \left(3 \frac{\partial^2 f}{\partial p^2} - \Delta_p f \right) \right\}. \quad (71) \end{aligned}$$

По сравнению с (70) формула (71) содержит дополнительные слагаемые порядка $\frac{m^*}{M}$ (M — масса иона). Эти дополнительные слагаемые и определяют энергообмен.

Из формул (70), (71) видно, что $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_I$ изменяется с p по крайней мере не медленнее, чем p^{-3} . Следовательно, эффективность взаимодействия носителей с заряженными примесными ионами значительно повышается с уменьшением энергии носителей. Отсю-

да, в частности, вытекает, что при понижении температуры решетки роль рассеяния на заряженных примесях возрастает и начиная с некоторых температур этот вид рассеяния может оказаться доминирующим²⁸.

При достаточно низких температурах решетки необходимо принимать во внимание взаимодействие носителей также и с нейтральными примесными центрами. С большой степенью точности это взаимодействие можно считать упругим, поскольку энергия носителя, как правило, недостаточна для возбуждения центра, а масса центра на много порядков превосходит массу носителя.

Плотность вероятности $W_n(p, p')$ упругого рассеяния на нейтральных центрах в изотропных кристаллах с изотропной массой носителя из общих соображений может быть записана в виде

$$W_n(p, p') = N\nu\sigma(p, \theta) \frac{\delta(p' - p)}{p'^2}, \quad (72)$$

где N — концентрация нейтральных центров; $\sigma(p, \theta)$ — эффективный поперечник рассеяния, зависящий от модуля импульса p и угла θ между начальным и конечным направлениями векторов p и p' .

Из (72) непосредственно следует $W_n(p, p') = W_n(p', p)$. Поэтому интеграл столкновений носителей с нейтральными примесями можно записать так:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_n = N \int \nu(p) \sigma(p, \theta) [f(p') - f(p)] \frac{\delta(p' - p)}{p'^2} d^3p'. \quad (73)$$

Более общее выражение $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_n$, учитывающее конечность массы примесного центра, находится по общей схеме, изложенной в известной монографии Чепмена и Каулинга [77]. Для справки приведем его в виде, полученном в работе [78]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_n = & \left(1 + \frac{m^*}{M}\right)^3 \int W_n \left[p' - \frac{m^*}{M} \pi, p - \frac{m^*}{M} \pi - \right. \\ & \left. - \frac{m^*}{M} (p' - p) \right] \{f(p') \varphi(\pi) - f(p) \varphi(\pi + p' - p)\} d^3\pi d^3p'. \end{aligned} \quad (74)$$

Здесь $\varphi(\pi)$ — нормированная на единицу функция распределения нейтральных атомов по импульсам π . При выводе (74) предполагался стандартный закон дисперсии носителей и примесных центров.

Дальнейшее вычисление столкновительного интеграла на

²⁸ В литературе для описания столкновений электронов с примесными ионами часто применяется формула Брукса — Херринга [67]. Она отличается от (70) тем, что вместо $\ln(\rho_D/b_0)$ содержит более сложное выражение

$\ln(1 + \xi) - \frac{\xi}{1 + \xi}$, где $\xi = \frac{2mT\varepsilon}{\pi e^* \hbar^2 n}$. При выполнении неравенства $\frac{\rho_D}{b_0} \gg 1$, что необходимо для обоснования как (70), так и формулы Брукса — Херринга, последняя практически не отличается от (70).

нейтральных центрах $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_n$ связано с конкретизацией выражения, определяющего эффективный поперечник рассеяния $\sigma(p, \theta)$. Мы вернемся к нему в следующем параграфе, в котором речь пойдет о разложении интегралов столкновений по сферическим функциям (16) и определении времен релаксации, обусловленных различными механизмами рассеяния носителей.

§ 4. РАЗЛОЖЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ СТОЛКНОВЕНИЙ ПО СФЕРИЧЕСКИМ ФУНКЦИЯМ, ВРЕМЕНА РЕЛАКСАЦИИ

В § 1 было подчеркнуто, что аналитическое решение кинетического уравнения с интегральным оператором столкновений, как правило, не может быть получено в замкнутом виде. Поэтому чаще всего пользуются разложением решения в ряд (16). Докажем теперь, что в таком же виде будет выражена зависимость интеграла столкновений (12) от полярных углов ϑ, φ , если вероятности столкновений $W(p, p')$ и $W(p', p)$ зависят от угла θ между векторами p и p' но не зависят от их взаимной ориентации в кристалле.

Для доказательства воспользуемся известной теоремой [79], которую в наших обозначениях запишем так:

$$\iint Y_{lm}(\vartheta', \varphi') P_n(\cos \theta) \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' = \frac{4\pi}{2l+1} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \delta_{ln}. \quad (75)$$

Будем считать, что углы ϑ, φ характеризуют направление вектора p в выбранной системе координат, ϑ', φ' — направление вектора p' в той же системе, а углы θ, Φ — направление p' в системе координат с полярной осью, выбранной в направлении p ; $P_n(\cos \theta)$ — полином Лежандра.

Зависимость вероятностей $W(p, p')$, $W(p', p)$ от одного лишь угла θ позволяет представить их в виде суммы по полиномам Лежандра:

$$W(p', p) = \sum_n W_n(p', p) P_n(\cos \theta). \quad (76)$$

Интегрирование (76) с весовым множителем $Y_{lm}(\vartheta', \varphi')$ при учете теоремы (75) дает

$$\iint W(p', p) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' = \frac{4\pi}{2l+1} W_l(p', p) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (77)$$

или

$$\begin{aligned} \iint W(p', p) Y_{lm}(\vartheta', \varphi') \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' = \\ = Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \iint W(p', p) P_l(\cos \theta) \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi'. \end{aligned} \quad (78)$$

В (78) использованы свойства ортогональности полиномов Лежандра и разложение (76):

$$\begin{aligned} W_l(p', p) &= \frac{2l+1}{2} \int W(p', p) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{2l+1}{4\pi} \iint W(p', p) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta d\Phi = \\ &= \frac{2l+1}{4\pi} \iint W(p', p) P_l(\cos \theta) \sin \theta' d\theta' d\varphi'. \end{aligned}$$

Исходя из (78), мы можем теперь записать интеграл столкновений (12) при механизмах рассеяния, приводящих к зависимости $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c$ только от абсолютных значений и взаимной ориентации импульсов носителей до и после столкновения:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c &= \sum_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \int [W(p', p) f_{lm}(p') P_l(\cos \theta) - \\ &\quad - W(p, p') f_{lm}(p)] d^3p'. \end{aligned} \quad (79)$$

Легко убедиться, что тогда, когда рассеяние упруго, формула (79) совпадает с (17). Действительно, так как при упругом рассеянии $p = p'$, то и $f_{lm}(p') = f_{lm}(p)$, а также $W(p', p) = W(p, p')$. Поэтому по формуле (79)

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = \sum_{lm} f_{lm}(p) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \int W(p, p') [P_l(\cos \theta) - 1] d^3p'. \quad (80)$$

Если теперь обозначить

$$\tau_l^{-1} = \int W(p, p') [1 - P_l(\cos \theta)] d^3p', \quad (81)$$

то совпадение разложений (80) и (17) станет очевидным (при упругом рассеянии $L_p f_0 = 0$).

Будем в дальнейшем для краткости называть величины $\tau_l \equiv \tau_l(p)$ временами релаксации, хотя, как выше упоминалось, смысл времени релаксации можно приписать только величине $\tau_1(p)$ при слабых полях.

С точностью до величин порядка $\frac{m^*}{M}$ упругим является рассеяние носителей на заряженных и нейтральных примесных центрах. При температурах решетки выше ~ 1 К практически упругим (по крайней мере, для определения τ_l) можно считать также рассеяние на акустических колебаниях решетки, а при температурах выше дебаевской — и на оптических колебаниях.

При пренебрежении неупругостью взаимодействия с примесными ионами времена релаксации из-за рассеяния на них $(\tau_l)_I$ легко находятся из интеграла столкновений (70):

$$(\tau_l)_I^{-1} = 2\pi Z^2 e^{*4} m^* N \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right) \frac{l(l+1)}{p^3}. \quad (82)$$

Здесь учтено, что сферическая функция $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ удовлетворяет уравнению

$$\left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \right] Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = 0. \quad (83)$$

Время релаксации на нейтральных примесных центрах $(\tau_l)_n$ (считая его полностью упругим) согласно (72) и (81) определяется формулой

$$(\tau_l)_n^{-1} = N\nu \int \sigma(p, \theta) [1 - P_l(\cos \theta)] \sin \theta d\theta d\Phi. \quad (84)$$

Трудность дальнейших вычислений связана здесь с тем, что дифференциальный поперечник рассеяния $\sigma(p, \theta)$, по существу, корректно вычислить нельзя. Известно, что даже вычисление поперечника рассеяния электрона в вакууме на простейшем нейтральном центре — атоме водорода — представляет достаточно сложную задачу. Тем более сложной является задача определения $\sigma(p, \theta)$ рассеяния носителя в твердом теле на примесном центре. Облегчающим обстоятельством здесь может быть то, что рассеяние на нейтральных центрах существенно только при низких температурах. При таких температурах энергия носителя мала, намного меньше энергии возбуждения примесного центра, и с большой точностью в изотропных кристаллах (с изотропным законом дисперсии энергии носителя) рассеяние можно считать сферически симметричным. Поэтому по (84) время релаксации на нейтральных примесях одинаково для всех $l > 0$:

$$(\tau_n)^{-1} = N\nu(p) \sigma(p), \quad (85)$$

где $\sigma(p)$ — полный поперечник рассеяния при данном импульсе носителя p . Что касается численного значения $\sigma(p)$ и конкретного вида зависимости его от импульса p , то они должны определяться спецификой заданных центров и основного материала решетки.

Из литературы известны некоторые попытки определения $\sigma(p)$ и $\tau(p)$. Пирсон и Бардин [80] предложили рассматривать рассеяние на нейтральных примесях, как рассеяние на атомах водорода. Развивая эту идею, Эргинсоу [81], воспользовавшись результатами численного расчета работы [82], предложил формулу

$$(\tau_n)^{-1} = \frac{20\kappa N \hbar^3}{m^{*2} e^2}, \quad (86)$$

где κ — эффективная диэлектрическая проницаемость; m^* — эффективная масса носителя. В отдельных случаях [83] эта формула качественно соответствовала данным эксперимента. В общем же она, как отмечено в работах [84, 85], не может считаться удовлетворительной. Прежде всего, формула (86) не делает различия между рассеянием носителя (электрона или дырки) на доноре и акцепторе, не говоря уже об индивидуальных различиях каждого центра. Кроме того, она ведет себя неправильно при скоростях v , стремящихся к нулю. Для устранения указанных погрешностей

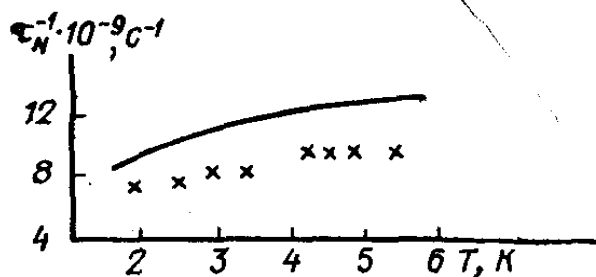


Рис. 12. Температурная зависимость обратного времени релаксации при рассеянии электронов на нейтральных донорах в германии. Концентрация доноров $N_D = 2,6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, концентрация акцепторов $N_A = 6,5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ (сплошная кривая — расчетная, эксперимент — (*)).

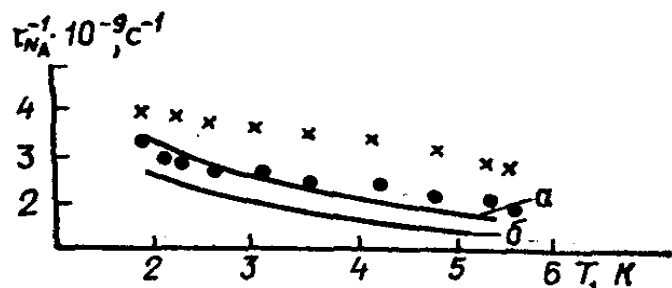


Рис. 13. Температурная зависимость обратного времени релаксации при рассеянии на нейтральных акцепторах:

а — $N_D = 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $N_A = 6,8 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (расчетная кривая сплошная, эксперимент — (*)); б — $N_D = 5,3 \times 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $N_A = 5,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (расчетная кривая — сплошная, эксперимент — (●)).

в работе [85] более точно рассматривалось рассеяние электрона на атоме водорода, а в работе [84] рассеяние дырки на акцепторе моделировалось рассеянием позитрона на атоме водорода. В обоих случаях учитывалась поляризация атома, находящегося в среде с заданной диэлектрической проницаемостью ϵ , а в первом случае — еще (в отличие от второго, где нет тождественных частиц) и взаимодействие спинов падающего и атомного электронов²⁹. Результаты вычислений [84, 85] были сопоставлены с экспериментально измеренной температурной зависимостью полуширины циклотронного резонанса в германии в области температур 1,9—5,5 К. Было отмечено (см. рис. 12 и 13) удовлетворительное качественное совпадение вычисленных и измеренных данных. Однако формулы, полученные в работах [84, 85], оказались слишком громоздкими и в силу некоторой искусственности принятой модели не могут считаться универсальными. Поэтому для грубой оценки пока приходится все еще пользоваться формулой (86), а лучше вообще считать время релаксации τ_n параметром, который в каждом конкретном случае должен определяться из эксперимента.

Перейдем теперь к вычислению времен релаксации, обусловленных взаимодействием носителей с решеткой. Начнем с рассмотрения взаимодействия с акустическими колебаниями. Если пренебречь неупругостью рассеяния, то соответствующее время релаксации можно сразу получить из общего выражения (31). После подстановки в (31) функции распределения в виде (16), учета (32) и закона сохранения импульса $\mathbf{p}' - \mathbf{p} = \pm \hbar \mathbf{q}$ получим

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a \cong \frac{D_{\perp}^2 T}{4\pi^2 \rho \hbar^4 s^2} \int \sum_{l,m} [f_{lm}(\mathbf{p}') Y_{lm}(\vartheta', \varphi') - f_{lm}(\mathbf{p}) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)] \times \\ \times \delta[\epsilon(\mathbf{p}') - \epsilon(\mathbf{p})] d^3 \mathbf{p}' \quad (l \geq 1). \quad (87)$$

²⁹ Последнее обстоятельство важно, поскольку рассеяние медленного электрона на атоме водорода качественно различно в триплетном и синглетном состояниях.

При изотропном законе дисперсии из (87) и теоремы (75) следует³⁰

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_a \cong - \frac{D_{\perp}^2 T p^2}{\pi \hbar^4 \rho s^2} \frac{dp}{d\varepsilon} \sum_{l,m} f_{lm}(p) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (l \geq 1). \quad (88)$$

Таким образом, при пренебрежении неупругостью времена релаксации носителей на акустических фононах при всех $l \geq 1$ одинаковы:

$$\tau_a = \frac{\pi \hbar^4 \rho s^2}{D_{\perp}^2 T p^2} \frac{d\varepsilon}{dp}. \quad (89)$$

Рассеяние на пьезоэлектрических фононах также является почти упругим, так как в актуальной области температур $T \gg \hbar \omega_q$. Поэтому, пренебрегая неупругостью и воспользовавшись приближением (32), можно представить интеграл столкновений (40) при изотропном законе дисперсии в таком виде:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пэ}} \cong \frac{e^{**} T}{4\pi^2 \hbar^2} \ll \frac{\hbar^2}{c} \gg \sum_{l \geq 1} \int [f_l(p') P_l(\cos \vartheta') - \\ - f_l(p) P_l(\cos \vartheta)] \delta[\varepsilon(p') - \varepsilon(p)] \frac{d^3 p'}{|p' - p|^2}. \end{aligned} \quad (90)$$

Мы учли здесь осевую симметрию задачи, вносимую внешним полем. Это позволило разложить функцию распределения по полиномам Лежандра, вместо более общего разложения по сферическим функциям, как в (16).

Наличие δ -функции в (90) упрощает интегрирование по энергии:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пэ}} = \frac{e^{**} T}{8\pi^2 \hbar^2} \frac{dp}{d\varepsilon} \ll \frac{\hbar^2}{c} \gg \sum_{l \geq 1} f_l(p) \int \frac{P_l(\cos \vartheta') - P_l(\cos \vartheta)}{1 - \cos \vartheta} \times \\ \times \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi', \end{aligned}$$

где ϑ , как и выше, — угол между направлениями импульсов до и после рассеяния. Перейдя далее к интегрированию по переменным ϑ , Φ и воспользовавшись теоремой сложения полиномов Лежандра [86]

$$\begin{aligned} P_l(\cos \vartheta') \equiv P_l(\cos \vartheta \cos \theta + \sin \vartheta \sin \theta \cos \Phi) = P_l(\cos \vartheta) P_l(\cos \theta) + \\ + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \vartheta) P_l^m(\cos \theta) \cos m\Phi, \end{aligned} \quad (91)$$

получим

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пэ}} = \frac{e^{**} T}{4\pi \hbar^2} \frac{dp}{d\varepsilon} \ll \frac{\hbar^2}{c} \gg \sum_{l \geq 1} f_l(p) P_l(\cos \vartheta) \int \frac{P_l(\cos \theta) - 1}{1 - \cos \theta} \sin \theta d\theta. \quad (92)$$

³⁰ В этом параграфе аргументы $\mathbf{r}$, t , не изменяющиеся при столкновении, для сокращения записи не указаны; вместо $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ записано $f(\mathbf{p})$.

Обратное время релаксации (при $l = 1$) отсюда получается таким:

$$(\tau_{\text{па}})^{-1} = \frac{e^{*2} T}{2\pi\hbar^2} \frac{dp}{d\varepsilon} \ll \frac{\hbar^2}{c} \gg. \quad (93)$$

Из (92) видно, что в отличие от рассеяния на акустических фононах время релаксации τ_l зависит от l , т. е. от номера полинома Лежандра³¹.

Существенное различие пьезоэлектрического рассеяния от рассеяния на акустических фононах проявляется в температурной зависимости времени релаксации, а значит, и подвижности. Поскольку $\frac{dp}{d\varepsilon} \sim \varepsilon^{-1/2}$, а в слабых полях средняя энергия $\varepsilon \sim T$, то $\tau_{\text{па}}$ по формуле (93) изменяется с температурой, как $T^{-1/2}$. Рассеяние на акустических фононах, как мы видели, дает по (89) зависимость $\tau_a \sim T^{-3/2}$. Поэтому в пьезоэлектрических кристаллах в определенном интервале низких температур пьезоэлектрическое рассеяние будет преобладать над акустическим. Такой вывод не изменится, если даже выполнить более точный расчет и учесть тензорный характер пьезоэлектрических и упругих констант, а также истинный закон дисперсии. Разумеется, подобный расчет сильно усложняет решение и связан с выполнением численных вычислений. Для наших целей, особенно для получения качественных закономерностей, формула (93) вполне достаточна.

До сих пор, рассматривая акустическое и пьезоэлектрическое рассеяние, мы пренебрегали неупругостью взаимодействия. Это не всегда законно. При температурах ниже дебаевской неупругое рассеяние на акустических фононах может быть главным или, по крайней мере, важным механизмом передачи решетке энергии, полученной носителями от внешнего поля. Остановимся на этом вопросе немного подробнее.

Энергия (15), передаваемая единичному объему решетки за единицу времени, при изотропном законе дисперсии согласно (17) выражается интегралом

$$\mathcal{E} = \int \varepsilon(p) L_p f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3p. \quad (94)$$

В слабых полях функция распределения незначительно отличается от равновесной ($L_p f_0 \cong 0$) и поэтому энергия $\mathcal{E}$ мала. Все явления переноса определяются практически одной только асимметричной частью $f(\mathbf{p})$. С ростом внешнего поля и вызванного им тока $\mathcal{E}$ увеличивается и $f_0(p)$ все в большей степени становится отличной от равновесной. Чтобы ее найти, нужно вычислить $L_p f_0$ при разных механизмах решеточного рассеяния.

Значение $L_p f_0$ при взаимодействии с акустическими фононами (обозначим его $L_a f_0$) при изотропном законе дисперсии и сохранении импульса $\hbar\mathbf{q} = \pm(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$, согласно (31), (32), находится из

³¹ Легко увидеть, что подынтегральное выражение (92) не содержит полюса: $P_l(\cos \theta) - 1$ делится на $1 - \cos \theta$ при всех значениях l .

интеграла

$$L_a f_0 = \frac{D_1^2}{8\pi^2 \hbar^4 s \rho} \left\{ \int \left[f_0(p') \left(\frac{T}{s} + |\mathbf{p}' - \mathbf{p}| \right) - f_0(p) \frac{T}{s} \right] \times \right. \\ \times \delta[\varepsilon(p') - \varepsilon(p) - s|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|] d^3 \mathbf{p}' + \int \left[f_0(p') \frac{T}{s} - \right. \\ \left. - f_0(p) \left(\frac{T}{s} + |\mathbf{p}' - \mathbf{p}| \right) \right] \delta[\varepsilon(p') - \varepsilon(p) + s|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|] d^3 \mathbf{p}' \left. \right\}. \quad (95)$$

Если выполнить интегрирование (95), предварительно разложив $f_0(p')$ и $\varepsilon(p')$ по малому параметру $(p' - p)/p$, и ограничиться членами третьего порядка малости, то получим³²

$$L_a f_0 = \frac{D_1^2 \alpha^4}{16\pi s^4 \hbar^4 \rho} \frac{1}{p^2} \frac{d}{dp} \left[p^2 \frac{d\varepsilon}{dp} \left(\frac{d\varepsilon}{dp} f_0 + T \frac{df_0}{dp} \right) \right]. \quad (96)$$

Формулу (96) полезно записать в виде, в котором константа деформационного потенциала D_1 выражена через обратное время релаксации или обратную длину свободного пробега $l_a = \frac{d\varepsilon}{dp} \tau_a$ носителя на акустических фононах. Так как при рассеянии импульса неупругость столкновения с акустическими фононами проявляется слабо, то τ_a можно определить формулой (89). Вместо (96) можно записать

$$L_a f_0 = \frac{\alpha^4}{16l_a s^2 T} \cdot \frac{1}{p^4} \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right)^2 \frac{d}{dp} \left[p^2 \frac{d\varepsilon}{dp} \left(\frac{d\varepsilon}{dp} f_0 + T \frac{df_0}{dp} \right) \right] \quad (97) \\ (\alpha \approx 2m^* s).$$

С ростом температуры решетки³³ или приложенного поля начинает возрастать роль оптических колебаний решетки в энергообмене. При температурах выше дебаевской именно взаимодействие носителей с оптическими колебаниями становится главным механизмом энергообмена (хотя изменение импульса все еще может определяться в основном акустическими фононами).

Для вычисления $L_p f_0$ на оптических фононах (обозначим его $L_{оп} f_0$) подставим в (43) вместо $f(p)$ и $\varepsilon(p)$ их сферически симметричные части. При изотропном законе дисперсии вычисление здесь облегчается тем, что наличие δ -функции сразу дает ответ:

$$L_{оп} f_0 = \frac{D_0^2 K^2}{2\pi \hbar^3 \omega_0 \rho} \left\{ [f_0(\varepsilon + \hbar \omega_0) (N_0 + 1) - f_0(\varepsilon) N_0] \times \right.$$

³² Малость $|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|$ по сравнению с p непосредственно следует из законов сохранения энергии и импульса при поглощении (испускании) акустического фонона и малости скорости звука s по сравнению со скоростью носителя. Кстати, из этих законов можно увидеть, что наибольшее значение $\hbar q \cong \cong 2p$. Этим подтверждается утверждение § 2, что с носителями взаимодействуют только длинноволновые фононы $(q \leq \frac{2p}{\hbar})$.

³³ Из формулы (97) видно, что в равновесном состоянии, описываемом максвелловской функцией распределения, как и следовало ожидать, $L_a f_0 = 0$.

$$\times \left(p'^2 \frac{dp'}{d\varepsilon} \right)_{p' \equiv p'(\varepsilon + \hbar\omega_0)} + [f_0(\varepsilon - \hbar\omega_0) N_0 - f_0(\varepsilon)(N_0 + 1)] \left(p'^2 \frac{dp'}{d\varepsilon} \right)_{p' \equiv p'(\varepsilon - \hbar\omega_0)} \}. \quad (98)$$

Когда $\varepsilon < \hbar\omega_0$, вторую строку (98), как и вторую строку (43), следует считать равной нулю.

Для вычисления времен релаксации на оптических фононах запишем асимметричную часть интеграла столкновений (43):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{оп}} - L_{\text{оп}} f_0 = - \frac{D_0^2 K^2}{2\pi \hbar^3 \omega_0 \rho} \sum_{l,m} f_{lm}(p) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \times \\ \times \left[N_0 \left(p'^2 \frac{dp'}{d\varepsilon} \right)_{p' \equiv p'(\varepsilon + \hbar\omega_0)} + (N_0 + 1) \left(p'^2 \frac{dp'}{d\varepsilon} \right)_{p' \equiv p'(\varepsilon - \hbar\omega_0)} \right]. \quad (99)$$

Отсюда обратное время релаксации получается одинаковым для всех $l \geq 1$:

$$(\tau_{\text{оп}})^{-1} = \frac{D_0^2 K^2}{2\pi \hbar^3 \omega_0 \rho} \left[N_0 \left(p'^2 \frac{dp'}{d\varepsilon} \right)_{p'(\varepsilon + \hbar\omega_0)} + (N_0 + 1) \left(p'^2 \frac{dp'}{d\varepsilon} \right)_{p'(\varepsilon - \hbar\omega_0)} \right]. \quad (100)$$

Если средняя энергия носителей $\varepsilon \gg \hbar\omega_0$ (высокие температуры, сильные поля), вместо (100) можно пользоваться приближенной, но более удобной формулой

$$(\tau_{\text{оп}})^{-1} = \frac{D_0^2 K^2}{2\pi \hbar^3 \omega_0 \rho} (2N_0 + 1) p^2 \frac{dp}{d\varepsilon}. \quad (101)$$

При $\varepsilon \gg \hbar\omega_0$ можно и в (98) разложить выражение по степеням $\frac{\hbar\omega_0}{\varepsilon}$ вплоть до членов второго порядка и вместо формулы в конечных разностях перейти к более удобной дифференциальной:

$$L_{\text{оп}} f_0 = \frac{D_0^2 K^2}{18\pi \hbar^2 \rho} \frac{1}{p^2} \frac{d\varepsilon}{dp} \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \left[f_0 + \hbar\omega_0 \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) \frac{df_0}{d\varepsilon} \right] \left(\frac{dp^3}{d\varepsilon} \right)^2 \right\}. \quad (102)$$

К сожалению, чаще всего приходится иметь дело с температурой и полями, когда средняя энергия $\varepsilon < \hbar\omega_0$. Учет взаимодействия носителей в гомеоплярных кристаллах с оптическими колебаниями тогда приводит к интегро-дифференциальному в конечных разностях кинетическому уравнению. Решение его весьма сложно и требует применения особых методов. Некоторые из них будут рассмотрены ниже.

Разностные интегро-дифференциальные уравнения получаются и при учете взаимодействия носителей с оптическими колебаниями в полярных кристаллах. По формуле (51) $L_p f_0$ при рассеянии на

полярных оптических колебаниях (обозначим $L_{p0}f_0$)

$$L_{p0}f_0 = \frac{e^2\omega_0}{\hbar p} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \left\{ [f_0(\varepsilon + \hbar\omega_0)(N_0 + 1) - f_0(\varepsilon)N_0] \times \right. \\ \times \left(p' \frac{dp'}{d\varepsilon} \ln \frac{p' + p}{p' - p} \right)_{p'(\varepsilon + \hbar\omega_0)} + [f_0(\varepsilon - \hbar\omega_0)N_0 - f_0(\varepsilon)(N_0 + 1)] \times \\ \times \left(p' \frac{dp'}{d\varepsilon} \ln \frac{p' + p}{p - p'} \right)_{p'(\varepsilon - \hbar\omega_0)} \left. \right\}. \quad (103)$$

Это весьма близко по форме к (98). Сложнее вычисление асимметричной части интеграла столкновений (51). Трудность связана с тем, что вероятность столкновения $W_{p0}(p, p')$ зависит в соответствии с (50) от угла θ между импульсами до и после столкновения, что лишает нас возможности ввести времена релаксации в указанном выше смысле. Слагаемые суммы (17) теперь не пропорциональны $f_{lm}(p)$, хотя по теореме (75) их пропорциональность $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ сохраняется.

Вычисление $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{p0}$ проведем по следующей схеме: подставим в (51) функцию распределения (16) и прежде всего учтем (77):

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{p0} = \frac{e^2\omega_0}{2\pi\hbar} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \sum_{l,m} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \int \{ [f_{lm}(p') P_l(\cos \theta) \times \\ \times (N_0 + 1) - f_{lm}(p) N_0] \delta[\varepsilon(p') - \varepsilon(p) - \hbar\omega_0] + \\ + [f_{lm}(p') P_l(\cos \theta) N_0 - f_{lm}(p)(N_0 + 1)] \delta[\varepsilon(p') - \varepsilon(p) + \hbar\omega_0] \} \times \\ \times \frac{d^3p'}{p'^2 + p^2 - 2pp' \cos \theta}. \quad (104)$$

Далее воспользуемся известным в теории специальных функций разложением [86]

$$\frac{1}{p'^2 + p^2 - 2pp' \cos \theta} = \frac{1}{2pp'} \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1) P_k(\cos \theta) Q_k\left(\frac{p'^2 + p^2}{2pp'}\right), \quad (105)$$

где $Q_k\left(\frac{p'^2 + p^2}{2pp'}\right)$ — функция Лежандра второго рода. Эта формула позволяет просто проинтегрировать (104) по углам. Окончательно, имея в виду также ортогональность полиномов Лежандра, получаем

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{p0} = \frac{e^2\omega_0}{\hbar p} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \sum_{l,m} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \left\{ \left[f_{lm}(p') Q_l\left(\frac{p'^2 + p^2}{2pp'}\right) \times \right. \right. \\ \times (N_0 + 1) - f_{lm}(p) Q_l\left(\frac{p'^2 + p^2}{2pp'}\right) N_0 \left. \right] \left(p' \frac{dp'}{d\varepsilon} \right)_{p'(\varepsilon + \hbar\omega_0)} +$$

$$+ \left[f_{lm}(p') Q_l \left(\frac{p'^2 + p^2}{2pp'} \right) N_0 - f_{lm}(p) Q_0 \left(\frac{p'^2 + p^2}{2pp'} \right) (N_0 + 1) \right] \times \\ \times \left(p' \frac{dp'}{d\varepsilon} \right)_{p'(\varepsilon - \hbar\omega_0)} \}. \quad (106)$$

Слагаемое $l = m = 0$ в (106) совпадает с ранее полученным (103). Структура слагаемых с $l \neq 0$, как теперь непосредственно видно, не позволяет вводить время релаксации. Только при высоких температурах решетки или сильных полях ($\varepsilon \gg \hbar\omega_0$) можно, как и при рассеянии на неполярных оптических фононах, приближенно ввести времена релаксации. Запишем наиболее часто встречающееся в теории явлений переноса $(\tau_{po})_1$:

$$(\tau_{po})_{l=1}^{-1} = \frac{e^2\omega_0}{\hbar} (2N_0 + 1) \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \frac{dp}{d\varepsilon}. \quad (107)$$

Запишем еще явное выражение $L_{po}f_0$ при $\varepsilon \gg \hbar\omega_0$. Оно также получено путем разложения (103) по степеням $\hbar\omega_0/\varepsilon$ с учетом квадратичных членов разложения

$$L_{po}f_0 = \left(\frac{e\omega_0}{p} \right)^2 \frac{d\varepsilon}{dp} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \ln^{-1} \left(\frac{2p}{\hbar\omega_0} \frac{d\varepsilon}{dp} \right) \times \\ \times \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \left[p \frac{dp}{d\varepsilon} \ln \left(\frac{2p}{\hbar\omega_0} \frac{d\varepsilon}{dp} \right) \right]^2 \left[f_0(p) + \hbar\omega_0 \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) \frac{df_0}{d\varepsilon} \right] \right\}. \quad (108)$$

В заключение настоящего параграфа остановимся на некоторых преобразованиях кулоновского интеграла (65), которые понадобятся при решении кинетического уравнения. Найдем прежде всего значение (65), когда обе функции $f(p)$ и $\varphi(\pi)$ заменены своими сферически симметричными частями $f_0(p)$ и $\varphi_0(\pi)$. Именно в этом случае при изотропном законе дисперсии указанный интеграл определяет энергетический обмен между носителями. Начиная с некоторых концентраций носителей такой обмен (будет показано ниже) навязывает системе стиль функций распределения.

Пусть эффективные массы носителей скаляры и равны m_1 и m_2 . После простых, хотя и несколько громоздких вычислений, найдем

$$\left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_q = \frac{16\pi^2 m_1^2 e^{**}}{3m_2} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right) \frac{1}{p^2} \frac{d}{dp} \left[\left(\frac{m_2 p}{m_1} \right)^2 \frac{df_0}{dp} \times \right. \\ \left. \times \int_0^\infty \varphi_0(p') \Theta^3 \left(\frac{m_1 p'}{m_2 p} \right) p' dp' + 3f_0(p) \int_0^{m_2 p/m_1} \varphi_0(p') p'^2 dp' \right]. \quad (109)$$

Мы ввели здесь для сокращения записи функцию $\Theta(x)$:

$$\Theta(x) = \begin{cases} x & \text{при } x \leq 1, \\ 1 & \text{при } x \geq 1. \end{cases} \quad (110)$$

Дальнейшая подстановка в кулоновский интеграл (65) следующих слагаемых разложения (16) приводит к более громоздким

вычислениям и более сложным выражениям. В рассмотренных пока задачах оказалось достаточным ограничиться дополнительно к (109) слагаемыми, содержащими члены ряда (16) с $l = 1$. Именно эти слагаемые определяют обмен импульсами.

Когда взаимодействие происходит между однотипными носителями, оно не изменяет полного импульса. Поэтому взаимный обмен импульсами при кулоновских столкновениях может сказаться на явлениях переноса только при наличии других механизмов рассеяния. В этом случае, как будет показано, эффективность проявления межэлектронного обмена импульсами требует намного больших концентраций, чем эффективность проявления межэлектронного обмена энергией.

Иначе обстоит дело, когда система состоит из носителей разного типа (например, электронов и дырок или легких и тяжелых дырок). В этом случае при сохранении полного импульса всей системы носителей кулоновское взаимодействие изменяет импульс каждого типа носителей по-разному. Это сразу же скажется на их функциях распределения и, как следствие, на явлениях переноса.

Определим нужные для расчета коэффициентов переноса слагаемые интеграла (65), содержащие в качестве множителя $\frac{p_\alpha}{p}$ (p_α — проекция импульса на направление внешнего поля). Таковыми слагаемыми являются:

$$I_{1\alpha} = 2\pi e_1^{*2} e_2^{*2} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right) \frac{\partial}{\partial p_i} \int \left[\varphi_0(\pi) \frac{\partial}{\partial p_h} \left(\frac{p_\alpha}{p} f_1 \right) - \frac{p_\alpha}{p} f_1 \frac{\partial \varphi_0}{\partial \pi_h} \right] \times \\ \times \frac{u^2 \delta_{ih} - u_i u_h}{u^3} d^3 \pi, \quad (111)$$

$$I_{2\alpha} = 2\pi e_1^{*2} e_2^{*2} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right) \frac{\partial}{\partial p_i} \int \left[\frac{\pi_\alpha}{\pi} \varphi_1(\pi) \frac{\partial f_0}{\partial p_h} - \right. \\ \left. - f_0(p) \frac{\partial}{\partial \pi_h} \left(\frac{\pi_\alpha}{\pi} \varphi_1 \right) \right] \frac{u^2 \delta_{ih} - u_i u_h}{u^3} d^3 \pi.$$

Интегрирование (111) по углам дает

$$I_{1\alpha} = \frac{16\pi^2 m_1^2 e_1^{*2} e_2^{*2}}{3m_2} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right) \frac{p_\alpha}{p} \left\{ \frac{1}{p^2} \frac{d}{dp} \left[\left(\frac{m_2 p}{m_1} \right)^2 \frac{df_1}{dp} \times \right. \right. \\ \times \int_0^\infty \varphi_0(p') \Theta^3 \left(\frac{m_1 p'}{m_2 p} \right) p' dp' + 3f_1(p) \int_0^{m_2 p/m_1} \varphi_0(p') p'^2 dp' \Big] + \\ + \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2 \frac{1}{p^2} f_1(p) \left[\int_0^\infty \varphi_0(p') \Theta^3 \left(\frac{m_1 p'}{m_2 p} \right) p' dp' - \right. \\ \left. \left. - 3 \int_0^\infty \varphi_0(p') \Theta \left(\frac{m_1 p'}{m_2 p} \right) p' dp' \right] \right\}, \quad (112)$$

$$\begin{aligned}
I_{2\alpha} = & \frac{16\pi^2 m_1^2 e_1^{\bullet\bullet} e_2^{\bullet\bullet}}{m_2} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right) \frac{p_\alpha}{p} \left\{ \frac{1}{5} \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^3 \frac{1}{p^3} \times \right. \\
& \times \frac{d}{dp} \left[p^4 \frac{df_0}{dp} \int_0^\infty \varphi_1(p') \Theta^5 \left(\frac{m_1 p'}{m_2 p} \right) dp' \right] - \frac{1}{3} \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^3 \frac{df_0}{dp} \times \\
& \times \int_0^\infty \varphi_1(p') \Theta^3 \left(\frac{m_1 p'}{m_2 p} \right) dp' - \frac{1}{3} \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2 \frac{df_0}{dp} \times \\
& \left. \times \frac{d}{dp} \left[p \int_0^\infty \varphi_1(p') \Theta^3 \left(\frac{m_1 p'}{m_2 p} \right) dp' + \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^3 f_0(p) \varphi_1 \left(\frac{m_2}{m_1} p \right) \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Если $m_2 \gg m_1$, формулы (111), (112) можно упростить по параметру малости $\frac{m_1}{m_2}$. При соизмеримых массах m_1 и m_2 приходится, к сожалению, пользоваться приведенными здесь сложными выражениями. Они, в частности, должны применяться в задаче об увлечении одного типа носителя другими.

ГОРЯЧИЕ ЭЛЕКТРОНЫ В АТОМАРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

§ 1. ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА И НАГРЕВ ЭЛЕКТРОНОВ ПОЛЕМ

Настоящей главой мы начинаем количественное рассмотрение в полупроводниках неравновесных состояний, характеризующихся наличием макроскопических потоков носителей или энергии. Явления, обусловленные такими потоками, обычно называют явлениями переноса или кинетическими явлениями. Они возникают при наличии постоянных и переменных электромагнитных полей, градиентах температуры или концентрации носителей, при действующей на полупроводник переменной во времени деформации (например, звуковой волны) и других факторов. В этой главе нас будет интересовать макроскопический перенос заряда под влиянием главным образом постоянного в пространстве и времени электрического поля, т. е. постоянный электрический ток.

Как указывалось в предыдущей главе, вычисление электрического тока требует знания функции распределения носителей по импульсам. В равновесном состоянии (при отсутствии тока) это распределение для всех материалов описывается функцией Максвелла или Ферми (в случае вырожденного газа носителей). Конкретные свойства материала отражаются лишь в значении концентрации носителей (положении химического потенциала) и в виде закона дисперсии энергии $\varepsilon = \varepsilon(p)$. В неравновесном (хотя, возможно, и стационарном) состоянии функция распределения в каждом отдельном случае должна находиться из кинетического уравнения, и она оказывается зависящей не только от закона дисперсии и величины внешних факторов, но также от механизмов рассеяния носителей.

В постоянном электрическом поле стационарное состояние с током вообще не может иметь место без наличия механизмов рассеяния. Оно устанавливается³⁴ только благодаря тому, что приобретенную в поле энергию носители, рассеиваясь на различных

³⁴ Волленбург [87], исследуя временное уравнение Больцмана методом функционального анализа, доказал стабильность стационарного решения в постоянном внешнем поле.

нарушениях периодичности кристалла, передают полупроводнику. Это, разумеется, не означает, что энергия передается при каждом акте рассеяния (акте столкновения). Речь идет о передаче энергии решетке всем «газом» носителей. Сказанное также не означает, что в поле не изменяется средняя энергия носителей. Наоборот, после установления стационарного тока средняя энергия носителей становится больше равновесной. Часто такое возрастание энергии можно характеризовать как нагрев носителей, и тогда говорят о «теплых», а в некоторых случаях даже о «горячих» электронах, или дырках.

Свойства горячих носителей тока будут подробно изучены нами в дальнейшем. Здесь же для лучшего понимания полезно пока качественно, «на пальцах», остановиться на физическом смысле нагрева электронов (дырок) и рассмотреть причину, по которой у одних материалов легко получить значительный разогрев, а у других при таком же поле это не удастся.

Передачу энергии решетке (т. е. выделение джоулевого тепла) следует понимать так: в промежутках между двумя актами рассеяния на длине свободного пробега электрическое поле изменяет кинетическую энергию электрона (для определенности), увеличивая или уменьшая ее в зависимости от угла между направлением его скорости и направлением ускоряющего поля. Очевидно, однако, что при наличии тока вдоль ускоряющего поля движется больше электронов, чем в противоположном направлении. Поэтому количество электронов, увеличивающих свою энергию, больше, чем теряющих ее, и само изменение энергии за время свободного пробега, как легко увидеть, у электронов, движущихся вдоль поля, больше, чем у движущихся в противоположном направлении. Отсюда ясно, что с увеличением напряженности поля растет и энергия, приобретаемая электронным газом.

Указанное увеличение энергии не будет беспредельным. Нужно иметь в виду, что с ростом энергии электрона растут, как правило, и его энергетические потери. Электроны начинают взаимодействовать с более энергичными акустическими фононами (вспомним, что электроны эффективно взаимодействуют с фононами, импульс которых близок к импульсу электронов). Кроме того, включаются новые механизмы рассеяния, приводящие к дополнительным потерям энергии (оптические фононы, ударная ионизация и т. д.). В результате устанавливается динамическое равновесие, при котором вся полученная от поля энергия передается электронами решетке, но электронный газ уже не находится в термодинамическом равновесии с решеткой полупроводника. При наличии тока средняя энергия электрона может поэтому значительно превосходить равновесную тепловую энергию $\frac{3}{2} T$ (в невырожденном случае), где T — температура решетки полупроводника.

Во многих актуальных в эксперименте ситуациях, о которых речь пойдет ниже, увеличение средней энергии электронов в поле

приводит к такому распределению их по импульсам (или энергии), которое с большой точностью тоже описывается функцией Максвелла (или Ферми), но с заменяющим температуру параметром T_e , превосходящим T . В таких ситуациях целесообразно приписать этому параметру смысл электронной температуры и считать электронный газ нагретым.

Оценим, не вдаваясь в детали, величину разогрева в простейшем случае однородного полупроводника с изотропным законом дисперсии энергии. Электронная температура T_e (когда состояние электронного газа можно ею характеризовать) может быть найдена из уравнения баланса мощности: мощность, полученная электронами от внешнего поля (джоулева мощность), равна мощности, переданной решетке. Последняя зависит от конкретных механизмов взаимодействия электронов с нарушениями решетки. Не рассматривая эти механизмы, представим переданную единице объема мощность P_L при относительно слабом разогреве электронов в следующем (достаточном для оценки) виде:

$$P_L = \gamma \delta n v_{эф} (T_e - T). \quad (1)$$

Здесь δ — средняя энергия, переданная электроном при одном соударении; n — концентрация электронов; $v_{эф}$ — эффективная частота соударений; γ — численный множитель порядка единицы.

Мощность P_F , получаемая единицей объема от поля, равна jF , где j — плотность тока, а F — напряженность поля. Приравняв обе мощности, получим

$$T_e - T = \frac{P_F}{\gamma \delta n v_{эф}}. \quad (2)$$

Из данной формулы прежде всего можно заключить, что разогрев электронного газа при фиксированной вводимой в образец мощности P_F обратно пропорционален концентрации электронов. Поэтому в материалах с высокой электронной концентрацией заметный разогрев в стационарных условиях затруднителен или даже вообще невозможен, поскольку он связан со значительным увеличением вводимой мощности, приводящей уже к разрушению (расплавлению) материала. По этой причине, в частности, не удастся сильно разогреть электроны в металлах.

Из формулы (2) далее видно, что разогрев электронов обратно пропорционален эффективной частоте соударений $v_{эф}$ и средней передаваемой энергии δ . Частота соударений, как было показано во второй главе, пропорциональна квадрату константы связи электронов с фононами. Уменьшение этой константы, а значит, и уменьшение частоты $v_{эф}$ приводит к увеличению подвижности электронов. Отсюда вывод: разогрев легче наблюдать у полупроводников с высокими значениями подвижности, как, например, у Ge, Si, InSb, Te и других.

Остановимся на зависимости разогрева $T_e - T$ от температуры решетки T . С ее понижением уменьшается, как правило, частота

соударений $v_{эф}$ и, кроме того, еще уменьшается δ , так как электроны (энергия которых также уменьшается) взаимодействуют с менее энергичными фононами. Обе эти причины действуют в одном направлении. Таким образом, уменьшение температуры решетки способствует увеличению разогрева электронного газа. Однако нужно иметь в виду, что при понижении температуры решетки и сохранении концентрации электронов может наступить вырождение электронного газа. Это скажется, естественно, на условии его разогрева. Разогрев затруднится, так как во всех кинетических эффектах, в том числе и во взаимодействии с решеткой, будут принимать участие электроны не со средней энергией, а с энергией Ферми. При столкновениях с решеткой они излучают более энергичный фотон, что увеличивает δ . Как правило, для таких электронов увеличивается также и $v_{эф}$.

Разогрев электронов током приводит к качественно новым кинетическим эффектам, не имеющим места в слабых полях. Частично такие новые эффекты уже нашли широкое применение в ряде приборов на полупроводниках с высокой подвижностью носителей. Закон дисперсии у этих полупроводников отличается от стандартного параболического закона $\varepsilon = \frac{p^2}{2m^*}$, и мы ниже будем учитывать его конкретный вид для каждого материала. Тем не менее, целесообразно все же начать исследование горячих электронов с рассмотрения стандартного закона. Исторически исследование свойств полупроводников началось именно на основе этого закона. Ясно, что на этом простом законе дисперсии легче продемонстрировать аналитические методы решения кинетического уравнения и оценить обычно используемые приближения. Мы увидим, что значительную часть результатов и методов, развитых на основе закона $\varepsilon = \frac{p^2}{2m^*}$, можно будет использовать с небольшими изменениями и в случае более сложных законов дисперсии. Наконец, в некоторых ситуациях решение, полученное с простым законом, будет играть роль нулевого приближения в задаче с более сложным законом дисперсии. Добавим еще, что решения, полученные с законом $\varepsilon = \frac{p^2}{2m^*}$ для полупроводников, почти автоматически могут быть перенесены на газоразрядную плазму, где этот закон (исключая релятивистскую плазму) строго выполняется.

§ 2. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ И ДИФфуЗИОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Рассмотрим бесконечный однородный полупроводник с постоянной во времени и пространстве концентрацией носителей n . Для определенности в этой главе будем считать, если не оговорено противное, что носителями являются электроны, хотя, разумеется,

все полученные результаты в равной мере могут относиться и к дыркам. Примем, как отмечалось выше, стандартный закон дисперсии $\varepsilon = \frac{p^2}{2m^*}$, характеризуемый постоянной эффективной массой m^* . Пусть теперь к такому полупроводнику в направлении x приложено однородное, постоянное во времени электрическое поле напряженности F . Определим функцию распределения электронов по импульсам $f(\mathbf{p})$ и плотность тока $\mathbf{j}$.

Кинетическое уравнение задачи здесь упрощается по сравнению с уравнением (2.13) и имеет вид

$$eF \frac{\partial f}{\partial p_x} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c. \quad (3)$$

Однако и в таком упрощенном виде оно все еще остается сложным интегро-дифференциальным уравнением, которое точно решить не удастся. Поэтому будем искать приближенное решение, основываясь на разложении (2.16). Мы его запишем, учитывая осевую симметрию задачи, в виде

$$f(\mathbf{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\varepsilon) P_l(\cos \vartheta), \quad (4)$$

где $P_l(\cos \vartheta)$ — полиномы Лежандра; ϑ — угол между направлением импульса $\mathbf{p}$ и напряженностью поля F .

Целесообразность разложения (4), кроме условия симметрии, здесь еще диктуется тем, что часто, даже при сильном поле, функция $f(\mathbf{p})$ близка к своей сферически симметричной части $f_0(\varepsilon)$, что оправдывает сделанное во второй главе утверждение о возможности обрыва ряда (4) на значении $l = 1$. Отметим, кстати, что для вычисления тока, потока энергии и средней энергии электронного газа достаточно знание только двух коэффициентов ряда (4), именно коэффициентов $f_0(\varepsilon)$ и $f_1(\varepsilon)$. Действительно, в силу ортогональности полиномов Лежандра, концентрация электронов n , например, запишется в виде

$$n = \int f(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p} = \int \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\varepsilon) P_l(\cos \vartheta) p^2 \sin \vartheta dp d\vartheta d\varphi = 4\pi \int f_0(\varepsilon) p^2 dp; \quad (5)$$

средняя энергия $\bar{\varepsilon}$ — в виде

$$\bar{\varepsilon} = \int \varepsilon f(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p} = 4\pi \int \varepsilon f_0(\varepsilon) p^2 dp, \quad (6)$$

плотность тока j_x —

$$\begin{aligned} j_x &= e \int v_x f(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p} = e \int v \cos \vartheta \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\varepsilon) P_l(\cos \vartheta) d^3\mathbf{p} = \\ &= \frac{4\pi}{3} \int v f_1(\varepsilon) p^2 dp, \end{aligned} \quad (7)$$

и поток мощности, переносимой электронами через единицу поверхности, перпендикулярной полю:

$$Q_x = \int \epsilon \nu_x f(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = \frac{4\pi}{3} \int \nu \epsilon f_1(\epsilon) p^2 dp. \quad (8)$$

Точные выражения $f_0(\epsilon)$ и $f_1(\epsilon)$, а значит, и точные выражения величин (5) — (8) могут, естественно, быть получены только при учете всего ряда (4). Посмотрим все же на примере атомарных полупроводников, при каких условиях учет членов ряда с $l > 1$ не существен и какая при этом допускается погрешность.

Учтем взаимодействие электронов с акустическими и оптическими фононами. Интеграл столкновений в уравнении (3) представим в виде суммы

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{оп}, \quad (9)$$

слагаемые которой определяют интегралы столкновений с акустическими $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a$ и оптическими фононами $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{оп}$. Эти интегралы, согласно (2.17), (2.88), (2.99) и вида функции распределения (4), могут быть представлены так:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a = L_a f_0 - \frac{1}{\tau_a} \sum_{l=1}^{\infty} f_l(\epsilon) P_l(\cos \vartheta), \quad (10)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{оп} = L_{оп} f_0 - \frac{1}{\tau_{оп}} \sum_{l=1}^{\infty} f_l(\epsilon) P_l(\cos \vartheta). \quad (11)$$

Здесь $L_a f_0$ и $L_{оп} f_0$ заданы формулами (2.96) и (2.98) соответственно, а $(\tau_a)^{-1}$ и $(\tau_{оп})^{-1}$ — формулами (2.89) и (2.100). Напомним, что времена релаксации τ_a и $\tau_{оп}$ не зависят от индекса l при $l \geq 1$.

Полевой член в уравнении (3) на функции (4) имеет вид

$$eF \frac{\partial f}{\partial p_x} = eF \left[\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{p} (1 - \cos^2 \vartheta) \frac{\partial}{\partial (\cos \vartheta)} \right] \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\epsilon) P_l(\cos \vartheta). \quad (12)$$

Воспользовавшись известными рекуррентными формулами

$$\cos \vartheta P_l(\cos \vartheta) = \frac{1}{2l+1} [l P_{l-1}(\cos \vartheta) + (l+1) P_{l+1}(\cos \vartheta)], \quad (13)$$

$$\frac{dP_l}{d(\cos \vartheta)} = \frac{l(l+1)}{(2l+1)(\cos^2 \vartheta - 1)} [P_{l+1}(\cos \vartheta) - P_{l-1}(\cos \vartheta)], \quad (14)$$

представим полевой член (12) так:

$$eF \frac{\partial f}{\partial p_x} = eF \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2l+1} [l P_{l-1} + (l+1) P_{l+1}] \frac{df_l}{dp} + \right. \\ \left. + \frac{l(l+1)}{2l+1} \frac{1}{p} [P_{l-1} - P_{l+1}] f_l(\epsilon) \right\}. \quad (15)$$

Приравняем теперь, как требуется уравнением (3), выражение (15) сумме выражений (10) и (11). Это даст следующую цепочку уравнений:

$$\frac{1}{3p^2} eF \frac{d}{dp} (p^2 f_1) = (L_a + L_{оп}) f_0,$$

$$eF \left[\frac{df_0}{dp} + \frac{2}{5p^3} \frac{d}{dp} (p^3 f_2) \right] = -\frac{1}{\tau(p)} f_1,$$

$$eF \left[\frac{2}{3} p \frac{d}{dp} \left(\frac{f_1}{p} \right) + \frac{3}{7p^4} \frac{d}{dp} (p^4 f_3) \right] = -\frac{1}{\tau(p)} f_2, \quad (16)$$

.....

$$eF \left[\frac{l}{2l-1} p^{l-1} \frac{d}{dp} \left(\frac{f_{l-1}}{p^{l-1}} \right) + \frac{l+1}{2l+3} \frac{1}{p^{l+2}} \frac{d}{dp} (p^{l+2} f_{l+1}) \right] = -\frac{1}{\tau(p)} f_l,$$

.....

которая получается из равенства коэффициентов при одинаковых полиномах Лежандра. Мы ввели здесь результирующее время релаксации $\tau(p)$:

$$\tau(p) = \frac{\tau_a \tau_{оп}}{\tau_a + \tau_{оп}}; \quad \left(\frac{1}{\tau(p)} = \frac{1}{\tau_a(p)} + \frac{1}{\tau_{оп}(p)} \right). \quad (17)$$

Если в системе уравнений (16) приближенно считать $f_2(\epsilon)$ и все последующие коэффициенты ряда (4) равными нулю, то в таком приближении (которое обозначим, как первое приближение) функция $f_1(p)$ выразится через функцию $f_0(\epsilon)$:

$$f_1^{(1)}(\epsilon) = -eF\tau(p) \frac{df_0}{dp}. \quad (18)$$

Значение $f_1(\epsilon)$ в следующем (втором) приближении получим, если примем $f_2(\epsilon) \neq 0$, но все $f_l(\epsilon)$ при $l > 2$ равными нулю. Тогда из третьего уравнения системы (16) функция $f_2(\epsilon)$ в первом приближении получится равной:

$$f_2^{(1)}(\epsilon) = -\frac{2}{3} eF\tau(p) p \frac{d}{dp} \left(\frac{f_1^{(1)}}{p} \right) = \frac{2}{3} (eF)^2 \tau(p) p \frac{d}{dp} \left(\frac{\tau}{p} \frac{df_0}{dp} \right). \quad (19)$$

Подставив теперь это выражение во второе уравнение (16), получим уже функцию $f_1(\epsilon)$ во втором приближении:

$$\begin{aligned} f_1^{(2)}(\epsilon) &= -eF\tau \left[\frac{df_0}{dp} + \frac{2}{5p^3} \frac{d}{dp} (p^3 f_2^{(1)}) \right] = \\ &= -eF\tau \frac{df_0}{dp} - \frac{4}{15} \left(\frac{eF\tau}{p} \right)^3 \frac{1}{\tau^2} \frac{d}{dp} \left[\tau p^4 \frac{d}{dp} \left(\frac{\tau}{p} \frac{df_0}{dp} \right) \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Нетрудно убедиться, что, продолжая указанную процедуру, получим в третьем приближении в $f_1(\epsilon)$, дополнительно к (20),

слагаемое, пропорциональное $\left(\frac{eF\tau}{p}\right)^5$, и т. д. Следовательно, точное выражение $f_1(\epsilon)$ представляется рядом, разложенным по параметру $\left(\frac{eF\tau}{p}\right)^2$. Этот ряд быстро сходится, если данный параметр, взятый для средних величин $\bar{p}$ и $\bar{\tau}$, удовлетворяет неравенству

$$\left|\frac{eF\bar{\tau}}{\bar{p}}\right| \ll 1. \quad (21)$$

Неравенство (21) означает, что импульс, приобретенный электроном в поле F за время свободного пробега τ , значительно меньше его среднего импульса. Легко убедиться, что это неравенство эквивалентно неравенству

$$\frac{v_d}{\bar{v}} \ll 1, \quad (22)$$

где v_d — дрейфовая скорость электрона (т. е. средняя скорость электронного газа в направлении ускоряющего поля $v_d \approx \frac{eF\tau}{m}$), а $\bar{v}$ — средняя тепловая скорость. Обычно даже при относительно больших полях дрейфовая скорость всегда меньше тепловой. Действительно, оценим, например, для типичного полупроводника при комнатной температуре поле F^* , при котором неравенство (21) обращается в равенство. Приняв $\tau \approx 10^{-13}$ с, $m^* \approx 10^{-28}$ г и $\frac{\bar{p}^2}{2m^*} \approx T$, получим

$$F^* \ll 60 CGSE, \text{ или } F^* \ll 18 \text{ кВ/см.} \quad (23)$$

В стационарных условиях столь сильное поле обычно к полупроводнику не прикладывается.

Численные значения F^* при разных температурах решетки у разных полупроводников отличаются, естественно, от значения (23). Тем не менее нетрудно понять, что критерии (21), (22) позволяют иметь достаточно широкую область полей и температур, при которых приближенное решение кинетического уравнения

$$f(p) \equiv f(\epsilon, \vartheta) \cong f_0(\epsilon) + f_1(\epsilon) \cos \vartheta \quad (24)$$

является удовлетворительным. Такое приближение, в котором функция распределения (4) представляется только двумя слагаемыми (24), в литературе называется диффузионным. Оно характерно тем, что электрическое поле F вызывает лишь незначительную асимметрию распределения носителей

$$|f_1(\epsilon)| \ll |f_0(\epsilon)|. \quad (25)$$

Когда неравенство (25) не удовлетворяется и когда имеют место неравенства, обратные (21), (22), электроны за время свободного пробега набирают большую энергию, чем их средняя. Функция распределения становится, в отличие от функции диффузионного приближения, резко асимметричной — вытянутой вдоль направ-

ления поля. В такой ситуации для ее определения уже неудобно пользоваться рядом (4) и нужно искать новые приближенные методы решения кинетического уравнения.

§ 3. НЕДИФФУЗИОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

С понижением температуры решетки, увеличением напряженности электрического поля, а также при переходе к полупроводникам с менее благоприятными значениями m^* и τ критерии (21), (22) начинают плохо удовлетворяться. Это, в частности, может иметь место, например, в дырочном германии при низких температурах T . Когда знак неравенств еще сохраняется и дрейфовая скорость носителей остается меньше средней хаотической скорости, диффузионное приближение, хотя уже не корректно, но может быть подправлено учетом следующих членов ряда (4) и следующих уравнений цепочки (16). Однако когда дрейфовая скорость v_d становится порядка тепловой $\bar{v}$, то поправками к диффузионному приближению уже практически нельзя ограничиться. Тут, как отмечено в предыдущем параграфе, требуются иные методы решения кинетического уравнения.

В литературе имеется много работ, не опирающихся на диффузионное приближение в решении кинетического уравнения. В последнее время особенно развились численные методы решения, среди которых наибольшей популярностью пользуется метод Монте-Карло [88—95]. Все эти методы основаны на применении электронно-вычислительных машин, в программу которых закладываются цифровые данные, характерные для каждого рассматриваемого полупроводника. Поскольку нас интересуют общие закономерности и только аналитические решения, мы не станем касаться численных методов и отошлем читателей к специальной литературе [96—103].

При отыскании аналитического решения кинетического уравнения удобно исходить из временного уравнения (2.13), несмотря на то что в этой главе мы рассматриваем одни лишь стационарные состояния. Таким образом, кинетическое уравнение нашей задачи запишем в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + eF \frac{\partial f}{\partial p} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{оп}. \quad (26)$$

Как и в § 2, электрическое поле считаем постоянным и однородным и учитываем взаимодействие носителей (для определенности — электронов) с акустическими и оптическими фононами атомарного полупроводника. Функцию распределения $f(p, t)$ представим, не ограничивая пока общности, двумя такими слагаемыми:

$$f(p, t) = f_0(\epsilon, t) + \varphi(p, t), \quad (27)$$

из которых $f_0(\epsilon, t)$ — симметричная часть функции распределения, а $\varphi(p, t)$ — ее асимметричная часть.

Выделение асимметричной части функции распределения позволяет правую часть уравнения (26) записать в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_a + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{оп} = Lf_0 - \frac{\varphi(p, t)}{\tau(p)}. \quad (28)$$

Здесь

$$Lf_0 \equiv (L_a + L_{оп}) f_0, \quad (29)$$

а τ определяется формулой (17). Мы учли, что интеграл столкновений на асимметричной части функции распределения в неполярных полупроводниках (см. § 2) равен самой этой асимметричной функции, разделенной на результирующее время релаксации $\tau(p)$ с отрицательным знаком.

Подставим выражения (27) — (29) в уравнение (26):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + eF \frac{\partial \varphi}{\partial p} = -\frac{\partial f_0}{\partial t} - eF \frac{\partial f_0}{\partial p} + Lf_0 - \nu(p) \varphi, \quad (30)$$

где $\nu(p)$ — результирующая частота столкновений:

$$\nu(p) = \frac{1}{\tau(p)}, \quad (31)$$

введенная здесь просто для последующего упрощения записи.

Решение дифференциального уравнения (30) можно найти в предположении, что при $t \rightarrow -\infty$ поле F не было включено и поэтому функция φ равнялась нулю. Непосредственной проверкой легко убедиться, что стационарное решение имеет вид

$$\varphi(p, t) = - \int_{-\infty}^t dt' \left[eF \frac{\partial f_0}{\partial p'} - Lf_0(p') \right] \exp \left[\int_t^{t'} \nu(p'') dt'' \right]. \quad (32)$$

Здесь

$$p' = p - eF(t - t'); \quad p'' = p - eF(t - t''). \quad (33)$$

Простой заменой переменных $t' = t + u$ и $t'' = t + u'$ интеграл (32) переходит в

$$\begin{aligned} \varphi(p) = & - \int_{-\infty}^0 du \left[eF \frac{\partial f_0}{\partial (p + eFu)} - Lf_0(p + eFu) \right] \times \\ & \times \exp \left[\int_0^u \nu(p + eFu') du' \right], \end{aligned} \quad (34)$$

откуда видно, что при рассмотренных механизмах рассеяния функция $\varphi(p)$ не зависит от времени (если поле F не зависит от времени) и является стационарной асимметричной частью функции распределения. Поэтому для определения не зависящей от времени $\varphi(p)$ мы при получении интеграла (32) опустили в правой части уравнения (30) слагаемое $\frac{\partial f_0}{\partial t}$, поскольку f_0 и функция φ после

включения постоянного поля не должны зависеть от времени³⁵. Стоит подчеркнуть, что решение (34) является точным. Оно справедливо при любых постоянных электрических полях, пока не начнут проявляться другие причины рассеяния электронов.

Сферически симметричная часть функции распределения $f_0(p)$ теперь может быть определена из первого уравнения системы (16)

$$\frac{1}{3p^2} eF \frac{d}{dp} (p^2 f_1) = L f_0 \quad (35)$$

и выражения $f_1(p)$, представленного через $\varphi(p)$ разложением по полиномам Лежандра:

$$f_1(p) = \frac{3}{2} \int_0^\pi \varphi(p) P_1(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta. \quad (36)$$

Впервые решение, близкое к приведенному выше и основанное на свойствах решеточных механизмов рассеяния (10), (11) в атомарных полупроводниках, т. е. на том, что

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)_c = -v(\varepsilon) \varphi(p), \quad (37)$$

было получено в работах Бадда [97] и Келдыша [104]. Мы здесь несколько видоизменили применявшийся ранее метод, выделив явно в записи функции распределения (27) ее сферически симметричную часть и записав решение не для полной функции $f(p)$, а только для ее асимметричной части $\varphi(p)$. Такое незначительное изменение метода может все же значительно расширить рамки данного приближения. Дело в том, что различные механизмы рассеяния носителей различным образом влияют на $f_0(p)$ и $\varphi(p)$. Например, межэлектронное рассеяние при определенных концентрациях может быть главной причиной энергетического обмена и, значит, главным фактором, определяющим $f_0(p)$, но в то же время (как будет показано) практически не влиять на релаксацию импульса, т. е. на $\varphi(p)$. В такой ситуации свойство (37) сохраняется. Если к тому же межэлектронное взаимодействие максвеллизует функцию $f_0(\varepsilon)$ (с достаточной точностью), то дальнейшее вычисление $\varphi(p)$ и всех кинетических коэффициентов уже находится простым интегрированием³⁶.

Остановимся еще на одном приближенном определении функции распределения, связанном в литературе с именем Бараффа [105]. В сильном поле функция распределения постулируется в виде

³⁵ При взаимодействии носителей с акустическими и оптическими фононами в атомарных полупроводниках, решение (34) можно было, конечно, получить непосредственно из стационарного уравнения (3). Приведенное в тексте решение более общего уравнения понадобится в дальнейшем при рассмотрении влияния переменных во времени полей.

³⁶ Хотя функция $\varphi(p)$ выражается через $f_0(p)$ точным соотношением (34), нужно все же помнить, что, как правило, определение последней, а также и функции $f_1(\varepsilon)$ может быть выполнено только приближенно.

вытянутой «иглы» вдоль ускоряющего носителя поля, т. е. в виде

$$f(p) \equiv f(p, \vartheta) = f_0(\varepsilon) + \varphi(\varepsilon) \delta(1 - \cos \vartheta), \quad (38)$$

при учете зависящего от поля соотношения между $f_0(\varepsilon)$ и $\varphi(\varepsilon)$. Обычно функция (38) не является хорошей приближенной функцией. Поэтому ею пользуются лишь в качестве вспомогательной для улучшения метода диффузионного приближения. Именно, вместо того чтобы считать $f_2(\varepsilon) = 0$, коэффициент $f_2(\varepsilon)$ ряда (4) связывают с коэффициентом $f_1(\varepsilon)$ так, как это следует из разложения функции (38) по полиномам Лежандра, т. е.

$$f_2(\varepsilon) = \frac{5}{3} f_1(\varepsilon). \quad (39)$$

Такое значение $f_2(\varepsilon)$ подставляется затем во второе уравнение системы (16), после чего система из первых двух уравнений (16) оказывается достаточной для нахождения $f_0(\varepsilon)$ и $f_1(\varepsilon)$. В сильных полях указанная процедура на основе соотношения (39) часто определяет более точную функцию распределения и приводит к лучшему, чем в диффузионном приближении, согласованию кинетических коэффициентов с данными опыта. Ясно, однако, что пользоваться приближением (38), (39) нужно с большой осторожностью. Достаточного обоснования обрыва ряда (4) в сильном поле на значении $l = 2$ фактически нет. Коэффициенты разложения функции (38) по полиномам Лежандра, а значит, и коэффициенты $f_l(\varepsilon)$ растут с номером l . Поэтому трудно определить критерий применимости данного приближения и установить вносимую им погрешность в решение задачи, т. е. в конечном счете установить погрешность полученных этим методом количественных характеристик явлений переноса.

§ 4. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЭЛЕКТРОНОВ С АКУСТИЧЕСКИМИ ФОНОНАМИ

Проиллюстрируем решение уравнения Больцмана в диффузионном приближении на примере взаимодействия электронов с одними только акустическими фононами. Такая задача может возникнуть при рассмотрении полупроводника с незначительной концентрацией носителей и примесей, когда температура решетки достаточно низка, чтобы можно было пренебречь влиянием оптических фононов.

Связь между функциями $f_1(\varepsilon)$ и $f_0(\varepsilon)$ в диффузионном приближении задается соотношением (18). Если учесть его и подставить $f_1(\varepsilon)$ в первое уравнение системы (16), то получится такое дифференциальное уравнение для определения функции $f_0(\varepsilon)$:

$$\frac{2m^*s^2}{e\tau_a(\varepsilon)} \frac{d}{d\varepsilon} \left[\varepsilon^2 \left(\frac{df_0}{d\varepsilon} + \frac{f_0}{T} \right) \right] + \frac{2(eF)^2}{3m^*} \frac{1}{\varepsilon^{1/2}} \frac{d}{d\varepsilon} \left[\tau_a(\varepsilon) \varepsilon^{3/2} \frac{df_0}{d\varepsilon} \right] = 0. \quad (40)$$

Здесь интеграл столкновений Lf_0 с акустическими фононами уже записан в явном виде (2.96).

Целесообразно теперь ввести в уравнение (40) вместо времени релаксации $\tau_a(\varepsilon)$, зависящего от энергии электрона, длину свободного пробега на акустических фононах l_a . Эта длина не зависит от ε и выражается через $\tau_a(\varepsilon)$ простым соотношением

$$l_a = v\tau_a(\varepsilon) = \left(\frac{2\varepsilon}{m^*}\right)^{1/2} \tau_a(\varepsilon). \quad (41)$$

После подстановки (41) в уравнение (40) последнее принимает вид, удобный для интегрирования:

$$\frac{1}{\varepsilon^{1/2}} \cdot \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \varepsilon^2 \left[\left(1 + \frac{1}{6} \frac{(eFl_a)^2}{ms^2} \cdot \frac{1}{\varepsilon} \right) \frac{df_0}{d\varepsilon} + \frac{f_0}{T} \right] \right\} = 0. \quad (42)$$

Первый интеграл этого уравнения

$$\left[1 + \frac{1}{6} \frac{(eFl_a)^2}{m^*s^2} \frac{1}{\varepsilon} \right] \frac{df_0}{d\varepsilon} + \frac{f_0}{T} = 0. \quad (43)$$

Константа интегрирования в (43) равна нулю, поскольку при $\varepsilon \rightarrow \infty$ функция $f_0(\varepsilon)$ стремится к нулю быстрее, чем любая степень ε .

Когда напряженность электрического поля F становится достаточно большой, так что безразмерный параметр

$$\alpha_F = \frac{(eFl_a)^2}{6m^*s^2T} \quad (44)$$

удовлетворяет неравенству $(\alpha_F)^{1/2} \gg 1$, но при этом сохраняет еще силу неравенство (21), в квадратной скобке уравнения (43) можно (как будет показано) пренебречь единицей для всех актуальных значений энергии ε . Функция $f_0(\varepsilon)$ тогда получается равной:

$$f_0(\varepsilon) = \text{const} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2\alpha_F} \left(\frac{\varepsilon}{T} \right)^2 \right]. \quad (45)$$

Такая функция распределения впервые была получена Дрюес-тайном при решении задачи о горячих электронах в ионизированном газе. Обратим внимание на то, что распределение (45) резко отличается от равновесного распределения, описываемого максвелловской функцией при температуре решетки T . Средняя энергия электронов $\bar{\varepsilon}$ также заметно отличается от средней энергии равновесного электронного газа. Действительно, при распределении (45) средняя энергия электрона равна:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \frac{\int \varepsilon f_0(\varepsilon) d^3p}{\int f_0(\varepsilon) d^3p} = \frac{\int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \exp \left[-\frac{1}{2\alpha_F} \left(\frac{\varepsilon}{T} \right)^2 \right] d\varepsilon}{\int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2\alpha_F} \left(\frac{\varepsilon}{T} \right)^2 \right] d\varepsilon} = \\ &= (2\alpha_F)^{1/2} \frac{\Gamma(5/4)}{\Gamma(3/4)} T \end{aligned} \quad (46)$$

($\Gamma(x)$ — гамма-функция) и, следовательно, отношение ее к средней равновесной энергии (опуская численные множители порядка единицы) равно

$$\frac{\bar{\varepsilon}}{T} \cong (\alpha_F)^{1/2} \gg 1. \quad (47)$$

Согласно (47) средняя энергия растет пропорционально полю F ³⁷.

Нужно сказать, что уравнение (43) допускает точное решение при любом значении напряженности поля F . Это решение, полученное впервые Давыдовым [106], легко найти. Оно имеет вид

$$f_0(\varepsilon) = \text{const} \cdot \left(\alpha_F + \frac{\varepsilon}{T} \right)^{\alpha_F} e^{-\varepsilon/T}. \quad (48)$$

В слабых полях ($\alpha_F \rightarrow 0$) для актуальных значений энергии ε распределение (48) переходит, как и следовало ожидать, в максвелловское равновесное распределение. Однако уже в промежуточных полях ($\alpha_F \sim 1$) оно заметно отличается от максвелловского и средняя энергия становится больше равновесной. Функция распределения в электрическом поле деформируется в направлении увеличения средней энергии электрона.

Посмотрим теперь, при каких условиях остается справедливым диффузионное приближение, если основным механизмом взаимодействия электронов с решеткой является взаимодействие с акустическими фононами. Для этого подставим в критерий применимости диффузионного приближения (21) среднее значение энергии в сильном поле (47):

$$1 \gg \frac{eF\tau_a}{\bar{p}} \cong \frac{eFl_a}{\bar{p}\bar{v}} \cong \frac{eFl_a}{2\bar{\varepsilon}} \cong \frac{eFl_a}{2(\alpha_F)^{1/2}T} = \frac{1}{2} \left(\frac{6m^*s^2}{T_1} \right)^{1/2}. \quad (49)$$

Как видим, напряженность поля F вовсе выпала из критерия применимости диффузионного приближения. Правая часть формулы (49) оказалась по порядку величины равной отношению скорости звука к средней скорости равновесных электронов при температуре решетки. Обычно это отношение очень мало, за исключением предельно низких температур (примерно около 1 К). Следовательно, если не переходить указанный предел, то диффузионное приближение оказывается справедливым при любых полях (пока не включаются другие механизмы взаимодействия).

Вычислим для ориентировки плотность тока j по формуле (7) с учетом (18) и полученной здесь функции $f_0(\varepsilon)$. Для упрощения выполним расчет в двух предельных случаях: слабого и сильного поля. При слабом поле (48) приближенно трансформируется в максвелловскую функцию:

$$f_0(\varepsilon) = \frac{n}{(2\pi m^* T)^{3/2}} e^{-\varepsilon/T}, \quad (50)$$

³⁷ Из формулы (47) видно, что при значениях энергии ε порядка средней $\bar{\varepsilon}$ второе слагаемое в квадратной скобке (43) — порядка $(\alpha_F)^{1/2}$. Это обосновывает пренебрежение единицей в (43) и решение (45) при $(\alpha_F)^{1/2} \gg 1$.

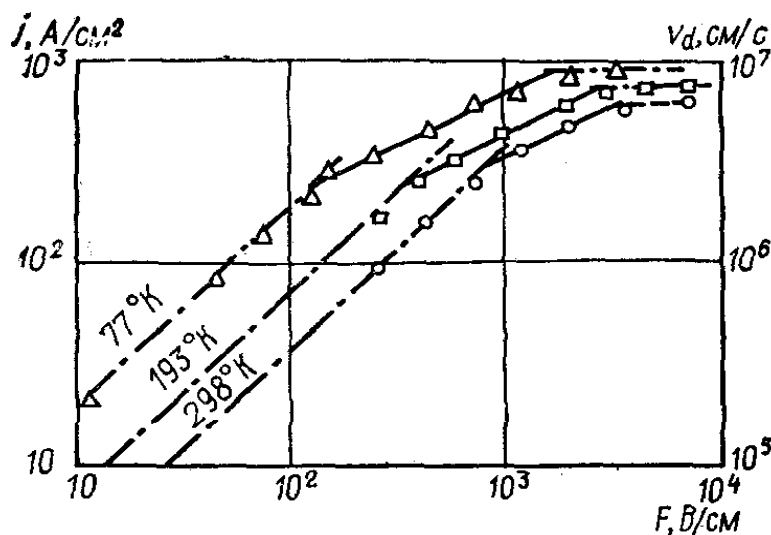


Рис. 14. Вольт-амперная характеристика германия с удельным сопротивлением 2,8 Ом · см при 77 К (правая шкала определяет v_d).

в которой учтено условие нормировки (5). Плотность тока получается такой:

$$j = \frac{4ne^2Fl_a}{3(2\pi m^*T)^{1/2}}. \quad (51)$$

Как и следовало ожидать, ток j оказался пропорциональным напряженности поля, а подвижность $\mu = \frac{j}{nF}$ — не зависящей от поля и обратно пропорциональной $T^{3/2}$ (напомним, что длина свободного пробега согласно (2.89) обратно пропорциональна температуре).

При вычислении тока в сильном поле воспользуемся $f_0(\epsilon)$ в виде (45), которая с учетом нормировки запишется так:

$$f_0(\epsilon) = \left[\pi (2m^*)^{3/2} (2\alpha_F T^2)^{3/4} \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) \right]^{-1} \exp \left[-\frac{1}{2\alpha_F} \left(\frac{\epsilon}{T} \right)^2 \right]. \quad (52)$$

Плотность тока в сильном поле равна

$$j = \frac{e^2 n F l_a}{3 \Gamma\left(\frac{3}{4}\right)} \left(\frac{2\pi^2}{\alpha_F m^{*2} T^2} \right)^{1/4}. \quad (53)$$

Отсюда следует, что в сильном поле ток пропорционален $F^{1/2}$, а подвижность обратно пропорциональна $F^{-1/2}$.

Хотя приведенные зависимости тока от поля не могут претендовать на количественную характеристику реальных полупроводников, тем не менее они правильно отражают тенденцию изменения тока с полем. Здесь нет необходимости сколько-нибудь подробно останавливаться на экспериментальных определениях вольт-амперных характеристик разных полупроводников. Таких определений много, и они описаны во многих монографиях и обзорных статьях (например, [50, 107—111]). Приведем лишь (рис. 14) для иллюстрации вольт-амперную характеристику n — Ge с удельным сопротивлением 2,8 Ом · см при 77 К, взятую из работы [112]. Из рис. 14 видно, что в слабых полях ток пропорционален F . Это омическая область (51). Отклонения от закона Ома здесь еще малы. С ростом поля начинают проявляться отклонения тока от его омического значения. Ток, как видно из формулы (53), становится пропорциональным не F , а $F^{1/2}$. В области еще более сильных полей (это видно из рис. 14) ток вообще практически перестает

зависеть от поля. В этой области уже эффективно проявляются неупругие механизмы взаимодействия носителей с решеткой, которые в этом параграфе не рассматривались.

§ 5. КУЛОНОВСКИЕ МЕХАНИЗМЫ РАССЕЯНИЯ

В § 1 настоящей главы было отмечено, что в физике полупроводников весьма популярно приближение, основанное на введении эффективной температуры носителей. Чтобы ответить на вопрос, при каких условиях и для каких целей это приближение является хорошим, мы сейчас более детально рассмотрим кулоновские механизмы взаимодействия носителей друг с другом и с заряженными примесными центрами.

Отметим сразу же, что роль кулоновских взаимодействий отнюдь не исчерпывается установлением электронной (дырочной) температуры. Ниже будет показано, что они часто доминируют в междудолинной перекачке энергии, ими определяются границы существования отрицательной дифференциальной проводимости и другие эффекты. При биполярной проводимости электронно-дырочное кулоновское взаимодействие влияет на подвижность каждого из типов носителей, а когда концентрация дырок, например, значительно меньше электронной — приводит к увлечению дырок в направлении, противоположном действию на них поля. Межэлектронное взаимодействие существенно влияет на характер шумов горячих носителей и вообще при значительных их концентрациях проявляется практически во всех кинетических эффектах. Поэтому корректный учет этого взаимодействия во многих случаях оказывается достаточно важным.

Запишем кулоновский интеграл столкновений (2.65) применительно к двум типам зарядов α и β , описываемых функциями распределения $f^{(\alpha)}(p)$ и $f^{(\beta)}(p)$:

$$\left(\frac{\partial f^{(\alpha)}}{\partial t}\right)_{\alpha\beta} = B_e \sum_{i,k=1}^3 \frac{\partial}{\partial p_i} \int \left[f^{(\beta)}(p') \frac{\partial f^{(\alpha)}(p)}{\partial p_k} - f^{(\alpha)}(p) \frac{\partial f^{(\beta)}(p')}{\partial p'_k} \right] \frac{\partial^2 |v - v'|}{\partial v_i \partial v_k} d^3 p. \quad (54)$$

Здесь

$$B_e = 2\pi e^4 \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right). \quad (55)$$

Мы предполагаем (как и везде ниже), что эффективные заряды взаимодействующих частиц одинаковы по модулю и равны элементарному заряду, разделенному на показатель преломления.

Начнем с вычисления интеграла (54), когда частицы однотипны, т. е. $\alpha = \beta$ и $f^{(\alpha)}(p) \equiv f^{(\beta)}(p) \equiv f(p)$. Ограничившись диффузионным приближением, подставим в (54) $f(p)$ в виде (24) и выполним

интегрирование по всем направлениям импульса p . Получим

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e = 8\pi B_e m^* \left\{ \frac{1}{p^2} \frac{d}{dp} \hat{L}_e [f_0(p), f_0(p)] + \cos \vartheta \hat{M}_e [f_0(p), f_1(p)] \right\}, \quad (56)$$

Так как в диффузионном приближении $|f_1| \ll |f_0|$, мы опустили в (56) квадратичные по $f_1(p)$ члены и ввели следующие обозначения:

$$\hat{L}_e [f_0(p), f_0(p)] \equiv f_0(p) \hat{A}_1 f_0(p) + p^2 \frac{df_0}{dp} \hat{A}_2 f_0(p), \quad (57)$$

$$\begin{aligned} \hat{M}_e [f_0(p), f_1(p)] \equiv & \frac{d^2 f_1}{dp^2} \hat{A}_2 f_0(p) + \frac{df_1}{dp} \left[\frac{1}{p^2} \hat{A}_1 f_0(p) + \right. \\ & + \frac{1}{p^2} \frac{d}{dp} (p^2 \hat{A}_2 f_0) \left. \right] + f_1(p) \left[2f_0(p) - \frac{1}{p^3} \hat{A}_1 f_0(p) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{p^3} \frac{d}{dp} (p^2 \hat{A}_2 f_0) \right] + p^2 \frac{d^2 f_0}{dp^2} \hat{A}_4 f_1(p) + \frac{df_0}{dp} [\hat{A}_3 f_1(p) - \hat{A}_4 f_1(p)]. \end{aligned} \quad (58)$$

Для сокращения записи выражений $\hat{L}_e$ и $\hat{M}_e$ в (58) введены встречающиеся в физике плазмы операторы $\hat{A}_i$, действие которых на произвольную функцию $\eta(x)$ определяется равенствами

$$\begin{aligned} \hat{A}_1 \eta(x) &= \int_0^x x^2 \eta(x) dx, \\ \hat{A}_2 \eta(x) &= \frac{1}{3} \left[-\frac{1}{x^3} \int_0^x x^4 \eta(x) dx + \int_x^\infty x \eta(x) dx \right], \\ \hat{A}_3 \eta(x) &= \frac{1}{3} \left[\frac{1}{x^3} \int_0^x x^3 \eta(x) dx + \int_x^\infty \eta(x) dx \right], \\ \hat{A}_4 \eta(x) &= \frac{1}{5} \left[\frac{1}{x^5} \int_0^x x^5 \eta(x) dx + \int_x^\infty \eta(x) dx \right]. \end{aligned} \quad (59)$$

Непосредственным интегрированием межэлектронного интеграла столкновений (56) легко убедиться, что тождественно удовлетворяются законы сохранения

$$\int \varepsilon \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_e d^3 p = 0, \quad (60)$$

$$\int p \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_e d^3 p = 0, \quad (61)$$

если функции $f_0(p)$, $f_1(p)$ конечны в точке $p = 0$ и экспоненциально убывают при $p \rightarrow \infty$. Таким образом, как и должно быть, межэлектронные взаимодействия не изменяют энергию и импульс

электронной системы, а только перераспределяют их в направлении установления равновесного состояния со своей электронной температурой.

Рассеяние электронов друг на друге само по себе не может быть причиной торможения электронного газа в электрическом поле. Тем не менее, как будет видно, при наличии других механизмов рассеяния оно может внести определенный вклад в торможение и связанное с ним уменьшение подвижности. Этот вклад, как можно заключить из формул (56) — (59), нельзя описать (что иногда встречается в литературе) на языке времени релаксации. Поэтому учет межэлектронного взаимодействия значительно усложняет задачу. Кинетическое уравнение, само по себе достаточно сложное, становится еще и нелинейным интегро-дифференциальным уравнением даже в случае невырожденного электронного газа.

Обратимся далее к рассмотрению взаимодействия неоднотипных кулоновских частиц с сильно отличающимися эффективными массами. При таком взаимодействии, с точностью до членов порядка отношения масс (см. главу 2, § 3), формула (54) значительно упрощается. Например, интеграл столкновений электронов, рассеиваемых на однозарядных примесных ионах, в диффузионном приближении выражается простой формулой

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_I = - \frac{f_1(\varepsilon)}{\tau_I} \cos \vartheta, \quad (62)$$

содержащей время релаксации, равное согласно (2.82) и (55)

$$\tau_I = \left(2B_e \frac{mN}{p^3} \right)^{-1}. \quad (63)$$

Аналогичное время релаксации появляется при учете рассеяния электронов на тяжелых дырках или легких дырок на тяжелых.

§ 6. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Найдем сферически симметричную часть функции распределения электронов в полупроводнике, считая электронную концентрацию достаточно большой (необходимый критерий будет получен позже). Запишем первое уравнение системы (16), добавив к нему слагаемое, учитывающее межэлектронный обмен энергией (56):

$$\begin{aligned} \frac{1}{3p^2} eF \frac{d}{dp} (p^2 f_1) = \frac{s^2}{l_a T} \frac{1}{p^2} \frac{d}{dp} \left[p^4 \left(f_0 + \frac{m^* T}{p} \frac{df_0}{dp} \right) \right] + \\ + 8\pi m^* \frac{1}{p^2} \frac{d}{dp} L_e [f_0, f_0] + B_{\text{он}} \{ p^{(+)} [e^{\hbar\omega_0/T} f_0(p^{(+)}) - f_0(p)] + \\ + \Delta(p^{(-)}) p^{(-)} [f_0(p^{(-)}) - e^{\hbar\omega_0/T} f_0(p)] \}. \end{aligned} \quad (64)$$

Здесь подставлены явные выражения операторов (2.97) и (2.98) при параболическом законе дисперсии и, кроме того, для сокраще-

ния записи обозначен не зависящий от энергии коэффициент в (2.98) через $B_{оп}$:

$$B_{оп} = \frac{m^* D_0 K^2 N_0}{2\pi \hbar^3 \omega_0 \rho}. \quad (65)$$

Введены еще обозначения

$$p^{(+)} \equiv p(\varepsilon + \hbar\omega_0) = \sqrt{2m^*(\varepsilon + \hbar\omega_0)}, \quad p^{(-)} \equiv p(\varepsilon - \hbar\omega_0),$$

$$\Delta(x) = \begin{cases} 1 & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (66)$$

Второе уравнение системы (16) в диффузионном приближении при учете еще кулоновских механизмов рассеяния согласно (56) и (63) имеет вид

$$eF \frac{df_0}{dp} = -\frac{f_1(p)}{\tau(p)} + 8\pi B_e m^* \hat{M}_e [f_0(p), f_1(p)], \quad (67)$$

где τ — результирующее время релаксации

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_a} + \frac{1}{\tau_{оп}} + \frac{1}{\tau_I}. \quad (68)$$

Прежде чем исследовать уравнения (64), (67) в общем случае, начнем с частного случая, когда рассеяние на оптических фоновых не существенно и можно формально считать $\tau_{оп} \rightarrow \infty$. Такое приближение оправдано при низких температурах решетки T , когда $T \ll \hbar\omega_0$ и $\varepsilon \ll \hbar\omega_0$. Последнее неравенство позволяет считать также и $B_{оп} \cong 0$ и, следовательно, не учитывать взаимодействие с оптическими фоновыми в уравнении (64). Оно позволит также отнести решение не только к атомарным полупроводникам, но и к полярным при $T \ll \hbar\omega_0$.

Для оценки относительной роли отдельных слагаемых в уравнениях (64), (67) удобно перейти к безразмерным переменным

$$x = \frac{p}{(2m^* T_e)^{1/2}} \quad (69)$$

и функциям

$$\xi_0(x) = \frac{(2\pi m^* T_e)^{3/2}}{n} f_0(p), \quad \xi_1(x) = \frac{(2\pi m^* T_e)^{3/2}}{n} f_1(p). \quad (70)$$

Здесь T_e — пока параметр размерности энергии. Позже будет видно, при каких условиях его можно отождествить с электронной температурой.

В безразмерных переменных уравнение (64) при $B_{оп} = 0$ принимает такой вид:

$$\frac{d}{dx} \hat{L}_e [\xi_0(x), \xi_0(x)] + \beta_1 x^4 \left[\xi_0(x) + \frac{T}{2T_e x} \frac{d\xi_0}{dx} \right] - \beta_2 x^2 \xi_1(x) = 0, \quad (71)$$

где

$$\beta_1 = \frac{m^* s^2 T_e^2}{4\pi^{1/2} n e^{*4} l_a T \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right)}, \quad \beta_2 = \frac{e F T_e}{24\pi^{1/2} n e^{*4} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right)}. \quad (72)$$

Коэффициенты β_1 и β_2 обратно пропорциональны концентрации электронов n . Поэтому при достаточно больших n (при которых критерии справедливости интеграла Ландау еще не нарушены) будут удовлетворяться условия $\beta_1 \ll 1$ и $|\beta_2| \ll 1$. Когда это наступит, последние два слагаемых уравнения (71) окажутся малыми по сравнению с первым и ими можно вначале пренебречь, рассматривая их как возмущение³⁸.

Если в нулевом приближении отбросить в (71) слагаемые с коэффициентами β_1 и β_2 , то точным решением уравнения $\frac{d}{dx} \hat{L}_e [\xi_0(x), \xi_0(x)] = 0$ при граничном условии $\xi_0(\infty) = 0$ является функция

$$\xi_0(x) = e^{-x^2}. \quad (73)$$

Наименьшая концентрация электронов (обозначим ее $n_a^{(e)}$), начиная с которой функция (73) уже становится допустимым приближением $\xi_0(x)$, может быть оценена из условия $\beta_1 = 1$. Оно дает

$$n_a^{(e)} = \frac{m^* s^2 T_e^2}{4\pi^{1/2} e^{*4} l_a T \ln(\rho_D/b_0)}. \quad (74)$$

Как видим, при $n \gg n_a^{(e)}$ функция (73) является функцией распределения максвелловского вида³⁹. Это означает, что введенный выше в (69), (70) чисто формально параметр T_e имеет смысл электронной температуры.

Запишем уравнение, определяющее электронную температуру. Им является уравнение баланса энергии (2.15), которое в наших

³⁸ Сказанное остается справедливым даже при $|\beta_2| \approx 1$, поскольку в диффузионном приближении $|\xi_1(x)| \ll \xi_0(x)$. Легко проверить, что $|\beta_2| \ll 1$ эквивалентно условию $|eF\tau_I/\bar{p}| \ll 1$, где τ_I — время релаксации (63) на примесных ионах. В несобственных полупроводниках концентрация последних равна или больше n . Поэтому фактически $\beta_2 \ll |eF\tau_I/\bar{p}|$. В решетке время релаксации на акустических фононах τ_a часто значительно меньше τ_I . Тем самым, для оправдания диффузионного приближения достаточно потребовать удовлетворения неравенства $|\beta_2| \tau_a/\tau_I \ll 1$, при котором $|\beta_2|$ даже может превосходить единицу.

³⁹ Выражение (74) почти совпадает с граничной концентрацией n_0 , полученной в [113] на основании оценки по Пайнсу [114] скорости передачи энергии при межэлектронном взаимодействии. Различие между (74) и формулой в [113] сводится к численному множителю порядка единицы и множителю $\ln^{-1}(\rho_D/b_0)$, отсутствующему в [113]. Этот множитель по самому выводу интеграла кулоновских столкновений должен быть меньше единицы.

безразмерных переменных (69), (70) согласно (7), (71) — (73) имеет вид

$$2m^*s^2 \frac{T_e}{T} \int_0^\infty \left[\xi_0(x) + \frac{T_0}{2T_e} \frac{1}{x} \frac{d\xi_0}{dx} \right] x^5 dx - \frac{1}{3} eFl_a \int_0^\infty x^3 \xi_1(x) dx = 0. \quad (75)$$

Обратим внимание, что данное уравнение не только определяет электронную температуру, но одновременно еще играет роль фактора, уточняющего приближенное решение (73). Теперь эта функция не только обращает в нуль основное первое слагаемое уравнения (71), но еще в среднем (интегрально) приравнивает нулю сумму остальных его членов.

Перейдем к определению асимметричной части функции распределения, которую тоже будем искать в безразмерных переменных (69), (70). В этих переменных функция $\xi_1(x)$ находится из уравнения (67), которое, учитывая (68) и (2.89), запишем так:

$$\hat{M}_e [\xi_0(x), \xi_1(x)] - \frac{1}{4} \gamma_2 \frac{d\xi_0}{dx} - \left[\gamma_1 x^4 + \frac{\pi^{1/2} N}{2n} \right] \frac{\xi_1(x)}{x^3} = 0. \quad (76)$$

Мы ввели такие обозначения:

$$\gamma_1 = \frac{T}{m^*s^2/2} \beta_1 = \frac{T_e^2}{2\pi^{1/2} n l_a e^{*4} \ln(\rho_D/b_0)}, \quad (77)$$

$$\gamma_2 = 12\beta_2 = \frac{eFT_e}{2\pi^{1/2} n e^{*4} \ln(\rho_D/b_0)}. \quad (78)$$

Из уравнения (76) можно заключить, что кулоновские механизмы рассеяния заметно влияют на вид функции $\xi_1(x)$ при условии $\gamma_1 \ll 1$. Отсюда граничная концентрация электронов $n_a^{(p)}$, выше которой именно межэлектронное рассеяние и рассеяние на ионизованных примесях главным образом определяют асимметричную часть функции распределения, находится из равенства $\gamma_1 = 1$. Она равна

$$n_a^{(p)} = \frac{T_e^2}{2\pi^{1/2} l_a e^{*4} \ln(\rho_D/b_0)}. \quad (79)$$

Если теперь сравнить эту концентрацию с полученной выше концентрацией $n_a^{(e)}$ (74), то окажется

$$\frac{n_a^{(p)}}{n_a^{(e)}} = \frac{T}{m^*s^2/2}. \quad (80)$$

В интервале от азотных до комнатных температур отношение (80) по порядку величины равно $10^2 - 10^3$. Следовательно, межэлектронное взаимодействие скажется на симметричной части функции распределения при значительно меньших концентрациях, чем

на асимметричной ее части. Иначе говоря, при некоторой фиксированной концентрации n межэлектронное взаимодействие, эффективно перераспределяющее энергию, может играть главную роль в определении функции $\xi_0(x)$ и практически не влиять на вид $\xi_1(x)$. Такая ситуация возникнет при

$$n_a^{(e)} \ll n \ll n_a^{(p)} \text{ или } \beta_1 \ll 1, \text{ но } \gamma_1 \gg 1. \quad (81)$$

Когда имеют место условия (81) и акустическое рассеяние превалирует над примесным $\left(\gamma_1 \gg \frac{\pi^{1/2}N}{2n}\right)$, уравнение (76) решается особенно просто. Пренебрегая в нем слагаемыми, ответственными за кулоновские механизмы рассеяния, получим

$$\xi_1(x) \cong - \frac{\gamma_2}{2\gamma_1 x} \cdot \frac{d\xi_0}{dx} = \frac{\gamma_2}{\gamma_1} e^{-x^2}. \quad (82)$$

Подставив далее (82) и функцию (73) в уравнение (75), найдем температуру электронного газа из такого уравнения:

$$2m^*s^2 \left(\frac{T_e}{T}\right) \left(\frac{T_e}{T} - 1\right) = \frac{(eFl_a)^2}{6T}. \quad (83)$$

Отсюда электронная температура в полупроводниках с концентрацией электронов, достаточной для эффективного межэлектронного обмена энергией, но недостаточной для заметного влияния на асимметричную часть функции распределения (при рассеянии электронов, в основном на акустических фононах), имеет вид

$$T_e = \frac{1}{2} T \left[1 + \sqrt{1 + \frac{(eFl_a)^2}{3m^*s^2T}} \right]. \quad (84)$$

Эта формула впервые была получена Давыдовым [106]. Из нее видно, что в слабых полях $T_e \cong T$, т. е. электронный газ почти не нагревается. В сильных полях, когда имеет место неравенство

$$1 \ll \frac{(eFl_a)^2}{3m^*s^2T} \cong \frac{(eFp\tau_a)^2}{3m^*s^2T} \ll \frac{(eF\tau_a)^2}{m^*s^2} = \left(\frac{eF\tau_a}{p}\right)^2 \left(\frac{\bar{p}}{m^*s}\right)^2, \quad (85)$$

электронная температура (пока еще не включено взаимодействие с оптическими фононами) растет приблизительно пропорционально напряженности приложенного поля F .

В компенсированных полупроводниках, особенно с понижением температуры решетки, примесное рассеяние может стать главным механизмом рассеяния (параметр $\frac{\pi^{1/2}N}{2n}$ в (76) будет самым большим в левой части уравнения). Тогда функция $\xi_1(x)$ такая:

$$\xi_1(x) \cong - \frac{n\gamma_2}{\pi^{1/2}N} x^3 \frac{d\xi_0}{dx} = \frac{2n\gamma_2}{\pi^{1/2}N} x^4 e^{-x^2}, \quad (86)$$

а плотность тока j выразится формулой

$$j = \frac{8n^2}{3\pi N} \left(\frac{2T_e}{m^*} \right)^{1/2} \gamma_2 \int_0^\infty x^7 e^{-x^2} dx = \frac{8n^2}{\pi N} \left(\frac{2T_e}{m^*} \right)^{1/2} \gamma_2. \quad (87)$$

Отсюда подвижность электронов при примесном рассеянии запишется в виде

$$\mu_I = \left| \frac{j}{e n F} \right| = \left| \frac{2em^*}{Ne^{*4} \ln(\rho_D/b_0)} \left(\frac{2T_e}{\pi m^*} \right)^{1/2} \right|. \quad (88)$$

Интересно сравнить подвижность (88) с подвижностью при чисто акустическом механизме рассеяния μ_a . Последняя вычисляется аналогично (88), но с заменой функции (86) в интеграле (7) функцией (82):

$$\mu_a = \frac{2}{3F} \left(\frac{2T_e}{\pi m^*} \right)^{1/2} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} = \left| \frac{4}{3} \frac{el_a}{(2\pi m^* T_e)^{1/2}} \right|. \quad (89)$$

Отсюда отношение подвижностей

$$\frac{\mu_I}{\mu_a} = \frac{12n}{\pi^{1/2} N} \gamma_1 \quad (90)$$

позволяет, в принципе, определить параметр ⁴⁰ γ_1 .

Отношение подвижностей (90), как следует из определений (77) и (41), увеличивается с полем и температурой решетки. Это показывает, что относительная роль примесного рассеяния уменьшается с ростом T и F . Роль акустического рассеяния при этом возрастает по крайней мере до тех пор, пока эффективно не включаются неупругие механизмы рассеяния.

В следующем параграфе учтем влияние такого неупругого механизма — рассеяния на оптических фононах, но предварительно заметим следующее. Полученная в этом параграфе (а также и в последующих) функция распределения описывает правильно распределение только тех электронов, безразмерный импульс которых $x \sim 1$. Распределение медленных электронов $x \ll 1$ этой функцией хорошо не описывается. Точно так же ею не описывается распределение быстрых электронов $x \rightarrow \infty$. Так как плотность состояний медленных электронов (пропорциональная x^2) достаточно мала, а быстрых электронов мало из-за экспоненциального убывания функции, то все результаты, вычисленные с помощью функций (73), (82) или (86) при соблюдении критерия (81), получаются верными, если эти функции входят в подынтегральные выражения. Нужно все же помнить, что в эф-

⁴⁰ Формула (88) совпадает с полученной Конуэлл и Вайскопфом [66], за исключением различия в аргументе логарифма. Это различие возникло из-за того, что в работе [66] верхний предел кулоновского интеграла столкновений принимался равным среднему расстоянию между ионами вместо дебаевского радиуса экранирования (как у Ландау).

фактах, где главную роль играют быстрые электроны (например, термоэлектронная эмиссия, ударная ионизация, излучение высокоэнергетических оптических фононов и другие), функция (73) уже не может считаться хорошей приближенной функцией и должна быть соответствующим образом подправлена.

§ 7. УЧЕТ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ

У многих полупроводников, таких, как Ge, Si и другие, энергетические потери горячих носителей в основном определяются их взаимодействием с оптическими фононами. Поэтому представляется важным найти решение уравнения (64) с учетом этих взаимодействий. Это уравнение в безразмерных аргументах (69) и функциях (70) имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dx} \left\{ \hat{L}_e [\xi_0(x), \xi_0(x)] + \beta_1 x^4 \left[\xi_0(x) + \frac{T}{2T_e x} \frac{d\xi_0}{dx} \right] \right\} + \\ & + \frac{2N_0}{\alpha} \beta_0 x^2 \left\{ x^{(+)} [e^{\alpha_0 \xi_0(x^{(+)})} - \xi_0(x)] + x^{(-)} [\xi_0(x^{(-)}) - e^{\alpha_0 \xi_0(x)}] \times \right. \\ & \left. \times \Delta(x^{(-)}) \right\} + \beta_2 \frac{d}{dx} [x^2 \xi_1(x)] = 0, \end{aligned} \quad (91)$$

где

$$\alpha_0 = \frac{\hbar\omega_0}{T}, \quad \alpha = \frac{\hbar\omega_0}{T_e}, \quad x^{(\pm)} = (x^2 \pm \alpha)^{1/2}, \quad N_0 = (e^{\alpha_0} - 1)^{-1}, \quad (92)$$

$$\beta_0 = \frac{\alpha \hbar \omega_0}{2m^* s^2} b \beta_1, \quad b = \frac{m^* l_a T}{N_0 \hbar \omega_0} B_{\text{оп}}. \quad (93)$$

Безразмерный параметр b , согласно определениям $B_{\text{оп}}$ и l_a , равен:

$$b = \frac{1}{2} \left(\frac{s K D_0}{\omega_0 D_{\perp}} \right)^2. \quad (94)$$

Он не зависит от температуры решетки и поля и характеризует долю энергетических потерь электронов, обусловленную взаимодействием с оптическими фононами.

Учет оптических фононов, отраженный в уравнении (91) функциями от трех разных аргументов (x , $(x^2 + \alpha)^{1/2}$, $(x^2 - \alpha)^{1/2}$), значительно усложняет решение этого уравнения. Поэтому рассмотрим сперва более простой случай $\alpha \ll 1$, когда разностные выражения в (91) можно заменить дифференциальными.

При высоких температурах решетки или сильных полях средняя энергия электронов может заметно превосходить энергию оптического фонона. Когда это имеет место и $\alpha \ll 1$, целесообразно воспользоваться разложением по параметру α . Уравнение (91) тогда становится дифференциальным. Его первый интеграл

находится сразу ⁴¹:

$$\hat{L}_e [\xi_0(x), \xi_0(x)] + \beta_1 x^4 \left[\xi_0(x) + \frac{T}{T_e} \frac{1}{2x} \frac{d\xi_0}{dx} \right] + \beta_0 x^2 \left[\xi_0(x) + \frac{\alpha}{2x} \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) \frac{d\xi_0}{dx} \right] + \beta_2 x^2 \xi_1(x) = 0. \quad (95)$$

Если $\beta_0 < \beta_1$, критическая концентрация электронов $n_{\text{оп}}^{(e)}$, начиная с которой функция $\xi_0(x)$ максвеллизуется, остается такой же, как и прежде при пренебрежении взаимодействием с оптическими фононами. Она определяется формулой (74).

Если $\beta_0 > \beta_1$, то критическую концентрацию $n_{\text{оп}}^{(e)}$ уже нужно определить из условия $\beta_0 = 1$, что дает

$$n_{\text{оп}}^{(e)} = \frac{\hbar \omega_0}{2m^* s^2} \alpha b n_a^{(e)}. \quad (96)$$

Оценки $n_a^{(e)}$ и $n_{\text{оп}}^{(e)}$ для типичных полупроводников будут даны ниже. Подчеркнем, что условие $\alpha \ll 1$ определяет квазиупругий характер взаимодействия электронов с оптическими фононами.

Обратимся теперь к неупругому рассеянию электронов на оптических фононах и определим соответствующую ему критическую концентрацию $n_{\text{оп}}^{(e)}$. Когда такое рассеяние имеет место, $\alpha_0 \gg \alpha \gg 1$, указанное разложение по α невыполнимо. Вместо него воспользуемся другим приближением, исходя из того, что при концентрациях электронов выше критической $n^{(e)}$ устанавливается распределение $\xi_0(x) = e^{-x^2}$. Поэтому подставим эту функцию в слагаемое уравнения (91), ответственное за учет неупругого рассеяния электронов на оптических фононах. Уравнение примет вид

$$\frac{d}{dx} \left\{ \hat{L}_e [\xi_0(x), \xi_0(x)] + \beta_1 x^4 \left[\xi_0(x) + \frac{T}{T_e} \frac{1}{2x} \frac{d\xi_0}{dx} \right] \right\} + \frac{2\beta_0 N_0}{\alpha} (e^{\alpha_0 - \alpha} - 1) x^2 [(x^2 + \alpha)^{1/2} - e^{\alpha} (x^2 - \alpha)^{1/2} \Delta(x^2 - \alpha)] \xi_0(x) + \frac{d}{dx} \beta_2 x^2 \xi_1(x) = 0.$$

Когда $\alpha \beta_1 < 2\beta_0 N_0 (e^{\alpha_0 - \alpha} - 1)$, то критическая концентрация $n_{\text{оп}}^{(e)}$ снова определяется в основном столкновениями с оптическими фононами и находится из условия $\frac{2\beta_0 N_0}{\alpha} (e^{\alpha_0 - \alpha} - 1) = 1$:

$$n_{\text{оп}}^{(e)} = \alpha b \frac{\hbar \omega_0}{m^* s^2} \cdot \frac{e^{\alpha_0 - \alpha} - 1}{e^{\alpha_0} - 1} n_a^{(e)}. \quad (97)$$

Интересно, что при низкой температуре решетки, но сильном поле ($\alpha_0 \gg 1$, $\alpha < 1$) критическая концентрация (97) практически совпа-

⁴¹ В уравнении (95) мы оставили планковское распределение оптических фононов не разложенным по параметру α_0 . Этим сохраняется справедливость уравнения (91) и при низких температурах решетки, когда $\alpha_0 \gg 1$, но из-за нагрева электронов полем $\alpha < 1$.

дает с концентрацией (96) при квазиупругом соударении с оптическими фононами. Вообще же, с ростом температуры и поля концентрация $n_{оп}^{(e)}$ уменьшается и ее изменение направлено к значению $n_a^{(e)}$ — концентрации, определяемой взаимодействием с акустическими фононами.

Перейдем к исследованию отклонения функции $\xi_0(x)$ от максвелловского вида в «хвосте» распределения, т. е. при $x^2 = \frac{\varepsilon}{T_e} \gg 1$.

Это отклонение значительно и важно, когда существенна роль взаимодействия электронов с оптическими фононами. Рассмотрим наиболее интересный случай сильного поля, при котором электроны гораздо чаще излучают оптический фонон, чем поглощают его. Примем, что концентрация электронов достаточна для удовлетворения неравенств $\beta_1 \ll 1$ и $\beta_0 \ll 1$. При этих неравенствах функция $\xi_0(x) = e^{-x^2}$ является хорошим приближением для описания распределения большинства электронов, т. е. электронов в актуальной области энергии $x^2 \approx 1$. Однако для электронов с энергиями, при которых $\beta_1 x^4 > 1$ или $\beta_0 x^2 > 1$, функция e^{-x^2} уже не может считаться приближенным решением кинетического уравнения (95). Тем не менее в силу быстрого убывания

$\xi_0(x)$ с ростом x интегралы $\int_0^x x^2 \xi_0(x) dx$, $\int_0^x x^4 \xi_0(x) dx$ практически мало изменятся, если и при $x^2 \gg 1$ подставить в них вместо точной функции $\xi_0(x)$ максвелловскую функцию e^{-x^2} .

Совершим указанную подстановку в интегральном выражении $\hat{L}_e[\xi_0, \xi_0]$. После этого интегро-дифференциальное уравнение (95) станет дифференциальным. Именно:

$$\begin{aligned} \psi(x) \left[\frac{d\xi_0}{dx} + 2x\xi_0(x) \right] + \beta_1 \left[\frac{T}{T_e} \frac{d\xi_0}{dx} + 2x\xi_0(x) \right] x^4 + \\ + \beta_0 x^2 \left[\alpha \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) \frac{d\xi_0}{dx} + 2x\xi_0(x) \right] + 2\beta_2 x^3 \xi_1(x) = 0. \end{aligned} \quad (98)$$

Здесь введено обозначение

$$\psi(x) = \int_0^x x^2 e^{-x^2} dx. \quad (99)$$

Уравнение (98) нужно решать совместно с уравнением (67) для асимметричной части $\xi_1(x)$. В безразмерных переменных оно принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} 2\hat{M}_e[\xi_0(x), \xi_1(x)] - \left\{ \gamma_1 [x + \alpha_0 b N_0 (x^{(+)} + e^{\alpha_0 x^{(-)}} \Delta(x^{(-)})] + \right. \\ \left. + \frac{\pi^{1/2} N}{2nx^3} \right\} \xi_1(x) = \frac{1}{2} \gamma_2 \frac{d\xi_0}{dx}. \end{aligned} \quad (100)$$

В рассматриваемом случае сильных полей второе слагаемое в (100) можно упростить, записав

$$x + \alpha_0 b N_0 [\sqrt{x^2 + \alpha} + e^{\alpha_0} \sqrt{x^2 - \alpha} \Delta(x^2 - \alpha)] \cong \\ \cong x \left[1 + \alpha_0 N_0 (1 + e^{\alpha_0}) b \right] \equiv x \left(1 + \frac{l_a}{l_{\text{оп}}} \right), \quad (101)$$

где

$$l_{\text{оп}} = \frac{l_a T}{\hbar \omega_0 b (2N_0 + 1)} = \frac{N_0}{m^* B_{\text{оп}} (2N_0 + 1)}, \quad (102)$$

$l_{\text{оп}}$ — длина свободного пробега при одном только взаимодействии с оптическими фононами.

Пусть $\gamma_1 \left(1 + \frac{l_a}{l_{\text{оп}}} \right) > 1$. Такое неравенство позволяет пренебречь в уравнении (100) кулоновскими механизмами рассеяния импульса⁴². Решением уравнения (100) при учете (101) тогда оказывается функция

$$\xi_1 = - \frac{eFl}{2T_e} \frac{1}{x} \frac{d\xi_0}{dx}, \quad (103)$$

где l — результирующая длина пробега. Она, как обычно, определяется из равенства

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_a} + \frac{1}{l_{\text{оп}}}. \quad (104)$$

Подставим теперь функцию (103) в уравнение (98). Решение последнего тогда легко находится и может быть представлено в виде

$$\xi_0(x) = \text{const } e^{-\mathcal{F}(x)}. \quad (105)$$

где

$$\mathcal{F}(x) = 2 \int \frac{[\psi(x) + \beta_1 x^4 + \beta_0 x^2] x dx}{\psi(x) + \frac{T}{T_e} \beta_1 x^4 + \alpha \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) \beta_0 x^2 + \beta_F x^2}, \quad (106)$$

$$\beta_F = \frac{(eF)^2 l l_a}{6 m s^2 T} \left(\frac{T}{T_e} \right)^2 \beta_1. \quad (107)$$

Полученная формула (105) определяет симметричную часть функции распределения. Она учитывает взаимодействие электронов с акустическими и оптическими фононами, а также межэлектронный обмен энергией. Как частные случаи в ней содержатся все, известные из литературы, аналитические выражения сферически симметричной части функции распределения. Остановимся на этом более подробно и рассмотрим различные предельные соот-

⁴² Противоположный случай, когда именно кулоновские механизмы взаимодействия определяют $\xi_1(x)$, будет рассмотрен в следующем параграфе.

ношения между параметрами, определяющими функцию (105).

1. Пусть для некоторого значения x_0 удовлетворяются неравенства $\beta_1 x_0^4 \ll 1$, $\beta_0 x_0^2 \ll 1$, $\beta_F x_0^2 \ll 1$. Формула (105) тогда при $x \ll x_0$ с большой точностью дает максвелловское выражение $\xi_0(x) = e^{-x^2}$. Оно при $x_0 \approx 1$ подробно уже обсуждалось нами ранее. Для значений $x \gg 1$ распределение электронов по энергии, как показывает интеграл (106), заметно отличается от максвелловского. Межэлектронное взаимодействие, «максвеллизуя» распределение большинства электронов с $x \approx 1$, уже не в состоянии при $x \gg 1$ конкурировать с другими механизмами взаимодействия из-за быстрого уменьшения сечения кулоновского рассеяния с ростом энергии электронов.

Если экстраполировать функцию (105) на очень большие значения x , при которых $\beta_1 x^4$ становится главным слагаемым в числителе и знаменателе подынтегрального выражения (106), распределение получается вида $\exp\left(-\frac{T_e x^2}{T}\right)$. С учетом обозначения (69) можно предположить, что полученное распределение соответствует как бы максвелловской функции с температурой решетки. Разумеется, говорить о температуре в «хвосте» распределения не имеет большого смысла.

2. При значениях параметров $\beta_1 \gg 1$, $\beta_0 = 0$ электроны с энергией $x \gg 1$ в основном взаимодействуют только с акустическими фононами и $l \approx l_a$. Межэлектронный обмен энергией здесь не эффективен, и в уравнениях (91), (98) слагаемыми, описывающими его, равно, как и слагаемыми, описывающими взаимодействие с оптическими фононами, можно пренебречь. Показатель экспоненты (106) получается при этом таким:

$$\mathcal{F}(x) = \int \frac{2x^3 dx}{\frac{T}{T_e} x^2 + \frac{\beta_F}{\beta_1}} = \frac{T_e}{T} x^2 - \left(\frac{T_e}{T}\right)^2 \frac{\beta_F}{\beta_1} \ln \left[\frac{T_e}{T} x^2 + \frac{\beta_F}{\beta_1} \right] \equiv \frac{e}{T} - \alpha_F \ln \left(\frac{e}{T} + \alpha_F \right),$$

а сама функция (105) равной:

$$f_0(e) = \text{const} \left(\frac{e}{T} + \alpha_F \right)^{\alpha_F} e^{-e/T}.$$

Эта функция, полученная Давыдовым [106], была уже рассмотрена нами (формула (48)); значение α_F дано выражением (44).

3. При значениях параметров $\beta_1 = 0$, $\beta_0 \gg 1$ рассеяние энергии электронов определяется оптическими фононами. Нужно, однако, иметь в виду, что часто в полупроводниках, даже тогда, когда энергетические потери электронов почти целиком определяются взаимодействием с оптическими фононами, изменение импульса остается в основном обязанным рассеянию на акустических фононах.

Положив в (106) $\beta_1 = 0$ и пренебрегая величиной $\psi(x)$ по сравнению с $\beta_0 x^2$, найдем

$$\mathcal{F}(x) = \frac{x^2}{\alpha \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) + \frac{\beta_F}{\beta_0}} = \frac{\varepsilon}{\hbar \omega_0 \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) + \frac{(eF)^2 l l_a}{3 \hbar \omega_0} (2N_0 + 1)}. \quad (108)$$

Функция распределения (105) с показателем степени (108) совпадает с известной функцией Райка и Рыскина [115], полученной ими при решении уравнения Больцмана для $n-Ge$. Интересно, что эта функция тоже оказалась максвелловской с некоторой эффективной температурой (значение которой определяется (108)), хотя межэлектронное перераспределение энергии здесь не играет заметной роли. Мы еще встретимся в других главах с примером того, как в силу случайных обстоятельств сферически симметричная часть функции распределения носителей приобретает максвелловский вид.

После рассмотрения приведенных частных случаев перейдем к получению общего выражения в «хвосте» распределения, не связанного с наложением условий на значения параметров. Единственное приближение, которое допустим, вычисляя $\mathcal{F}(x)$ при $x \gg 1$, будет состоять в замене $\psi(x)$ на $\psi(\infty) = \frac{\pi^{1/2}}{4}$ в подынтегральном выражении (106). Совершаемая тут ошибка не велика, так как $\psi(2)$ уже отличается от $\psi(\infty)$ всего на $\sim 5\%$, а $\psi(3)$ — менее чем на $0,05\%$.

Указанная замена $\psi(x)$ позволяет вычислить интеграл (106) в элементарных функциях. С точностью до некоторой константы C он равен

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(x) = & \frac{T_e}{T} x^2 + \frac{T_e}{T^2} \cdot \frac{T\beta_0 - gT_e}{2\beta_1} \ln \frac{\frac{\pi^{1/2}}{4} + gx^2 + \frac{T}{T_e} \beta_1 x^4}{\frac{\pi^{1/2}}{4}} + \\ & + \left[\left(1 - \frac{T_e}{T} \right) \frac{\pi^{1/2}}{4} - \frac{T_e}{T} \cdot \frac{g}{2\beta_1 T} (\beta_0 T - T_e g) \right] \varphi(x), \quad (109) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} g = & \alpha_0 \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) \beta_0 + \beta_F; \quad \delta = g^2 - \pi^{1/2} \frac{T}{T_e} \beta_1, \\ \varphi(x) = & \begin{cases} \frac{1}{\delta^{1/2}} \ln \frac{\pi^{1/2} + 2x^2(g + \delta^{1/2})}{\pi^{1/2} + 2x^2(g - \delta^{1/2})} & \text{при } \delta > 0, \\ \frac{2}{(-\delta)^{1/2}} \operatorname{arctg} \frac{2x^2(-\delta)^{1/2}}{\pi^{1/2} + 2gx^2} & \text{при } \delta < 0. \end{cases} \quad (110) \end{aligned}$$

Константу интегрирования C выберем так, чтобы $\mathcal{F}(x)$ при $x \approx 1$ переходила в x^2 , по крайней мере, при $\beta_1 \ll 1$, $\beta_0 \ll 1$ и $\beta_F \ll 1$. Такое условие определяет эту константу равной нулю⁴³.

Из формулы (109) видно, что при значениях аргумента $x \gg 1$ функция $\mathcal{F}(x)$ уже значительно отличается от x^2 . Это еще раз подтверждает высказанное выше положение, что в электрическом поле распределение быстрых электронов по энергии резко отличается от распределения электронов средних энергий⁴⁴. Обратим внимание на характер этого распределения. Из формулы (109) видно, что последние два слагаемых правой части при $x \gg 1$ изменяются с x гораздо медленнее первого. Это означает, что с ростом x именно первое слагаемое, т. е. $\frac{T_e}{T} x^2 = \frac{\varepsilon}{T}$ в основном определяет распределение. Следовательно, быстрые электроны, более интенсивно взаимодействующие с решеткой, чем медленные, «нагреваются» полем слабее. Общее же число быстрых электронов, благодаря их взаимодействию с «нагретыми» электронами средних энергий, как правило, оказывается значительно больше, чем при отсутствии электрического поля. Аналогичная ситуация, кстати, встречается и в газоразрядной плазме [117].

§ 8. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП

В предыдущих параграфах мы подробно остановились на решении кинетического уравнения в приближении электронной температуры. Была в разных случаях определена предельная концентрация носителей $n^{(e)}$, начиная с которой межэлектронное взаимодействие является доминирующим механизмом перераспределения энергии между ними. В то же время было показано, что имеется диапазон концентраций $n^{(e)} < n < n^{(p)}$, в котором это взаимодействие, определяя по существу сферически симметричную часть функции распределения, практически еще не сказывается на ее асимметричной части. Это связано с тем, как выше отмечалось, что рассеяние носителей друг на друге (непосредственно не изменяющее импульса всего газа носителей) может, при наличии других механизмов рассеяния, повлиять на асимметричную часть функции распределения только при значительно больших концентрациях, чем $n^{(e)}$.

⁴³ Предложенный здесь выбор константы интегрирования по существу эквивалентен интегрированию (106) в пределах от 0 до x . Действительно, когда коэффициенты β_0 , β_1 , β_F значительно меньше единицы, интеграл (106) отличается от x^2 на величину порядка этих параметров. Следовательно, наш выбор константы интегрирования обеспечивает правильное значение $\mathcal{F}(x)$ как в области средних энергий $x^2 \approx 1$, так и в области энергий $x^2 \gg 1$.

⁴⁴ Отличие распределения быстрых электронов в поле от распределения электронов средних энергий не раз отмечалось в литературе. В частности, оно показано, например, в работе [116].

Рассмотрим теперь именно систему, в которой $n \gg n^{(p)}$. При такой концентрации носителей безразмерная функция $\xi_0(x)$ уже безусловно имеет максвелловский вид e^{-x^2} . Поэтому вполне законно подставить в оператор $M_e[\xi_0(x), \xi_1(x)]$ уравнения (100) $\xi_0 = e^{-x^2}$. Это уравнение тогда примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi(x) \left\{ \frac{d\xi_1}{dx} + \left(2x - \frac{1}{x} \right) \xi_1(x) + 4 \int_x^\infty \xi_1(x) dx \right\} + \\ + e^{-x^2} \left\{ \frac{2}{3} \left[\int_0^x x^3 \xi_1(x) dx - 2x^3 \int_x^\infty \xi_1(x) dx \right] - \right. \\ \left. - \frac{4}{5} \left[\int_0^x x^5 \xi_1(x) dx + x^5 \int_x^\infty \xi_1(x) dx \right] \right\} = \int_0^x Q(x) \xi_1(x) dx - \\ - \gamma_2 \int_0^\infty x^4 e^{-x^2} dx. \end{aligned} \quad (111)$$

В величину $Q(x)$ мы включили все механизмы рассеяния, действие которых описывается результирующим временем релаксации ⁴⁵ $\tau(x)$:

$$Q(x) = \frac{(2\pi m^* T_e)^{3/2}}{4\pi m^* n B_e} \frac{x^3}{\tau(x)}. \quad (112)$$

В частности, когда рассеяние электронов происходит на заряженных примесях, акустических и оптических фононах, $Q(x)$ согласно (100) имеет вид

$$\begin{aligned} Q(x) = \frac{\pi^{1/2}}{2} + \gamma_1 \{ x^4 + \alpha_0 b N_0 x^3 [(x^2 + \alpha)^{1/2} + e^{\alpha_0} (x^2 - \alpha)^{1/2} \times \\ \times \Delta(x^2 - \alpha)] \}. \end{aligned} \quad (113)$$

Интегро-дифференциальное уравнение (111) нам здесь целесообразно привести к интегральному. Для этого введем новую функцию $\eta(x)$, связанную с искомой $\xi_1(x)$ уравнением

$$\frac{d\xi_1}{dx} + \left(2x - \frac{1}{x} \right) \xi_1(x) = x e^{-x^2} \eta(x). \quad (114)$$

Функция $\xi_1(x)$ из этого уравнения выражается через $\eta(x)$ так:

$$\xi_1(x) = C x e^{-x^2} + x e^{-x^2} \int_0^x \eta(x) dx. \quad (115)$$

Константу интегрирования C определим из интегрального условия

$$\int_0^\infty Q(x) \xi_1(x) dx - \gamma_2 \int_0^\infty x^4 e^{-x^2} dx = 0, \quad (116)$$

⁴⁵ Здесь и ниже будем рассматривать некомпенсированные полупроводники и считать концентрацию примесных ионов N равной концентрации электронов n (или дырок в случае, когда примеси — акцепторы).

непосредственно следующего из уравнения (111) при $x \rightarrow \infty$. Нетрудно видеть, что формула (116) выражает закон сохранения импульса: импульс, полученный электронным газом от поля, равен импульсу, переданному решетке.

Из (115) и (116) следует

$$C = \frac{1}{G(0)} \left\{ \gamma_2 K(0) - \int_0^\infty G(x) \eta(x) dx \right\}, \quad (117)$$

где

$$G(x) = \int_x^\infty Q(x) e^{-x^2} dx, \quad K(x) = \int_x^\infty x^4 e^{-x^2} dx. \quad (118)$$

Подставим функцию (115) в (111). Это даст симметричное интегральное уравнение, которое удобно записать в таком виде:

$$\hat{H}[\eta(x)] = \gamma_2 U(x). \quad (119)$$

Здесь

$$\hat{H}[\eta(x)] \equiv \hat{H}_1[\eta(x)] + \hat{H}_2[\eta(x)], \quad (120)$$

$$U(x) = \frac{1}{G(0)} \{ G(x) K(0) - G(0) K(x) \}. \quad (121)$$

Оператор $\hat{H}_1[\eta(x)]$ характеризует межэлектронное взаимодействие. Он выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1[\eta(x)] = & x e^{-x^2} \psi(x) \eta(x) + 2 e^{-x^2} \int_0^x \left[\psi(x) - \frac{1}{3} x^3 \left(1 + \frac{3}{5} x^2 \right) e^{-x^2} \right] \times \\ & \times \eta(x) dx + 2 \left[\psi(x) - \frac{1}{3} x^3 \left(1 + \frac{3}{5} x^2 \right) e^{-x^2} \right] \int_x^\infty \eta(x) dx. \end{aligned} \quad (122)$$

Оператор $\hat{H}_2[\eta(x)]$ характеризует все другие механизмы рассеяния

$$\begin{aligned} \hat{H}_2[\eta(x)] = & G(x) \int_0^\infty \left[1 - \frac{G(x)}{G(0)} \right] \eta(x) dx + \\ & + \left[1 - \frac{G(x)}{G(0)} \right] \int_x^\infty G(x) \eta(x) dx. \end{aligned} \quad (123)$$

В принятых обозначениях электропроводность σ запишется в виде

$$\begin{aligned} \sigma = & \frac{4en}{3F} \left(\frac{2T_e}{\pi m^*} \right)^{1/2} \int_0^\infty x^3 \xi_1(x) dx = \\ = & \frac{4en}{3F} \left(\frac{2T_e}{\pi m^*} \right)^{1/2} \gamma_2 \left\{ \frac{K^2(0)}{G(0)} + \frac{1}{\gamma_2} \int_0^\infty U(x) \eta(x) dx \right\}. \end{aligned} \quad (124)$$

Вычисление ее требует знания функции $\eta(x)$, определение которой из уравнения (119) представляет довольно сложную задачу. Достаточно сказать, что даже более простое уравнение в задаче о полностью ионизованной плазме (не содержащей решеточных механизмов рассеяния) в работе [69] решалось численно. Добавление, как в нашем случае, этих механизмов рассеяния, если пользоваться методом [69—71], потребует выполнения заново всей процедуры довольно трудоемких расчетов.

Учитывая сказанное, изложим аналитический метод решения задачи, являющийся более простым и позволяющий получить как частный случай результат работы [69]. Заметим прежде всего, что фактически для вычисления проводимости и других кинетических коэффициентов достаточно знать не саму функцию $\eta(x)$, а только определенные интегралы от нее. Для вычисления проводимости и электронной температуры, например, нужно согласно (124) знать интеграл

$$I = \frac{1}{\gamma_2} \int_0^{\infty} U(x) \eta(x) dx. \quad (125)$$

То обстоятельство, что задача практически сводится к вычислению определенных интегралов, подсказывает целесообразность разработки соответствующего вариационного принципа. Известно, что вариационный метод, предложенный Колером [118] и Зондгеймером [119], оказался весьма плодотворным и удобным для решения задач по явлениям переноса в металлах и полупроводниках [120]. Сформулируем сейчас вариационный принцип нашей задачи аналогично вариационному принципу для фаз по методу Швингера [121] в задаче о столкновениях.

Построим функционал, экстремальное значение которого совпадает с точным значением интеграла (125), когда функция $\eta(x)$ является точным решением уравнения (119). Процедура построения такого функционала следующая. Умножим сперва левую и правую части равенства (125) на интеграл, стоящий в правой части этого равенства, т. е. вместо (125) запишем эквивалентное равенство

$$I \int_0^{\infty} \gamma_2 U(x) \eta(x) dx = \left(\int_0^{\infty} U(x) \eta(x) dx \right)^2$$

и затем вместо $\gamma_2 U$ подставим равное ему по формуле (119) операторное выражение $\hat{H}[\eta(x)]$. Функционал I тогда приобретает вид

$$I = \frac{\left(\int_0^{\infty} U(x) \eta(x) dx \right)^2}{[\eta, \eta]}, \quad (126)$$

где обозначено

$$[\eta, \eta] \equiv \int_0^{\infty} \eta(x) \hat{H}[\eta(x)] dx. \quad (127)$$

Можно проверить (аналогично тому, как это сделано, например, в книге Шиффа [121]), что выражение I (126) обладает свойством стационарности. Это означает, что при небольшом отклонении $\eta(x)$ от своего точного значения вариация первого порядка I равна нулю. Таким образом, ошибка первого порядка в выборе пробной функции приводит к ошибке второго порядка в I , а значит, к такой же ошибке в величине проводимости и электронной температуры.

Оператор $\hat{H}$ является положительным и самосопряженным. Самосопряженность $\hat{H}$, т. е. свойство $[\eta_1, \eta_2] = [\eta_2, \eta_1]$, где $\eta_1(x), \eta_2(x)$ — произвольные (интегрируемые в бесконечных пределах) функции, вытекает из самого его определения (120), (122), (123) и доказывается простой перестановкой порядка интегрирования выражения $[\eta_1, \eta_2]$. Поэтому остановимся только на доказательстве положительности $\hat{H}$, т. е. свойства $[\eta, \eta] \geq 0$ при произвольной функции $\eta(x)$.

Путем несложных, хотя и несколько громоздких вычислений, можно проверить справедливость следующего равенства:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \eta(x) \hat{H}_1[\eta(x)] dx &= \int_0^\infty dx e^{-x^2} \left\{ \eta^2(x) \psi(x) x + 4\eta(x) \times \right. \\ &\times \int_0^x \left[\psi(x') - \frac{1}{3}x'^3 \left(1 + \frac{3}{5}x'^2 \right) e^{-x'^2} \right] \eta(x') dx' \Big\} = \\ &= \sum_{i,k=1}^3 \frac{8}{32\pi^2} \iint e^{-(r^2+r'^2)} S_i S_k \frac{\partial^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{\partial r_i \partial r_k} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}', \end{aligned}$$

где

$$S_i = \frac{\partial}{\partial r_i} \left[r_3 \int_0^r \eta(t) dt \right] - \frac{\partial}{\partial r'_i} \left[r'_3 \int_0^{r'} \eta(t) dt \right] \quad (r_1 = x, r_2 = y, r_3 = z).$$

Так как

$$\sum_{i,k=1}^3 S_i S_k \frac{\partial^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{\partial r_i \partial r_k} = \frac{S^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - (S, \mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \geq 0,$$

то тем самым положительность оператора $\hat{H}_1$ становится очевидной.

Для доказательства положительности оператора $\hat{H}_2$ умножим (123) на произвольную функцию $\eta(x)$ и проинтегрируем в бесконечных пределах:

$$\int_0^\infty \eta(x) \hat{H}_2[\eta(x)] dx = \int_0^\infty \eta(x) \left\{ G(x) \int_0^x \left[1 - \frac{G(x')}{G(0)} \right] \eta(x') dx' + \right.$$

$$+ \left[1 - \frac{G(x)}{G(0)} \right] \int_x^\infty G(x') \eta(x') dx' \Big\} dx =$$

$$= 2 \int_0^\infty \left[1 - \frac{G(x)}{G(0)} \right] \eta(x) dx \int_x^\infty G(x') \eta(x') dx'.$$

Эту формулу, если учесть (118) и ввести для сокращения записи обозначение

$$\chi(x) = \int_x^\infty G(x) \eta(x) dx,$$

можно записать в виде

$$\int_0^\infty \eta(x) H_2[\eta(x)] dx = - \int_0^\infty \left(\frac{\chi(x)}{G(x)} \right)^2 \frac{dG}{dx} dx = \int_0^\infty x Q(x) \left(\frac{\chi(x)}{G(x)} \right)^2 dx \geq 0,$$

откуда положительность оператора $\hat{H}_2$ также становится очевидной.

Из положительности и самоспряженности оператора $\hat{H}$ следует, что функционал (126) принимает стационарное значение при функции $\eta(x)$, являющейся решением уравнения (119), и что это стационарное значение соответствует максимуму I . Действительно, для двух функций $\eta_1(x)$ и $\eta_2(x)$, для которых существует выражение $[\eta_1, \eta_2]$ в соответствии с определением (127), в силу доказанных свойств $\hat{H}$ имеет место неравенство

$$[\eta_1 + \lambda \eta_2, \eta_1 + \lambda \eta_2] = [\eta_1, \eta_1] + 2\lambda [\eta_1, \eta_2] + \lambda^2 [\eta_2, \eta_2] \geq 0.$$

Пусть теперь $\eta_2(x) = \eta(x)$, где $\eta(x)$ — точная функция уравнения (119). Тогда согласно (127)

$$[\eta_2, \eta_2] = \gamma_2 \int_0^\infty U(x) \eta(x) dx, \quad [\eta_1, \eta_2] = \gamma_2 \int_0^\infty U(x) \eta_1(x) dx.$$

Из приведенных выражений следует неравенство

$$\frac{\left[\int_0^\infty U(x) \eta_1(x) dx \right]^2}{[\eta_1, \eta_1]} \leq \frac{1}{\gamma_2} \int_0^\infty U(x) \eta(x) dx, \quad (128)$$

которое и показывает, что функционал (126), вычисленный с помощью любой пробной функции $\eta_1(x)$, всегда меньше точного его значения, вычисленного на точной функции $\eta(x)$ уравнения (119).

Чтобы проверить точность изложенного вариационного метода, вычислим для примера введенную Спитцером и Хермом [71] для газоразрядной плазмы величину γ_E , которая в наших обозначениях

имеет вид

$$\gamma_E = \frac{\pi^{1/2}}{6\gamma_2} \int_0^\infty x^3 \xi_1(x) dx. \quad (129)$$

Ниже будет показано, что γ_E определяет отношение подвижности электронов, вычисленной с учетом их рассеяния на примесных ионах и друг на друге, к чисто примесной подвижности (подвижности, вычисленной при учете рассеяния на одних только примесных ионах). Эта последняя согласно (113), (118), (121) определяется такими значениями величин $G(x)$, $Q(x)$, $U(x)$:

$$G(x) = \frac{\pi^{1/2}}{4} e^{-x^2}, \quad Q(x) = \frac{\pi^{1/2}}{2}, \quad U(x) = K(0) e^{-x^2} - K(x).$$

Если подставить эти значения в функционал (126), вычисленный даже с такой простой пробной функцией, как $\eta(x) = x$, и учесть проводимость σ из (124), то получится $\gamma_E \cong 0,569$. Такое число совпадает с числом, полученным по методу Каулинга и Чепмена [77] во втором приближении, и только на 2% меньше γ_E , полученного в [69] численным интегрированием уравнения, определяющего $\xi_1(x)$.

§ 9. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ АТОМАРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Приступим к построению точного решения уравнения (119) и сопоставим его с приближенным методом, изложенным выше. Для этого представим функцию $\eta(x)$ в виде бесконечного ряда ⁴⁶

$$\eta(x) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^{2k-1}. \quad (130)$$

Ограничимся сперва l слагаемыми ряда и подставим их в уравнение (119). В соответствии с процедурой метода моментов, определим коэффициенты a_k из следующей системы линейных алгебраических уравнений:

$$\sum_{k=1}^l H_{ik} a_k = \gamma_2 b_i, \quad (131)$$

где

$$H_{ik} = H_{ki} = \int_0^\infty x^{2i-1} H[x^{2k-1}] dx, \quad b_i = \int_0^\infty U(x) x^{2i-1} dx. \quad (132)$$

⁴⁶ Так как функция $\eta(x)$ задана на полуоси $(0, \infty)$, ее можно аппроксимировать четными и нечетными степенями x . По формуле (115) удобнее брать ряд по нечетным степеням x . Такой выбор соответствует еще тому, что $f_{\pm}(p)$ выражается рядом по целочисленным степеням энергии ε .

Покажем, что функция $\eta^{(l)}(x) = \sum_{k=1}^l a_k x^{2k-1}$ с коэффициентами a_k , определенными из системы (131), экстремизирует функционал (126). Подставим $\eta^{(l)}(x)$ в (126) и потребуем, чтобы

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0.$$

После этого коэффициенты a_k определяются такой системой уравнений:

$$\sum_{i,j=1}^l (b_k H_{ij} a_i a_j - b_j H_{ik} a_i a_j) = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, l).$$

Эта система тождественно удовлетворяется, если a_k определены из уравнений (131). Таким образом, метод моментов оказывается эквивалентным рассмотренному вариационному и с его помощью можно вычислить (приблизленно) функционал I на конечном отрезке ряда (130).

Для нахождения точного значения I воспользуемся приведенным приближенным и подставим его в (126). Приближенное значение I , учитывая (131), запишем так:

$$I \cong \frac{1}{\gamma_2} \sum_{k=1}^l a_k b_k = - \frac{D_{bb}^{(l)}}{D^{(l)}}. \quad (133)$$

Здесь $D^{(l)}$ и $D_{bb}^{(l)}$ — детерминанты l -го и $l+1$ -го порядка соответственно:

$$D^{(l)} = \begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1l} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2l} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{l1} & H_{l2} & \dots & H_{ll} \end{vmatrix}, \quad D_{bb}^{(l)} = \begin{vmatrix} 0 & b_1 & b_2 & \dots & b_l \\ b_1 & H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1l} \\ b_2 & H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2l} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_l & H_{l1} & H_{l2} & \dots & H_{ll} \end{vmatrix}. \quad (134)$$

Очевидно, точное значение I получится, если в (133) перейти к пределу

$$I = \lim_{l \rightarrow \infty} \left(- \frac{D_{bb}^{(l)}}{D^{(l)}} \right). \quad (135)$$

Преобразуем, следуя [122], выражение (135) с помощью известной из алгебры теоремы Сильвестра:

$$- \frac{D_{bb}^{(l)}}{D^{(l)}} = - \frac{D_b^{(l-1)}}{D^{(l-1)}} + \frac{(D_b^{(l-1)})^2}{D^{(l-1)} D^{(l)}} \quad (l \geq 2),$$

где

$$D_b^{(l-1)} = \begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1,l-1} & b_1 \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2,l-1} & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{l1} & H_{l2} & \dots & H_{l,l-1} & b_l \end{vmatrix}.$$

Получим

$$I = \frac{b_1^2}{H_{11}} + \sum_{l=2}^{\infty} \frac{(D_b^{(l-1)})^2}{D^{(l-1)} D^{(l)}}. \quad (136)$$

Точное выражение электропроводности теперь согласно (124) и (126) определится рядом

$$\sigma = \frac{m^* e^2}{3\pi e^{*4} \ln(\rho_D/b_0)} \left(\frac{2T_e}{m^*} \right)^{1/2} \left\{ \frac{K^2(0)}{G(0)} + \frac{b_1^2}{H_{11}} + \sum_{l=2}^{\infty} \frac{(D_b^{(l-1)})^2}{D^{(l-1)} D^{(l)}} \right\}. \quad (137)$$

Все члены ряда (137) положительны в силу положительности оператора H . Поэтому обрыв ряда на некотором l -м члене даст уменьшенное значение σ .

Приведем в явном виде значения b_l и матричных элементов $H_{lm} = H_{lm}^{(1)} + H_{lm}^{(2)}$ операторов (122) и (123):

$$b_l = \frac{\pi^{1/2}}{16l} \left[3 \frac{G_l}{G_0} - \frac{(2l+3)!!}{2^l} \right], \quad (138)$$

$$\begin{cases} H_{lm}^{(1)} = \left(1 + \frac{1}{l} + \frac{1}{m} \right) V_{l+m-1}(1) - \left(\frac{2}{3} + \frac{1}{m} \right) V_{l-1}(m+1) - \\ - \left(\frac{2}{3} + \frac{1}{l} \right) V_{m-1}(l+1) - \frac{2}{5} [V_{l-1}(m+2) + V_{m-1}(l+2)], \\ H_{lm}^{(2)} = \frac{1}{4lm} \left[G_{l+m} - \frac{G_l G_m}{G_0} \right], \end{cases} \quad (139)$$

Здесь введены такие обозначения:

$$V_m(l) = \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \sum_{k=0}^m \frac{m! (2l+2k-1)!!}{4^{l+k} k!},$$

$$G_l = \int_0^{\infty} x^{2l+1} Q(x) e^{-x^2} dx; \quad G_0 \equiv G(0). \quad (140)$$

В общем случае, когда учитываются наиболее характерные для полупроводников механизмы рассеяния (на ионизованных примесях, акустических и оптических фононах), функция G_l имеет вид

$$\begin{aligned} G_l = \frac{\pi^{1/2}}{4} l! + \frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ (l+2)! + (-1)^{l+1} \alpha_0 b N_0 \times \right. \\ \left. \times \frac{d^{l+1}}{d\alpha^{l+1}} \left[\frac{1}{\alpha} \operatorname{ch} \left(\frac{\alpha_0 - \alpha}{2} \right) K_1 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (141)$$

где $K_1\left(\frac{\alpha}{2}\right)$ — модифицированная функция Ганкеля.

Пользуясь выражением (141), проанализируем электропроводность (137) в некоторых конкретных ситуациях, и, в частности, обсудим применимость широко встречающейся в литературе (и во многих случаях достаточно удобной и хорошей) сдвинутой максвелловской функции распределения, имеющей вид

$$f(p) = \frac{n}{(2\pi m^* T_e)^{3/2}} e^{-(p-p_0)^2/2m^* T_e}, \quad (142)$$

где $p_0 = m^* v_d$ находится из закона сохранения импульса (116).

Остановимся сперва на случае, который возникает при низкой температуре решетки в полупроводнике с большой концентрацией доноров (акцепторов), когда в основном нужно принимать во внимание только кулоновские механизмы рассеяния. При таких механизмах согласно (113) $Q(x) = \frac{\pi^{1/2}}{2}$. Простые вычисления по формуле (137) при учете (138) — (140) тогда определяют электропроводность таким рядом:

$$\sigma = \frac{2m^* e^2}{e^{*4} \ln\left(\frac{\rho_D}{b_0}\right)} \left(\frac{2T_e}{\pi m^*}\right)^{3/2} \cdot \frac{3\pi}{32} (1 + 0,9320 + 0,0179 + \\ + 0,0137 + \dots).$$

Поскольку σ и γ_E определяются одним и тем же интегралом, то, как следует из сопоставления формул (124) и (129), γ_E выражается аналогичным рядом, т. е.

$$\gamma_E = \frac{3\pi}{32} (1 + 0,9320 + 0,0179 + 0,0137 + \dots).$$

Сравнивая эти две последние формулы с выражением (88), определяющим подвижность при чисто примесном механизме рассеяния (когда $\mu = \mu_I$), можно сказать, что

$$\gamma_E = \frac{\mu}{\mu_I} \quad (143)$$

при чисто кулоновском рассеянии определяет отношение полной подвижности μ (рассеяние на примесях и друг на друге) к подвижности μ_I . Отсюда межэлектронное взаимодействие (как неоднократно уже упоминалось), не изменяющее импульса электронного газа, в присутствии примесных ионов (при $N = n$) почти так же влияет на подвижность, как и сами ионы. Этот вывод нужно иметь в виду при расчете проводимости некомпенсированных полупроводников при низких температурах.

Оставляя в формуле (143) последовательно один, два, три и т. д. члена, получим значения γ_E , соответственно равные приблизительно 0,2945; 0,5690; 0,5743; 0,5783 и т. д. Это в точности те же значения, которые получены методом Каулинга — Чепмена [77]

в первом, втором и т. д. приближениях. Здесь они определены единым образом из одного аналитического выражения.

Включение некулоновских механизмов рассеяния уменьшает роль межэлектронного рассеяния и при концентрации носителей $n \ll n^{(p)}$ (см. (81)) практически сводит ее к нулю. Однако при концентрации $n \approx n^{(p)}$ межэлектронное рассеяние еще заметно. Так, по формуле (137) проводимость σ при учете рассеяния электронов на акустических фоновых, примесных ионах и друг на друге согласно (138) — (140) имеет вид

$$\sigma = \frac{2m^*e^2}{e^{*4} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right)} \left(\frac{2T_e}{\pi m^*} \right)^{3/2} \frac{3\pi}{32(1+\gamma)} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{(\gamma-3)^2}{4 \left[3\gamma^2 + 2 \left(4 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \gamma + 1 + \sqrt{2} \right]} + \dots \right\}, \quad (144)$$

где

$$\gamma = \frac{1}{3} \frac{\mu_I}{\mu_a} = \frac{2T_e^2}{\pi n l_a e^{*4} \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right)}. \quad (145)$$

Для большей наглядности мы ввели параметр γ , характеризующий, как (90), отношение чисто примесной подвижности μ_I (88) к подвижности μ_a (89).

При $\gamma \rightarrow \infty$ подвижность μ , как и следовало ожидать, практически точно совпадает с вычисленной ранее (89) подвижностью μ_a при рассеянии на одних акустических фоновых. Межэлектронное рассеяние здесь не влияет на подвижность, поскольку при $\gamma \rightarrow \infty$ кулоновские механизмы рассеяния играют вообще пренебрежимо малую роль. Интересно поэтому сопоставить подвижность, следующую из формулы (144), с подвижностью, когда рассеяние на примесных ионах заметно. Возьмем для примера $\mu_I = \mu_a$, т. е. $\gamma = \frac{1}{3}$. Такой выбор параметра γ определяет подвижность μ (после подстановки в (144) выражения μ_I (88)), равную

$$\mu = \frac{9\pi}{128} \mu_I (1 + 0,302 + \dots) \approx 0,28\mu_I, \quad (146)$$

в то время как без учета межэлектронного рассеяния она равнялась бы $\sim 0,5\mu_I$. Межэлектронное рассеяние в этом примере еще заметно уменьшает подвижность. Можно вообще утверждать, что влияние межэлектронного рассеяния на подвижность всегда соизмеримо (в некомпенсированных полупроводниках, когда $N = n$) с влиянием рассеяния на примесных ионах.

Исходя из сказанного, приведем значение подвижности в общем случае, когда принято во внимание также и рассеяние электронов

на оптических фононах. Согласно (137) — (140) и (113)⁴⁷ имеем

$$\mu = \frac{3}{8} e l_a \left(\frac{\pi}{2m^* T_e} \right)^{1/2} \frac{\pi^{1/2}}{4G_0} \gamma \left\{ 1 + \frac{\left(G_1 - \frac{5}{2} G_0 \right)^2}{\left(\frac{\pi}{8} \right)^{1/2} G_0 + G_0 G_2 - G_1^2} + \dots \right\}. \quad (147)$$

В (147) входят величины G_l , определенные выражениями (141). Приведем здесь их явный вид для полупроводника при температуре решетки (или сильного поля), при которой взаимодействие с оптическими фононами является существенно неупругим ($\alpha \gg 1$) и можно использовать асимптотику функций $K_1 \left(\frac{\alpha}{2} \right)$:

$$G_l \cong \frac{\pi^{1/2}}{4} l! + \frac{1}{2} \gamma_1 \left\{ (l+2)! + (-1)^l \frac{\pi^{1/2} \alpha_0}{2\alpha^{3/2}} b N_0 e^{\frac{\alpha_0}{2}} - \alpha \right\}. \quad (148)$$

Формула (147) при различных предельных значениях параметров γ и $B_{\text{оп}}$ определяет полученные выше значения чисто примесной (μ_I), акустической (μ_a) и оптической ($\mu_{\text{оп}}$) подвижности. Можно и в этой формуле увидеть, что, когда примесная проводимость соизмерима с другими видами проводимости, межэлектронное рассеяние вносит заметный вклад в величину результирующей подвижности.

Здесь уместно в общих чертах остановиться на характеристике предложенного вариационного метода и сравнить его с методом моментов (131). Оба метода, как было указано, эквивалентны. Тем не менее нужно констатировать, что вариационный метод более эффективен и удобен. Он позволяет по формуле (124) определить электропроводность с любой степенью точности, если выразить пробную функцию $\eta(x)$ рядом (130). При этом σ выражается рядом (137) и, что особо стоит подчеркнуть, уточнение решения добавлением последующих членов ряда не затрагивает предыдущих его членов, в то время как в методе моментов переход от одного приближения к другому связан с выполнением заново всей процедуры вычислений.

В вариационном решении задачи электропроводности первый член ряда (137) определяется выбором асимметричной функции распределения $\xi_1(x)$ в виде (115) и не связан с выбором пробной функции. Только второй и последующие члены ряда (137) получены из условия стационарности функционала I . Характерно (это видно из рассмотренных численных примеров), что второй член ряда, в зависимости от обстоятельств, может быть порядка первого и даже больше (при рассеянии на оптических фононах, например). Однако даже, начиная с третьего, члены ряда убы-

⁴⁷ В формуле (147) мы привели только два слагаемых ряда (137). Остальные слагаемые, как показало рассмотрение различных предельных случаев, вносят только небольшую поправку в значение μ .

вают быстро, причем каждая пара соседних членов — примерно одного порядка и существенно меньше предыдущей (5-й и 6-й члены меньше 3-го и 4-го и т. д.). Число членов ряда (137), кроме первого, определяется числом вариационных параметров, которыми аппроксимируется пробная функция $\eta(x)$. Быстрая сходимость ряда (137) фактически обусловлена выбором самого стиля функции $\xi_1(x)$ (115), в котором с самого начала учтен закон сохранения количества движения газа носителей.

Сопоставляя вариационный метод с методом моментов, нужно, впрочем, помнить, что их эквивалентность имеет место только при условии самосопряженности оператора $\hat{H}$ (120). Если оператор $\hat{H}$ не самосопряженный, то вариационный принцип уже не оправдан и не применим. Что же касается метода моментов, то для его применимости нет необходимости в самосопряженности $\hat{H}$. При рассмотрении неупругих столкновений горячих электронов с фононами мы как раз встретимся с такой ситуацией. Решение задачи может быть выполнено методом моментов, хотя оценка точности результата затруднена.

В заключение данного параграфа остановимся на границах применимости введенной Фрелихом и Паранджапой [113] функции распределения (142). В диффузионном приближении эта функция представляется так:

$$f(p) \cong \frac{n}{(2\pi m^* T_e)^{3/2}} \left\{ e^{-p^2/2m^* T_e} + \frac{pp_0}{m^* T_e} e^{-p^2/2m^* T_e} \right\}. \quad (149)$$

Здесь второй член ряда определяет асимметричную часть функции распределения и однозначно соответствует первому слагаемому выражения (115). Проводимость σ , вычисленная с помощью такой функции, выражается первыми слагаемыми формул (124) и (137). Выше было показано, что при этом может быть допущена значительная ошибка в определении σ , если подвижность μ_1 не превосходит значительно подвижность, обусловленную другими механизмами рассеяния. Отсюда видно, что сдвинутая по импульсам максвелловская функция распределения (142) в несобственных (и не компенсированных) полупроводниках с электронной концентрацией, достаточной для максвеллизации $f_0(p)$, должна, в пределах применимости диффузионного приближения, считаться удовлетворительной только в такой области концентраций доноров (акцепторов), температур решетки и напряженностей полей, в которой примесное рассеяние не играет заметной роли.

§ 10. РАЗОГРЕВ ЭЛЕКТРОНОВ ПОСТОЯННЫМ И ВЫСОКОЧАСТОТНЫМ ПОЛЕМ

До сих пор мы искали решение кинетического уравнения в полупроводнике, к которому приложено постоянное электрическое поле. В эксперименте, однако, часто реализуется ситуация, когда наряду с постоянным во времени электрическим полем имеется еще магнитное или высокочастотное электромагнитное поле. Изменение функции распределения носителей в постоянных электрическом и магнитном полях и возникающие при этом гальваномагнитные эффекты будут еще рассмотрены в пятой главе. Здесь же мы немного остановимся на влиянии постоянного $\mathbf{F}$ и переменного $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos \omega t$ полей на газ носителей в полупроводнике.

Обычно при теоретическом исследовании свойств электронного газа в полупроводнике, находящемся одновременно в постоянном и переменном электрических полях, предполагается малость одного из них. Когда, например, переменное поле $\mathbf{E}$ мало не только по сравнению с полем $\mathbf{F}$, но и в смысле неравенства (21), функция распределения носителей представляется в виде $f(\mathbf{p}) + \varphi(\mathbf{p}, t)$, где $f(\mathbf{p})$ — функция распределения в постоянном поле, а $\varphi(\mathbf{p}, t)$ — добавка к ней, линейная по полю $\mathbf{E}$ и зависящая от $\mathbf{F}$, как от параметра (см. [123, 124]).

Кроме случаев одного слабого поля или даже обоих слабых полей, на практике могут реализоваться условия, когда оба поля достаточно сильны и разогрев электронов носит комбинированный характер. Рассмотрение такого случая представляется несомненно интересным, хотя ему в литературе и не уделено должного внимания. Выполним соответствующий расчет и найдем в рамках диффузионного приближения функцию распределения $f_{pt} \equiv f(\mathbf{p}, t)$. Полученная функция обобщит результаты предыдущих параграфов, относящиеся к постоянному полю и результаты работ [125, 126] по переменному полю.

Кинетическое уравнение задачи имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f_{pt}}{\partial t} + e(\mathbf{F} + \mathbf{E}_0 \cos \omega t) \frac{\partial f_{pt}}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f_{pt}}{\partial t} \right)_c. \quad (150)$$

Решение уравнения должно удовлетворять условия периодичности функции распределения $f_{\mathbf{p}, t + \frac{2\pi}{\omega}} = f_{pt}$ и условия нормировки

$$\int f_{pt} d^3\mathbf{p} = n. \quad (151)$$

Плотность тока, как и ранее, определяется интегралом

$$\mathbf{j}(t) = \frac{e}{m^*} \int \mathbf{p} f_{pt} d^3\mathbf{p}. \quad (152)$$

В этих формулах e , m^* , n имеют их обычное значение, ω — частота переменного поля, а интеграл столкновений $\left(\frac{\partial f_{pt}}{\partial t} \right)_c$ зависит от времени.

Ограничимся сейчас рассмотрением квазиупругого рассеяния на акустических фононах при предельно низких или достаточно высоких концентрациях электронов. В первом случае интеграл столкновений — это интеграл столкновений на акустических фононах (2.31). Запишем его в виде

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{p}t}}{\partial t}\right)_a = \frac{D_{\perp}^2}{8\pi^2 \rho s} \int q N_q \{ [e^{\frac{\hbar \omega_q}{T}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \hbar \omega_q) + \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \hbar \omega_q)] f_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q},t} - [e^{\frac{\hbar \omega_q}{T}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \hbar \omega_q) + \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \hbar \omega_q)] f_{\mathbf{p}t} \} d^3 \mathbf{q}. \quad (153)$$

Во втором случае к интегралу (153) добавляется еще интеграл межэлектронных столкновений (56). В этом случае $n \gg n_a^{(e)}$ и релаксация энергии электронного газа определяется межэлектронным обменом. Примем для упрощения задачи (как это часто имеет место), что $n \ll n_a^{(p)}$ и поэтому кулоновской релаксацией импульса (в том числе и на заряженных примесях) можно пренебречь.

Разложим δ -функции (153) в ряд по малому параметру $\hbar \omega_q = \hbar s q$ (до членов второго порядка включительно) и воспользуемся приближением (2.32). Далее выделим в (153) отдельно слагаемые, ответственные за упругие и неупругие столкновения:

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{p}t}}{\partial t}\right)_a = \left(\frac{\partial f_{\mathbf{p}t}}{\partial t}\right)_a^{(0)} + \left(\frac{\partial f_{\mathbf{p}t}}{\partial t}\right)_a^{(1)}, \quad (154)$$

где

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{p}t}}{\partial t}\right)_a^{(0)} = \frac{D_{\perp}^2 T}{4\pi^2 \rho s^2 \hbar} \int \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}) (f_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q},t} - f_{\mathbf{p}t}) d^3 \mathbf{q}, \quad (155)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_{\mathbf{p}t}}{\partial t}\right)_a^{(1)} &= \frac{D_{\perp}^2 T}{8\pi^2 \rho s^2 \hbar} \int (\hbar \omega_q)^2 \left\{ \delta''(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}) (f_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q},t} - f_{\mathbf{p}t}) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{T} \delta'(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}) (f_{\mathbf{p}+\hbar \mathbf{q},t} + f_{\mathbf{p}t}) \right\} d^3 \mathbf{q}. \end{aligned} \quad (156)$$

После этого подставим (154), (155) в кинетическое уравнение (150). Предварительно, однако, целесообразно при высоких частотах переменного поля $\omega t \gg 1$, с которыми мы будем иметь дело (и которые представляют наибольший интерес в нашей задаче), перейти к переменной канонического импульса $\mathcal{P} = \mathbf{p} - \frac{e}{\omega} \mathbf{E}_0 \sin \omega t$, точно учитывающей осцилляцию электрона в сильном переменном поле. При такой замене функция распределения $f_{\mathbf{p}t}$ перейдет в функцию $\Phi_{\mathcal{P}t}$ с тем же периодом, и, как легко проверить, кинетическое уравнение (150) перейдет в аналогичное уравнение относительно функции $\Phi_{\mathcal{P}t}$

$$\frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}t}}{\partial t} + e \mathbf{F} \frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}t}}{\partial \mathcal{P}} = \left(\frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}t}}{\partial t}\right)_c, \quad (157)$$

но с интегралом столкновений $\left(\frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}_t}}{\partial t}\right)_a$, зависящим от высокочастотного поля E_0 . Представим его также двумя слагаемыми:

$$\left(\frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}_t}}{\partial t}\right)_a = \left(\frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}_t}}{\partial t}\right)_a^{(0)} + \left(\frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}_t}}{\partial t}\right)_a^{(1)}, \quad (158)$$

$$\left(\frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}_t}}{\partial t}\right)_a^{(0)} = \frac{D_{\perp}^2 T}{4\pi^2 \rho s^2 \hbar} \int \delta(\epsilon_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathcal{P}}) (\Phi_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q},t} - \Phi_{\mathcal{P}_t}) d^3\mathbf{q}, \quad (159)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \Phi_{\mathcal{P}_t}}{\partial t}\right)_a^{(1)} = & \frac{D_{\perp}^2 T}{8\pi^2 \rho s^2 \hbar} \int \left\{ \left[(\hbar\omega_q)^2 + \left(\frac{e}{m^*\omega}\right)^2 (\hbar\mathbf{q}E_0 \sin \omega t)^2 \right] \times \right. \\ & \times \delta''(\epsilon_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathcal{P}}) (\Phi_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q},t} - \Phi_{\mathcal{P}_t}) - \left[\frac{(\hbar\omega_q)^2}{T} (\Phi_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q},t} + \Phi_{\mathcal{P}_t}) - \right. \\ & \left. \left. - \frac{e}{m^*\omega} (\hbar\mathbf{q}E_0 \sin \omega t) (\Phi_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q},t} - \Phi_{\mathcal{P}_t}) \right] \delta'(\epsilon_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathcal{P}}) \right\} d^3\mathbf{q}. \quad (160) \end{aligned}$$

Они получаются из (155), (156) соответственно после разложения δ -функции в (155) по переменному полю. Предполагается справедливым приближение $p \gg \frac{eE_0}{\omega}$ и, как везде в этой главе, принят параболический закон дисперсии.

Для решения уравнения (157) разложим функцию $\Phi_{\mathcal{P}_t}$ в ряд

$$\Phi_{\mathcal{P}_t} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \Phi_{\mathcal{P},l\omega} e^{il\omega t} \quad (161)$$

и воспользуемся тем обстоятельством, что стационарная часть этой функции $\bar{\Phi}_{\mathcal{P}}$, в силу неравенства $\omega t \gg 1$, велика (см. [127]) по сравнению с остальными гармониками $\Phi_{\mathcal{P},l\omega}$. Поэтому можно пренебречь влиянием гармоник на $\bar{\Phi}_{\mathcal{P}}$, для которой тогда получается уравнение

$$e\mathbf{F} \frac{\partial \bar{\Phi}_{\mathcal{P}}}{\partial \mathcal{P}} = \left(\frac{\partial \bar{\Phi}_{\mathcal{P}}}{\partial t}\right)_a^{(0)} + \left(\frac{\partial \bar{\Phi}_{\mathcal{P}}}{\partial t}\right)_a^{(1)} + \left(\frac{\partial \bar{\Phi}_{\mathcal{P}}}{\partial t}\right)_e. \quad (162)$$

Здесь первое слагаемое в правой части определяется формулой (159) для функции $\bar{\Phi}_{\mathcal{P}}$, а второе — формулой (160) после усреднения ее по периоду колебаний $\frac{2\pi}{\omega}$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \bar{\Phi}_{\mathcal{P}}}{\partial t}\right)_a^{(1)} = & \frac{D_{\perp}^2 T}{8\pi^2 \rho s^2 \hbar} \int \left\{ (\hbar\omega_q)^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{e}{m^*\omega} \frac{\mathbf{q}E_0}{\omega_q}\right)^2 \right] \delta''(\epsilon_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathcal{P}}) \times \right. \\ & \times (\bar{\Phi}_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q}} - \bar{\Phi}_{\mathcal{P}}) - \frac{(\hbar\omega_q)^2}{T} \delta'(\epsilon_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathcal{P}}) (\bar{\Phi}_{\mathcal{P}+\hbar\mathbf{q}} + \bar{\Phi}_{\mathcal{P}}) \left. \right\} d^3\mathbf{q}. \quad (163) \end{aligned}$$

Третье слагаемое в (162) — это межэлектронный интеграл столкновений. Согласно [73], в представлении канонического импульса он не зависит от напряженности переменного поля E_0 .

Уравнение (162) содержит амплитуду переменного электрического поля лишь в интеграле (163) и может решаться стандартными методами теории горячих электронов в постоянном поле. В случае предельно низких концентраций межэлектронные взаимодействия не существенны и (162) отличаются от рассмотренного выше уравнения (3) лишь дополнительным множителем $\left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{e}{m^* \omega} \frac{q E_0}{\omega_q} \right)^2 \right]$, ответственным за изменение температуры электронов в высокочастотном поле [128, 129]. В диффузионном по постоянному электрическому полю приближении (21) для сферически симметричной функции распределения $\bar{\Phi}_\varepsilon$ получаем

$$\bar{\Phi}_\varepsilon = C \left(\frac{\varepsilon}{T^*} + \alpha_F^* \right)^{\alpha_F^*} e^{-\varepsilon/T^*}, \quad (164)$$

где

$$T^* = T \left[1 + \frac{1}{6} \left(\frac{e E_0}{m^* \omega s} \right)^2 \right], \quad \alpha_F^* = \left(\frac{T}{T^*} \right)^2 \alpha_F, \quad (165)$$

C — константа нормировки, а параметр α_F был определен в (44).

Функция (164), как видим, формально совпадает с функцией (50), вычисленной при учете одного только постоянного поля F . Переменное поле изменяет лишь эффективную температуру решетки T и притом тем меньше, чем больше частота. Вообще (см. [130]), формулу (164) можно переписать в более наглядном виде $\bar{\Phi}_\varepsilon = C \exp \left[- \int \frac{d\varepsilon}{T(\varepsilon)} \right]$, в котором функция разогрева $T(\varepsilon)$ аддитивна по квадратам напряженностей постоянного (так как $\alpha_F \sim F^2$) и переменного полей.

При высоких электронных концентрациях межэлектронное взаимодействие навязывает максвелловский вид функции $\bar{\Phi}_\varepsilon = C \exp \left(- \frac{\varepsilon}{T_e} \right)$. Здесь электронная температура, как и ранее, определяется из уравнения баланса мощности. Она имеет вид

$$T_e = \frac{1}{2} T^* \left[1 + \left(1 + \frac{8}{3} \alpha_F^* \right)^{1/2} \right] \quad (166)$$

и тоже квадратично зависит от полей F и E_0 . В предельных случаях $F \rightarrow 0$ или $E \rightarrow 0$ эта температура практически совпадает с (84) или с температурой, полученной в [128] соответственно.

Для плотности тока j , согласно (152), (161) и определению канонического импульса, получаем

$$j - \frac{e^2 n}{m^* \omega} E_0 \sin \omega t = \frac{e}{m^*} \int \mathcal{P} \Phi_{\mathcal{P}} d^3 \mathcal{P} \equiv \sum_{l=-\infty}^{\infty} j_{\omega} e^{i l \omega t}. \quad (167)$$

Отсюда стационарный ток j_0 обычным образом выражается через $\bar{\Phi}_\varepsilon$. Статическая проводимость в пределе низких концентраций является сложной функцией T^* и α_F^* . Она протабулирована в

работе [131]. При высоких концентрациях она отличается от равновесного значения множителем $\left(\frac{T}{T_e}\right)^{1/2}$.

Отклик на частоте ω : $j_\omega = \frac{e}{m^*} \int \mathcal{P} \Phi_{\mathcal{P}_\omega} d^3 \mathcal{P}$ можно выразить через стационарную функцию распределения [127] (из-за неравенства (21) поле F_0 входит лишь в $\Phi_{\mathcal{P}}$). Поправка $\Delta\sigma_\omega$ к высокочастотной проводимости, обусловленная столкновениями, отличается от равновесной при $n > n^{(e)}$ множителем $\left(\frac{T_e}{T}\right)^{1/2}$ и при малых концентрациях электронов весьма сложно зависит от параметров T^* и α_F^{*48} .

При учете малых недиффузионных поправок тензоры проводимости $\hat{\sigma}$ и $\hat{\Delta\sigma}_\omega$ (т. е. фотопроводимость и оптические свойства полупроводника) будут анизотропными. Таким образом, характер разогрева электронного газа в постоянном и высокочастотном электрических полях может быть исследован по сложной зависимости $\hat{\sigma}$ и $\hat{\Delta\sigma}_\omega$ от параметров этих полей.

В случае других механизмов рассеяния задача также сводится к эффективному уравнению в постоянном электрическом поле. Наконец, заметим еще, что полученные выше результаты ограничены требованием «классичности» частоты поля $\hbar\omega \ll \bar{\epsilon}$; если это неравенство нарушается, можно аналогично изложенному рассматривать квантовое кинетическое уравнение.

⁴⁸ Эта зависимость не приводится, так как при низких концентрациях электронов $\Delta\sigma_\omega$ мала и поэтому мало влияет на диэлектрическую проницаемость и оптические свойства полупроводника.

МНОГОДОЛИННЫЕ
ПОЛУПРОВОДНИКИ

§ 1. АНИЗОТРОПИЯ ПРОВОДИМОСТИ

В однородных полупроводниках с кубической структурой решетки проводимость в слабых полях при постоянной температуре должна из совершенно общих соображений оставаться константой, не зависящей ни от величины, ни от направления приложенного поля. В сильном поле, как мы видели в третьей главе, закон Ома нарушается даже при изотропном параболическом законе дисперсии и проводимость начинает зависеть от поля. В многодолинных полупроводниках она может зависеть и от его направления. Так, например, в кремнии пропорциональная проводимости дрейфовая скорость электронов v_d , по данным эксперимента [132], при комнатной температуре и поле 10^4 В/см, направленном по оси 4-го порядка, составляет $v_d \approx 6 \cdot 10^6$ см/с, в то время как при той же температуре и таком же по величине поле, но направленном по оси 3-го порядка, — $v_d \approx 7 \cdot 10^6$ см/с. Выполненный нами теоретический расчет также дает зависимость проводимости и тока как от величины, так и от направления электрического поля. Это иллюстрируется рис. 15, из которого видно, что начиная с полей порядка 1 кВ/см в кремнии становятся заметными отклонения вольт-амперных характеристик от закона Ома и их различия при разных направлениях поля. Качественно аналогичная картина наблюдалась также и в германии [133] (рис. 16).

Рассмотрим в общем виде методами теории групп [134] характер зависимости проводимости от величины и направления электрического поля F . Пусть в кубическом полупроводнике при некотором поле F уже начинается отклонение от закона Ома. Проводимость σ такого полупроводника при фиксированной температуре T будет, следовательно, зависеть от F . Ограничимся пока полями, при которых достаточно в разложении σ по F ограничиться квадратичной зависимостью ⁴⁹

$$\sigma_{\parallel} = \sigma_0 (1 + \beta F^2), \quad (1)$$

где σ_0 — омическая проводимость, определяемая ее значением при $F \rightarrow 0$, а $\beta \equiv \beta(T, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ — не зависящая от величины поля функция, которая кроме температуры решетки в общем случае может

⁴⁹ В однородном кубическом полупроводнике знак направления поля F не может влиять на величину проводимости. Поэтому σ является четной функцией F .

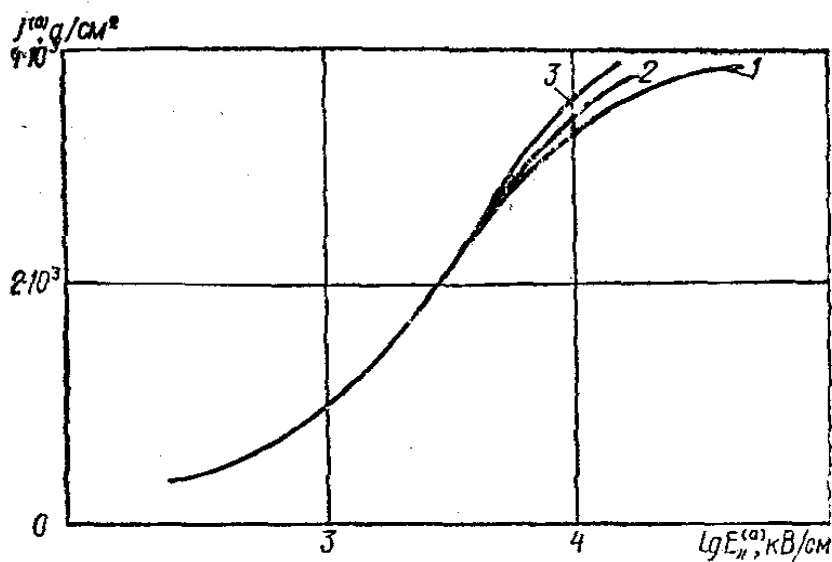


Рис. 15. Вольт-амперная характеристика n — Si; концентрация электронов $n = 3 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $T = 77 \text{ К}$. Угол между направлением поля и осью четвертого порядка: 1 — 0° , 2 — $22,5^\circ$, 3 — 45° .

еще зависит от α_1 , α_2 , α_3 — направляющих косинусов углов между F и главными осями кристалла. Чтобы подчеркнуть, что в формуле (1) речь идет

о проводимости в направлении приложенного поля, у σ введен индекс « $\parallel$ ».

Зависимость продольной проводимости $\sigma_{\parallel}$ и плотности тока $j_{\parallel}$ вида (1) действительно многократно наблюдалась на опыте, и значение β определялось теоретически и экспериментально (см., например, [135—137]). На рис. 17 мы приводим заимствованную из работы [138] кривую зависимости β от концентрации примесей Sb в германии. Кривая иллюстрирует, кстати, также и роль ионизованных примесей в процессе рассеяния электронов в решетке. При $N > 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ коэффициент β положителен. Это означает, что при больших концентрациях примесей изменение проводимости определяется главным образом рассеянием электронов на них. При концентрации $N \cong 1,8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ в опыте работы [138] $\beta = 0$. При такой концентрации⁵⁰ влияние решеточного и примесного механизмов рассеяния компенсируют друг друга и тем самым продлевают область справедливости закона Ома до более сильных полей F . Наконец, при $N < 10^{15} \text{ см}^{-3}$ начинают преобладать решеточные механизмы рассеяния. Коэффициент β становится отрицательным, и проводимость уменьшается с полем.

Чтобы убедиться в анизотропии проводимости в кубическом кристалле и установить зависимость β от α_1 , α_2 , α_3 , разложим i -ю компоненту плотности продольного тока $j_{\parallel}$ в ряд по составляющим напряженности поля F . Ограничившись снова в проводимости квадратичными по полю членами, запишем

$$j_i = \sigma_0 F \left(\alpha_i + F^2 \sum_{j,k,l=1}^3 h_{ijkl} \alpha_j \alpha_k \alpha_l \right), \quad (2)$$

где h_{ijkl} — тензор 4-го ранга, компоненты которого зависят от природы образца и его температуры.

Симметрия кристалла требует, чтобы тензор h_{ijkl} был инвариантен относительно точечной группы преобразований решетки.

⁵⁰ Численное значение N , при котором $\beta = 0$, разумеется, зависит от температуры. Оно уменьшается с T соответственно увеличению эффективности примесного рассеяния (см. § 3 гл. 2) при уменьшении энергии электронов.

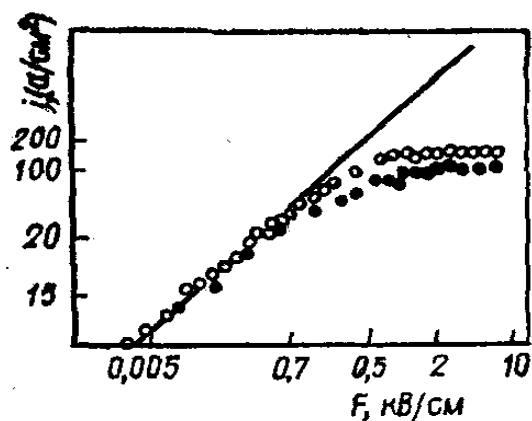


Рис. 16. Вольт-амперная характеристика Ge; $n = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $T = 80 \text{ К}$. Измерения выполнены при направлениях поля: $\circ$ — [100], $\bullet$ — [111].

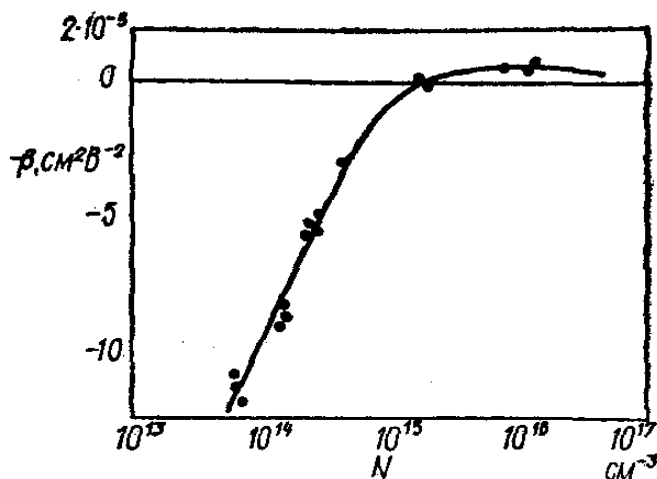


Рис. 17. Зависимость коэффициента β от концентрации заряженных примесей в n — Ge.

Инвариантность относительно преобразований группы T (не смешивать с температурой) кристалла кубической симметрии уменьшает число независимых компонент тензора до следующих семи компонент: h_{1111} , h_{1122} , h_{1212} , h_{1221} , h_{2211} , h_{2121} , h_{2112} . Дополнительное физическое требование (непосредственно вытекающее из (2)) симметрии тензора относительно последних трех индексов приводит к равенствам $h_{1122} = h_{1221} = h_{1212}$ и $h_{2211} = h_{2121} = h_{2112}$, уменьшающим число независимых компонент до трех h_{1111} , h_{1122} и h_{2211} . В кубических кристаллах симметрии O_h (к которым относятся германий и кремний) это число уменьшается до двух⁵¹, поскольку в этих кристаллах $h_{1122} = h_{2211}$. Целесообразно ввести такие обозначения:

$$h_{1111} = \beta_0, \quad h_{1111} - 3h_{1122} = \beta_1, \quad (3)$$

где β_0 и β_1 для заданного полупроводника являются функциями одной лишь температуры.

Подстановка (3) в формулу (2) дает

$$j_i = \sigma_0 \alpha_i F \{ 1 + F^2 [\beta_0 - \beta_1 (1 - \alpha_i^2)] \}. \quad (4)$$

В приближении F^2 функция (4) является самой общей формулой тока в кубических кристаллах O_h , справедливой при произвольной зонной структуре, любых механизмах рассеяния и статистике электронов. Она определяет не только величину тока, но и его зависимость от направления приложенного поля. Ток $j_{||}$ в направлении $\mathbf{F}$ равен:

$$j_{||} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i j_i = \sigma_0 F \left\{ 1 + F^2 \left[\beta_0 - \beta_1 \left(1 - \sum_{i=1}^3 \alpha_i^2 \right) \right] \right\}. \quad (5)$$

⁵¹ Число независимых компонент тензора h_{ijkl} можно по аналогии сопоставить с равным ему числом независимых компонент, рассмотренных во второй главе, тензора модулей упругости.

Отсюда

$$\beta \equiv \beta(T, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \beta_0(T) - \beta_1(T) \left(1 - \sum_{i=1}^3 \alpha_i^4\right). \quad (6)$$

Как видим, продольная плотность тока и коэффициент β анизотропны. В частных случаях, когда поле F направлено: а) по оси 4-го порядка, $\beta_{[100]} = \beta_0$; б) по оси третьего порядка (пространственной диагонали куба), $\beta_{[111]} = \beta_0 - \frac{2}{3} \beta_1$; в) по диагонали грани куба, $\beta_{[110]} = \beta_0 - \frac{1}{2} \beta_1$.

Анизотропия тока $j_{\parallel}$, параллельного приложенному полю, свидетельствует о возникновении тока, перпендикулярного полю F , т. е. о возникновении поперечного тока $j_{\perp}$. В самом общем виде этот ток с точностью до членов порядка F^2 по аналогии с (1) можно записать в виде

$$j_{\perp} = \beta_{\perp}(T, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) j_{\parallel} F^2. \quad (7)$$

Если теперь выразить $j_{\perp}$ как $j_{\perp} = (j^2 - j_{\parallel}^2)^{1/2}$ и воспользоваться выражениями (4) и (5), коэффициент $\beta_{\perp}$ получится таким:

$$\beta_{\perp} = \beta_1(T) \left[\sum_i \alpha_i^6 - \left(\sum_i \alpha_i^4 \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (8)$$

Эта формула также является самым общим выражением поперечного коэффициента $\beta_{\perp}$ в кубических кристаллах O_h . В рассмотренных выше частных случаях, соответствующих направлениям поля F по осям симметрии кубического кристалла, $\beta_{\perp} = 0$.

Поперечный ток тоже наблюдался на опыте. Подробнее об этом будет сказано в следующем параграфе. Здесь же только заметим, что для теоретического определения β_0 и β_1 нужно знать функцию распределения электронов с гораздо большей точностью, чем, скажем, для вычисления продольного тока. Коэффициенты β_0 , β_1 весьма сильно зависят от вида функции распределения [139]. Учет симметрии кристалла значительно облегчает решение кинетического уравнения и нахождение функции распределения. Это особенно относится к многодолинным полупроводникам.

§ 2. ЭФФЕКТ САСАКИ

Впервые анизотропия проводимости в кубических кристаллах была наглядно продемонстрирована и изучена Сасаки и Шибуйя [140] на монокристаллах германия n -типа при 90 К. Позже [141, 142] эти исследования были распространены на германий n - и p -типа и на интервал температур 77—300 К. Исследуемые образцы вырезались из монокристалла так, чтобы приложенное поле находилось в плоскости (110) и было направлено под углом ϑ к кристаллографической оси [001]. При трех разных температурах решетки

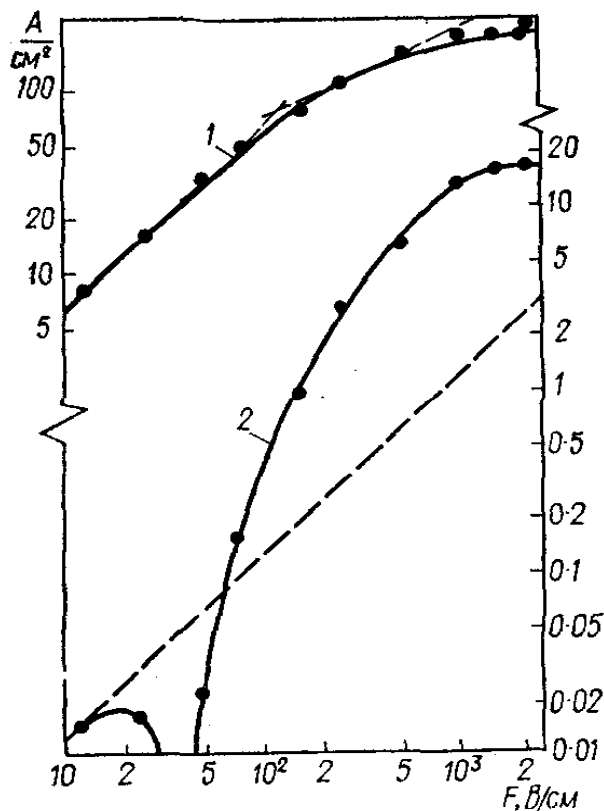


Рис. 18. Зависимость плотности продольного тока (кривая 1) и поперечного напряжения (кривая 2) от приложенного поля в n -Ge; $T = 90$ K.

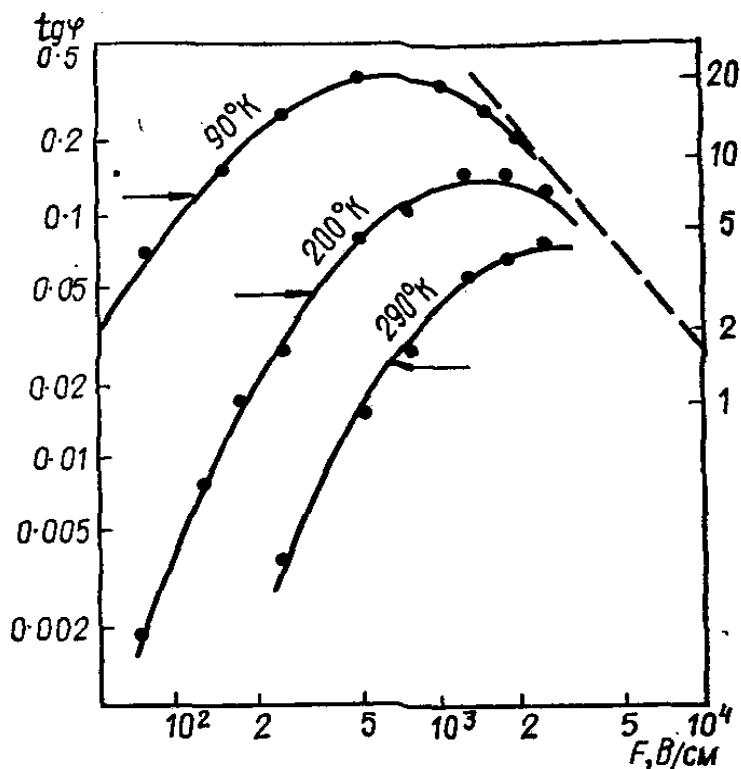


Рис. 19. Зависимость угла φ (между током j и суммарным электрическим полем) от продольного поля в n -Ge при разных температурах.

и разных углах ϑ снимались вольтамперные характеристики. Было обнаружено возникновение поперечного электрического поля — эффект Сасаки. Это непосредственно доказало анизотропию проводимости в кубическом кристалле и явилось прямым следствием рассмотренного в § 1 отклонения линии тока от направления приложенного поля.

Типичная зависимость плотности продольного тока и величины поперечного напряжения от приложенного поля в n -Ge при 90 K и $\vartheta = 30^\circ$ представлены по данным работы [142] на рис. 18. Из рисунка видно, что поперечный вольтаж быстро растет с полем F и достигает максимума. По данным рис. 18 легко вычислить угол φ между током и вектором суммарного поля $\mathcal{F}$. Значения угла φ для того же ϑ и трех разных T в зависимости от продольного поля F представлены на рис. 19. Обращает на себя внимание то обстоятельство, что с понижением температуры уменьшается поле F_d , при котором достигается максимальное значение φ , и само это максимальное значение φ увеличивается.

Направление отклонения вектора тока от приложенного поля в n -Ge всегда такое, что поле образует с осью [111] меньший угол, чем ток. На рис. 20 дана зависимость угла φ от угла ϑ в n -Ge при $T = 90$ K и поле $F_d = 750$ В/см. Угол φ считается положительным при $\vartheta < 50^\circ$.

Шибуйя [143] объяснил эффект анизотропии проводимости, исходя из учета многодолинной энергетической структуры зоны

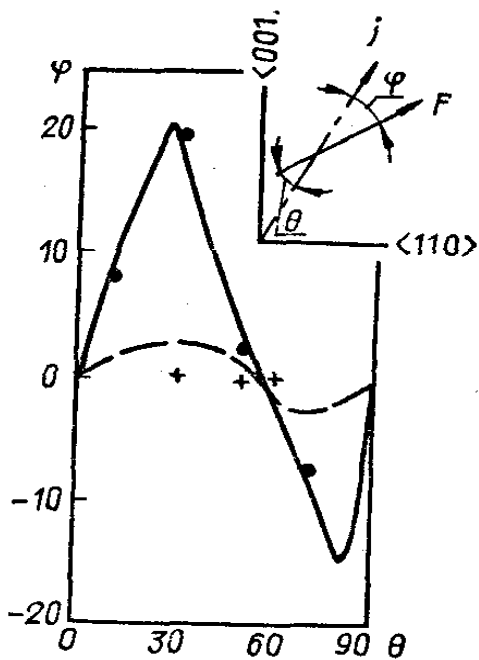


Рис. 20. Зависимость угла φ от угла θ в n — Ge при $T = 90$ К, поле 750 В/см.

проводимости германия и различного разогрева электронов в разных долинах. Это различие вызвано тем, что приложенное поле по-разному ориентировано относительно больших осей эллипсоидов энергии разных долин. Функция распределения в каждой долине определяется своим эффективным полем, действующим на электроны. Кроме того, она еще зависит от распределения в других долинах, поскольку имеют место взаимодействия между электронами разных долин и междолинные переходы электронов. Поэтому в многодолинных полупроводниках нахождение функции распределения в каждой долине в общем случае связано с решением системы кинетических уравнений, число которых равно числу неэквивалентных долин (в смысле их ориентации относительно внешнего поля).

В отличие от общего случая, иногда можно с достаточной точностью решать независимо кинетическое уравнение для каждой долины. Это обусловлено тем, что в определенном диапазоне температур T , полей и концентраций электронов характерные времена междолиненной релаксации энергии и импульса могут заметно превосходить внутримолинные времена. Возможны также ситуации, когда междолинные переходы, хотя и существенны, но в основном происходят между эквивалентными (одинаково ориентированными относительно поля F) долинами (так называемые g -переходы в n — Si), а переходы между неэквивалентными (f -переходы) долинами слабы. Все эти факторы ослабляют взаимосвязь электронов

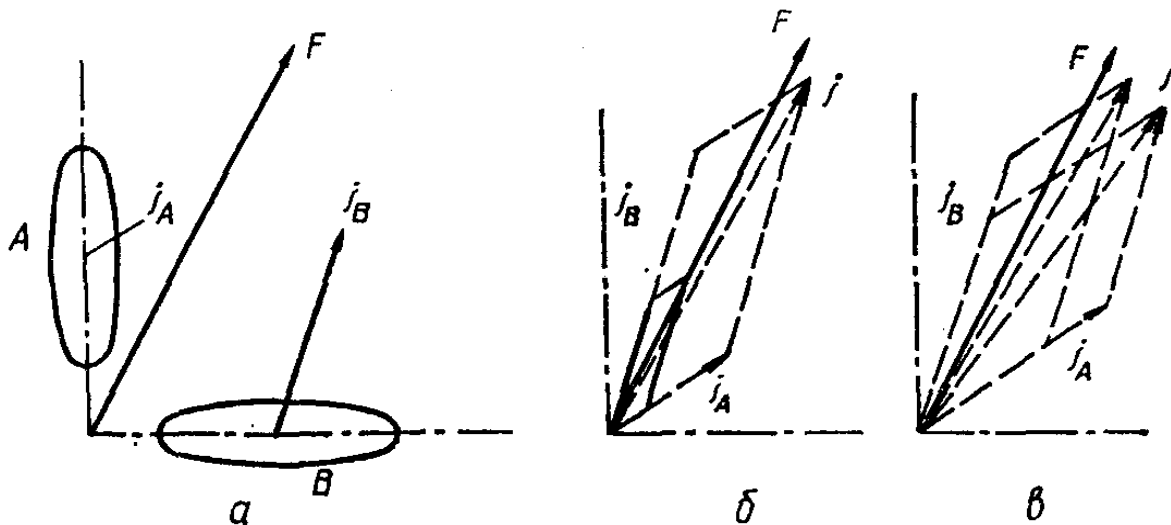


Рис. 21. Схематическое определение отклонения тока от направления приложенного поля (указаны направления частичных токов):

a — поле слабое и j совпадает с направлением F ; $б$ — поле более сильное и j отклоняется от F ; $в$ — еще более сильное поле,

разных долин и, с точностью до отношения внутридолинного времени релаксации к междолинному, позволяют рассматривать неэквивалентные долины отдельно.

При раздельном решении кинетических уравнений в неэквивалентных долинах дальнейшее приближение (когда не нарушаются критерии, рассмотренные в предыдущей главе) состоит во введении электронных температур, разных в разных долинах. Именно в таком приближении (мы еще к нему позже вернемся) выполнено большинство работ по теории горячих электронов в многодолинных полупроводниках. В рамках этого же приближения Шибуйя дал качественное объяснение эффекту Сасаки.

Рассмотрим, следуя работам [142, 143], кристалл, имеющий для простоты всего две долины, изоэнергетические поверхности которых изображены на рис. 21, а. Пусть направление приложенного поля имеет составляющую по оси y , большую, чем по оси x . Оси y' и x выбраны по направлениям осей вращения эллипсоидов A и B . Составляющая поля F_y ускоряет в эллипсоиде B легкие электроны, а в эллипсоиде A — тяжелые. Поэтому при $F_y > F_x$ электроны B в среднем будут получать от поля большую мощность, чем электроны эллипсоида A . В результате электроны в эллипсоидах будут по-разному нагреваться и электронная температура T_B окажется выше T_A .

В слабом электрическом поле, когда температура электронного газа почти не превышает температуру решетки, различие между T_A и T_B мало. Поэтому токи электронов эллипсоидов A и B — j_A и j_B — дадут суммарную плотность тока j , совпадающую с направлением приложенного поля F . Это и характерно для полей, при которых имеет место закон Ома.

С ростом поля растет средняя электронная температура, и вместе с ней возрастает различие между T_A и T_B . Так как увеличение электронной температуры при преобладании решеточных механизмов рассеяния приводит к уменьшению электропроводности, то возрастание $T_B - T_A$ вызовет относительное уменьшение тока j_B по сравнению с j_A . Суммарный ток j поэтому начнет отклоняться от направления F (рис. 21, б — штриховые линии). При еще большем поле различие между температурами T_B и T_A может настолько увеличиться, что появятся в заметном количестве междолинные переходы электронов в основном из эллипсоида B (где $T_B > T_A$) в эллипсоид A . Плотность заполнения электронов в эллипсоиде B станет меньше плотности в эллипсоиде A , а это в свою очередь приведет к дополнительному относительному увеличению j_A . В результате отклонение результирующего тока j от направления F (т.е. угол φ) станет еще больше (рис. 21, в — пунктирные линии).

Нетрудно предсказать, что рост угла φ с полем F в дальнейшем должен прекратиться. Начиная с некоторых сильных полей $F > F_d$, электронная температура во всех долинах окажется настолько высокой, что начнет преобладать обратный переход электронов из эллипсоидов с большей плотностью в эллипсоиды с меньшей

плотностью. Произойдет выравнивание температур и концентраций в разных долинах и, как следствие этого, уменьшение анизотропии тока. Угол φ , как и наблюдалось на опыте (рис. 19), после перехода через свое максимальное значение станет дальше уменьшаться с полем.

Хотя изложенная выше модель качественно правильно объяснила многие характерные особенности анизотропии проводимости кубических кристаллов, количественно она не согласуется с данными опыта. Даже вычисления Шибуйи [143], распространенные на правильную четырехдолинную зонную структуру $n\text{-Ge}$, дали примерно в 8 раз меньшее значение φ , чем полученное экспериментально (штриховая кривая на рис. 20). Мы не станем останавливаться на других многочисленных работах (например, [144—147]), и в том числе на работе самих авторов эффекта [148], сразу же последовавших за его установлением. Все они преследовали цель уточнения и улучшения теории. В известной степени этого удалось добиться, хотя и не полностью. Из рассмотренного эффекта анизотропии мы, не касаясь деталей теории, лишь отметим сейчас, что, во-первых, в многодолинных полупроводниках относительный вклад междолинных взаимодействий в проводимость изменяется с температурой решетки и напряженностью электрического поля и, во-вторых, при анизотропном законе дисперсии само взаимодействие электронов с электронами других долин и вообще с колебаниями решетки анизотропно. Это означает, что оно описывается не скалярными, а тензорными временами релаксации, если их вообще можно ввести.

Теория анизотропного рассеяния для квазиупругих механизмов взаимодействия в многодолинных полупроводниках и обоснование возможности введения соответствующих тензоров времен релаксации развита в работах [63, 64, 149] и подробно изложена в монографии [150]. Неупругое рассеяние в многодолинных полупроводниках также анизотропно, и, как мы видели, его не всегда можно описать временем релаксации даже в однодолинных полупроводниках с изотропным законом дисперсии. Примером этому может служить внутридолинное и междолинное рассеяние на полярных оптических фононах, рассеяние электронов на дырках, друг на друге и т. д. Учет таких механизмов чрезвычайно усложняет решение задачи о явлениях переноса в полупроводниках.

В этой главе мы найдем функцию распределения электронов при анизотропном рассеянии и обсудим вопрос о возможности введения разных электронных температур в долинах, по-разному ориентированных относительно внешнего поля.

Наиболее удобным методом решения кинетического уравнения при учете анизотропного рассеяния является вариационный метод. Выше на примере изотропной зоны было показано, что этот метод с одинаковым успехом можно применять при наличии как упругих, так и неупругих столкновений носителей. Он позволяет также в едином формализме учесть межэлектронные столкновения и, что особенно привлекательно, выразить результаты в аналитическом виде.

В литературе популярно решение задачи, приводящее к выражению функции распределения и всех кинетических коэффициентов через соответствующие тензоры релаксации. Часто такое решение при анизотропных механизмах рассеяния связано с преодолением значительных вычислительных трудностей, требующих либо дальнейших упрощений, либо выполнения численного интегрирования. Вариационный метод, как будет видно, позволяет в значительной мере обойти указанные трудности. В этом методе различные кинетические коэффициенты выражаются через одни и те же матричные элементы оператора столкновений, что значительно сокращает объем вычислений. Наконец, как мы видели, вариационный метод позволяет легко контролировать точность результата путем изменения числа вариационных параметров.

Исходя из сказанного, обобщим здесь развитый выше вариационный метод и дадим его общую формулировку, пригодную для вычисления тензора электропроводности.

Рассмотрим, как и в предыдущей главе, однородный полупроводник, к которому приложено однородное электрическое поле напряженности F . Запишем кинетическое уравнение задачи (2.13). В стационарном случае оно имеет вид

$$eF \frac{\partial f}{\partial p} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a. \quad (9)$$

Не ограничивая общности, представим функцию распределения $f(p)$ так:

$$f(p) = f_0(\epsilon) [1 + \phi(p)], \quad (10)$$

где $f_0(\epsilon)$ — симметричная часть функции распределения, совпадающая в слабых полях (при невырожденном электронном газе) с равновесной максвелловской. В сильном поле $f_0(\epsilon)$, естественно, отличается от равновесной и ее нужно находить из уравнения, аналогичного рассмотренному ранее (но более общего при анизотропной энергии носителей и анизотропной вероятности рассеяния).

Интересуясь прежде всего влиянием межэлектронного взаимодействия на электропроводность и кинетические коэффициенты, примем, что концентрация электронов $n > n_{(\epsilon)}$ и даже $n >$

$> n^{(p)}$. Поэтому будем считать $f_0(\epsilon)$ максвелловской функцией также и в сильном поле, но с электронной температурой T_e , превышающей температуру решетки.

В многодолинных полупроводниках с несколькими низжайшими эквивалентными долинами, как в зонах проводимости германия и кремния, понятие электронной температуры требует некоторого уточнения. Мы уже отметили, что средняя энергия электронов в разных долинах не одинакова. Это означает, что электронная температура не может характеризовать весь электронный газ. Если она имеет физический смысл, то в разных долинах она должна считаться разной. На таком именно различии и основывалось объяснение эффекта Сасаки, рассмотренного в предыдущем параграфе.

Вопрос об обосновании возможности введения нескольких эффективных температур и способе их определения будет еще нами подробно обсужден ниже. Пока же начнем с рассмотрения однодолинного с неизотропным законом дисперсии полупроводника. Полученное решение облегчит затем обобщение его на случай нескольких долин, хотя, нужно сказать, и однодолинное решение не лишено физического интереса и рассматривалось в литературе [151]. На практике однодолинный полупроводник реализуется, например, в германии, если подвергнуть его достаточно сильному сжатию в направлении [111]. Долина, ось вращения которой совпадает с направлением сжатия, при этом понижается и заполняется электронами из трех других долин. Последние оказываются практически пустыми и, следовательно, не принимают участия в явлениях переноса.

Итак, считая что в однодолинном полупроводнике при $n \gg n^{(e)}$ функция $f_0(\epsilon)$ максвелловская с пока еще не определенной температурой T_e , подставим полную функцию распределения (10) в кинетическое уравнение (9). Задачу решаем в диффузионном приближении. Это означает, что

$$|\varphi(\mathbf{p})| \ll 1 \quad (11)$$

и, кроме того, $\varphi(\mathbf{p})$ является нечетной функцией импульса $\mathbf{p}$ (чтобы ток не обращался в нуль). Приравняв затем в уравнении (9) его нечетные части, получим

$$\hat{L}\varphi = e\mathbf{F} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{e}{T_e} \mathbf{v}\mathbf{F}f_0(\epsilon). \quad (12)$$

Здесь $\mathbf{v} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}}$ — скорость электрона, $\hat{L}\varphi$ — линеаризованный по φ интеграл столкновений. Явный вид его будет приведен ниже.

Введем скалярное произведение функций

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi(\mathbf{p}) \psi(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p} \quad (13)$$

и образуем следующий функционал:

$$J[\psi] = (\psi, \hat{L}\psi) + \frac{2e}{T_e} (\psi, \mathbf{v}\mathbf{F}f_0(\epsilon)). \quad (14)$$

Будем считать, что интегральный оператор $\hat{L}$ самосопряженный и знакоопределенный. Эти свойства оператора будут позже проверены для каждого из рассматриваемых механизмов рассеяния.

Вариация функционала (14) при изменении ψ на $\delta\psi$ равна

$$\delta J = (\delta\psi, \hat{L}\psi) + (\psi, \hat{L}\delta\psi) + \frac{2e}{T_e} (\delta\psi, \mathbf{vF}f_0(\epsilon)).$$

В силу самосопряженности $\hat{L}$ имеет место соотношение $(\delta\psi, \hat{L}\psi) = (\psi, \hat{L}\delta\psi)$, откуда

$$\delta J = 2 \left(\delta\psi, \left[\hat{L}\psi + \frac{e}{T_e} \mathbf{vF}f_0(\epsilon) \right] \right). \quad (15)$$

Формула (15) показывает, что вариация функционала $J[\psi]$ обращается в точный нуль ($\delta J = 0$), когда функция ψ является решением уравнения (12). Иными словами, уравнение (12) является уравнением Эйлера для функционала (14).

Согласно (12) и (14) экстремальное значение функционала (14) $J_{\text{ex}}[\psi]$ запишется в виде

$$J_{\text{ex}}[\psi] = J[\varphi] = \frac{e}{T_e} (\varphi, \mathbf{vF}f_0(\epsilon)) = \frac{e}{T_e} \mathbf{F} \int \mathbf{v}f_0(\epsilon) \varphi(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p} = \frac{1}{T_e} \mathbf{Fj}. \quad (16)$$

Таким образом, оказывается, что экстремальное значение функционала (14) равно плотности джоулевой мощности, разделенной на электронную температуру T_e . Поэтому в однодолинном кристалле с произвольной анизотропией рассеяния и произвольной анизотропией энергии электронов можно выразить экстремальное значение функционала (14) через тензор электропроводности $\sigma_{ik}(T, T_e)$:

$$J_{\text{ex}} = \frac{1}{T_e} \sum_{i,k=1}^3 \sigma_{ik}(T, T_e) F_i F_k. \quad (17)$$

Для отыскания значения J_{ex} представим пробную функцию в несколько более общем, чем (3.130), виде

$$\varphi(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^3 \varphi_j(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{(j)} p_j \epsilon^k \quad (18)$$

и подставим ее в функционал (14):

$$J[\varphi] = \sum_{j,j'=1}^3 \sum_{k,k'=0}^{\infty} c_k^{(j)} c_{k'}^{(j')} L_{kk'}^{jj'} + 2 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{(j)} b_k^{(j)}, \quad (19)$$

где

$$L_{kk'}^{jj'} = (p_j \epsilon^k, \hat{L} p_{j'} \epsilon^{k'}), \quad b_k^{(j)} = \frac{e}{T_e} (p_j \epsilon^k, \mathbf{vF}f_0(\epsilon)). \quad (20)$$

Из условия экстремальности функционала (19) $\frac{\partial J}{\partial c_k^{(j)}} = 0$ получается следующая система алгебраических уравнений для

определения вариационных параметров $c_k^{(j)}$:

$$\sum_{j'=1}^3 \sum_{k'=0}^{\infty} L_{kk'}^{jj'} c_{k'}^{(j')} + b_k^{(j)} = 0. \quad (21)$$

В этой системе величины $b_k^{(j)}$ согласно (20) линейно зависят от компонент поля F . Поэтому и искомые параметры $c_k^{(j)}$ тоже должны линейно от них зависеть⁵². Отсюда следует, что функционал $J[\varphi]$ (19) квадратично зависит от компонент поля $F_i F_k$, как и экстремальное значение функционала $J[\psi]$. Приравняв (17) и (19) с параметрами $c_n^{(j)}$, определенными из системы (21), мы в принципе можем определить компоненты тензора электропроводности $\sigma_{ik}(T_e)$.

Ниже будет показано, что матричные элементы $L_{kk'}^{jj'}$ всех рассматриваемых механизмов рассеяния (в системе координат пространства $\mathbf{p}$, совпадающей с главными осями эллипсоида энергии) оказываются диагональными по индексам j и j' . Поэтому из (21) следует

$$c_k^{(j)} = - \sum_{k'=0}^{\infty} (L_{kk'}^{jj})^{-1} b_{k'}^{(j)}. \quad (22)$$

Здесь $(L_{kk'}^{jj})^{-1}$ — элементы обратной матрицы, равные отношению алгебраического дополнения элемента $L_{kk'}^{jj}$ исходной матрицы к ее определителю.

Согласно (16) экстремальное значение функционала J_{ex} при функции $\varphi(\mathbf{p})$, заданной в виде (18), определяется выражением

$$J_{\text{ex}} = \sum_j \sum_k c_k^{(j)} b_k^{(j)}. \quad (23)$$

Подставив сюда $c_k^{(j)}$ из (22), получим

$$J_{\text{ex}} = - \sum_{j=1}^3 \sum_{k,k'=0}^{\infty} (L_{kk'}^{jj})^{-1} b_k^{(j)} b_{k'}^{(j)}. \quad (24)$$

Коэффициенты $b_k^{(j)}$, согласно определению (20), при максвелловской функции $f_0(\epsilon)$ легко вычислить. Они равны:

$$b_k^{(j)} = \frac{(2k+3)!!}{3 \cdot 2^k} en T_e^k F_j \equiv b_k^* F_j. \quad (25)$$

Подставив затем эти выражения в (24) и сравнив полученное с (17), найдем

$$\sigma_{jj} = - T_e \sum_{kk'} b_k^* (L_{kk'}^{jj})^{-1} b_{k'}^*. \quad (26)$$

⁵² Кроме явной зависимости коэффициентов $b_k^{(j)}$ от компонент поля F_i они еще неявно зависят от абсолютного значения F через электронную температуру. Эта зависимость, однако, не отражается на описанном выше способе определения тензора электропроводности σ_{ik} .

Формула (26), в принципе, завершает решение задачи об определении тензора электропроводности. Дальнейшие вычисления сводятся уже к непосредственному определению матричных элементов $L_{kk'}^{jj}$ для конкретных механизмов рассеяния. Этим мы займемся в следующем параграфе. Как и в предыдущей главе, окажется достаточным ограничиться матричными элементами со значениями $k, k' = 0$ и 1. Компоненты тензора σ_{jj} при этом получаются с погрешностью всего в несколько процентов как при упругих, так и при неупругих рассеяниях электронов. Еще большее увеличение значений индексов k , т. е. увеличение числа вариационных параметров, мало изменяет точность определения, поскольку ряд (26) практически всегда быстро сходится.

§ 4. ПРИМЕСНОЕ РАССЕЯНИЕ

Начнем определение электропроводности полупроводника по формуле (26) со случая, когда доминирующим механизмом рассеяния электронов является рассеяние на однократно ионизированных донорных примесях концентрации N_I . Примем, что потенциальная энергия $V(\mathbf{r})$ взаимодействия электрона с примесным центром описывается экранированным кулоновским потенциалом

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\kappa_0} \cdot \frac{e^{-r/\rho_D}}{r}, \quad (27)$$

где r — координата электрона, отсчитанная от месторасположения центра, а κ_0 и ρ_D , как и ранее, статическая диэлектрическая проницаемость и дебаевский радиус экранирования соответственно. Стоит напомнить, что выбор потенциальной энергии в виде (27) эквивалентен обрезанию интеграла Ландау (2.61) на значении дебаевского радиуса ρ_D , как было сделано во второй главе. Однако, в отличие от процедуры, изложенной во второй главе, здесь, учитывая, что при низких температурах решетки вклад в рассеяние могут вносить и близкие соударения, мы не прибегнем к разложению кулоновского интеграла по изменению импульса электрона при его рассеянии на ионе. Учтем также, что при неизотропном законе дисперсии энергии рассеяние электронов на примесях становится анизотропным, несмотря на то что потенциал взаимодействия (27) изотропен. В частности, в однодолинном германии, изоэнергетическая поверхность которого является эллипсоидом вращения (1.127)

$$\varepsilon = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_{\perp}} + \frac{p_z^2}{2m_{\parallel}} \quad (28)$$

с отношением эффективных масс $\frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \cong 20$, анизотропия рассеяния будет весьма значительной.

Определив в борновском приближении вероятность рассеяния электронов на потенциале (27), запишем интеграл столкновений. Он может быть представлен в виде (см. (2.56))

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_I = \frac{4e^4 N_I}{\kappa_0^2} \int w(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \delta(\varepsilon' - \varepsilon) [f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})] d^3 \mathbf{p}', \quad (29)$$

где

$$w(|\mathbf{p}|) = \frac{1}{\left[p^2 + \left(\frac{\hbar}{\rho_D}\right)^2\right]^2}. \quad (30)$$

Последующая подстановка функции распределения (10) в интеграл столкновений (29) дает

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_I &= \frac{4e^4 N_I}{\kappa_0^2} \int w(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) f_0(\varepsilon) [\varphi(\mathbf{p}') - \varphi(\mathbf{p})] \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3 \mathbf{p}' \equiv \\ &\equiv L_I \varphi. \end{aligned} \quad (31)$$

Умножим (31) на произвольную функцию $\psi(\mathbf{p})$ и образуем скалярное произведение $(\psi, L_I \varphi)$, выразив его в симметричном по координатам интегрирования $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ виде

$$\begin{aligned} (\psi, L_I \varphi) &= -\frac{2e^4 N_I}{\kappa_0^2} \iint w(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) f_0(\varepsilon) [\varphi(\mathbf{p}') - \varphi(\mathbf{p})] \times \\ &\times [\psi(\mathbf{p}') - \psi(\mathbf{p})] \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{p}'. \end{aligned} \quad (32)$$

В таком виде самосопряженность и знакопостоянство оператора L_I становятся очевидными.

Приступим к вычислению матричных элементов оператора L_I (31). В соответствии с определением (20) и (32), матричный элемент $L_{kk'}^{jj'}$ имеет вид

$$\begin{aligned} L_{kk'}^{jj'} &= -\frac{2e^4 N_I}{\kappa_0^2} \iint w(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) f_0(\varepsilon) \varepsilon^{k+k'} (p_j' - p_j) (p_{j'}' - p_{j'}) \times \\ &\times \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{p}'. \end{aligned} \quad (33)$$

Перейдем теперь от переменных $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ к переменным $\mathbf{p}$ и $\mathbf{g} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$. Кроме того, введем «деформированные» координаты, предложенные в работе [63]:

$$p_j^* = p_j \left(\frac{m}{m_j}\right)^{1/2}, \quad g_j^* = g_j \left(\frac{m}{m_j}\right)^{1/2} \quad (34)$$

(m — масса свободного электрона). Функция $f_0(\varepsilon)$ в этих переменных с учетом нормировки имеет вид

$$f_0(\varepsilon) = \frac{n}{(2\pi T_e)^{3/2} m_{\perp} m_{\parallel}^{1/2}} e^{-p^2/2mT_e}, \quad (35)$$

а интеграл (33) сведется к следующему:

$$L_{kk'}^{jj'} = - \frac{2e^4 n N_I}{\kappa_0^2 (2\pi T_e)^{3/2}} \frac{m_{\perp} m_{\parallel}^{1/2}}{m^3} \left(\frac{m_j m_{j'}}{m^2} \right)^{1/2} \frac{1}{(2m)^{k+k'}} \times \\ \times \int \frac{g_j^* g_{j'}^* G^{(k+k')}(g^*) d^3 g^*}{\left\{ \frac{m_{\perp}}{m} g_{\perp}^{*2} + \frac{m_{\parallel}}{m} g_{\parallel}^{*2} + \left(\frac{\hbar}{\rho_D} \right)^2 \right\}^2}, \quad (36)$$

где ⁵³

$$G^{(k)}(g^*) = \int p^{*2k} \exp \left[- \frac{p^{*2}}{2mT_e} \right] \delta \left(\frac{1}{2} g^{*2} + \mathbf{g}^* \mathbf{p}^* \right) d^3 \mathbf{p}^* = \\ = \frac{\pi m}{g^*} (2mT_e)^{k+1} k! \sum_{l=0}^k \frac{1}{l!} \left(\frac{g^{*2}}{8mT_e} \right)^l e^{-g^{*2}/8mT_e}, \quad (37)$$

$G^{(k)}(g^*)$ согласно (37) является функцией только модуля g^* . Знаменатель в подынтегральном выражении (36) положителен и является четной функцией угла ϑ между вектором g^* и осью вращения эллипсоида (28). Поэтому сразу можно заключить, что $L_{kk'}^{jj'}$ (37) точно обращается в нуль, если $j \neq j'$. Это, как мы помним, и предполагалось при выводе (22).

Знаменатель в интеграле (36) целесообразно представить так:

$$\left\{ \frac{m_{\perp}}{m} g_{\perp}^{*2} + \frac{m_{\parallel}}{m} g_{\parallel}^{*2} + \left(\frac{\hbar}{\rho_D} \right)^2 \right\} = (8m_{\parallel} T_e)^2 \theta^2 \left(u + \frac{a^2}{\theta} \right)^2. \quad (38)$$

Здесь

$$\theta \equiv \theta(\cos \vartheta) = \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} + \frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{m_{\parallel}} \cos^2 \vartheta, \quad (39)$$

$$u = \frac{g^{*2}}{8mT_e}, \quad a^2 = \frac{\hbar^2}{8m_{\parallel} T_e \rho_D^2} = \frac{\pi n e^2 \hbar^2}{2\kappa_0 m_{\parallel} T_e^2}. \quad (40)$$

Матричный элемент $L_{kk'}^{jj'}$ после подстановки (37), (38) в (36) равен:

$$L_{kk'}^{jj'} = - \frac{n e^4 N_I}{\kappa_0^2} \left(\frac{2\pi m_{\parallel}}{T_e} \right)^{1/2} T_e^{k+k'} \Gamma_{jj}^{(k+k')} (a^2) \delta_{jj'}, \quad (41)$$

⁵³ Зависимость от угла между векторами g^* и p^* в подынтегральном выражении (37) содержится только в аргументе δ -функции. Интегрирование по этому углу может дать отличный от нуля результат только тогда, когда $p \geq \frac{1}{2} g^*$. Это значение и определяет нижнюю границу интегрирования (37) по p .

где

$$\Gamma_{xx}^{(k)} = \Gamma_{yy}^{(k)} = \Gamma_{\perp}^{(k)}(a^2) = \left(\frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}}\right)^2 \int_0^1 dx \frac{1-x^2}{\theta^2(x)} \int_0^{\infty} \frac{ue^{-u} k! \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{u^l}{l!}\right)}{\left[u + \frac{a^2}{\theta(x)}\right]^2} du, \quad (42)$$

$$\Gamma_{zz}^{(k)} \equiv \Gamma_{\parallel}^{(k)}(a^2) = 2 \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \int_0^1 \frac{x^2}{\theta^2(x)} dx \int_0^{\infty} \frac{ue^{-u}}{\left[u + \frac{a^2}{\theta(x)}\right]^2} k! \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u^l}{l!} du. \quad (43)$$

Во всех приведенных сейчас интегралах a^2 является малым параметром (например, для n — Ge с концентрацией $n = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и $T = 30 \text{ К}$, $a^2 \leq 10^{-3}$, а при такой же концентрации и температуре в кремнии $a^2 \leq 10^{-2}$). Эту малость используем для вычисления интегралов (42), (43). Проиллюстрируем метод вычисления на примере $\Gamma_{jj}^{(0)}(a^2)$. Более сложные интегралы с $k > 0$, как легко можно увидеть, вычисляются аналогично.

Преобразуем внутренний интеграл (42), (43) следующим образом:

$$\int_0^{\infty} \frac{ue^{-u} du}{\left[u + \frac{a^2}{\theta(x)}\right]^2} = -1 + \left(1 + \frac{a^2}{\theta(x)}\right) \exp\left(-\frac{a^2}{\theta(x)}\right) \int_{a^2/\theta(x)}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt \quad (44)$$

и подставим его при $k = 0$ в (42), (43). Если затем разложить экспоненциальную функцию в ряд по степеням $\frac{a^2}{\theta(x)}$ и воспользоваться известным разложением [86]

$$\int_s^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt = -\ln s C_1 - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-s)^k}{k \cdot k!}, \quad (45)$$

$\ln C_1 \equiv C$, где $C = 0,5772$ (постоянная Эйлера), то $\Gamma_{\perp}^{(0)}$ и $\Gamma_{\parallel}^{(0)}$ представятся в виде ряда по степеням $\frac{a^2}{\theta(x)}$. Коэффициенты при степенях a^2 этого ряда являются табличными интегралами и вычисляются в элементарных функциях. Некоторое затруднение может вызвать лишь вычисление интеграла с логарифмом $\theta(x)$ типа

$$\int \frac{x^2 dx}{\theta^2(x)} \ln [C_1 \theta(x)].$$

Поэтому сейчас остановимся на вычислении этого интеграла. Подставим в него $\theta(\cos \vartheta) \equiv \theta(x)$ согласно (39) и введем для со-

вращения записи параметр α^2 :

$$\alpha^2 = \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel} - m_{\perp}}. \quad (46)$$

Искомый интеграл (после интегрирования по частям) получится таким:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \frac{x^2}{\theta^2(x)} \ln [C_1 \theta(x)] dx &= \left(\frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \right)^2 \alpha^4 \left\{ \left[-\frac{1}{1+\alpha^2} + \frac{1}{\alpha} \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{\alpha} \right) \right] \times \right. \\ &\times [\ln (C_1 a^2) - 1] + \frac{1}{\alpha} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{\alpha^2 + x^2} \operatorname{arctg} \left(\frac{x}{\alpha} \right) \Bigg\}. \end{aligned} \quad (47)$$

Последний интеграл в фигурных скобках (47) не берется в элементарных функциях, но подстановкой $y = \operatorname{arctg} \frac{x}{\alpha}$ его можно свести к табулированной функции

$$\int_{-1}^1 \frac{x dx}{\alpha^2 + x^2} \operatorname{arctg} \left(\frac{x}{\alpha} \right) = \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{\alpha} \right) \ln \left(\frac{\alpha^2}{1+\alpha^2} \right) + 2L \left(\operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} \right),$$

где $L \left(\operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} \right)$ — функция Лобачевского (см. [86]):

$$L \left(\operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} \right) \equiv - \int_0^{\operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha}} \ln (\cos y) dy.$$

Не останавливаясь больше на технике вычислений, приведем окончательные выражения матричных элементов $\Gamma_{jj}^{(k)}(a^2)$, определенных с точностью до a^2 включительно и при k, k' равных 0 и 1. Выше указывалось (и будет видно из дальнейшего), что достаточно ограничиться именно такими значениями k и k' . Следовательно,

$$\Gamma_{jj}^{(0)}(a^2) = -A_j(\alpha) \ln (C_1 a^2) + B_j(\alpha) - a^2 [D_j(\alpha) \ln (C_1 a^2) - \mathcal{E}_j(\alpha)], \quad (48)$$

$$\Gamma_{jj}^{(1)}(a^2) = -A_j(\alpha) \ln (C_1 a^2) + B_j(\alpha) + a^2 D_j(\alpha),$$

$$\Gamma_{jj}^{(2)}(a^2) = 2[B_j(\alpha) - A_j(\alpha) \ln (C_1 a^2)] + 3A_j(\alpha) + a^2 D_j(\alpha).$$

Величины $A_j(\alpha)$, $B_j(\alpha)$, $D_j(\alpha)$, $\mathcal{E}_j(\alpha)$ являются для данного материала просто числами. Приведем их общее выражение в зависимости от α и укажем в скобках их численные значения для $n - \text{Ge}$ и $n - \text{Si}$ соответственно:

$$A_{\perp}(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha \left[\alpha + (1 - \alpha^2) \operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} \right] \\ (0,175; 0,343),$$

$$\begin{aligned}
B_{\perp}(\alpha) &= \alpha \left[-\operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} + \frac{1-\alpha^2}{2} R(\alpha) \right] \\
&\quad (-0,636; -0,793), \\
D_{\perp}(\alpha) &= \frac{1}{2} \alpha \left\{ \alpha + \frac{3-\alpha^2}{2\alpha^2} \left[\alpha + (1+\alpha^2) \operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} \right] \right\} \\
&\quad (5,25; 2,63), \\
\mathcal{E}_{\perp}(\alpha) &= 1 + \frac{1+\alpha^2}{2\alpha} \left[-\operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} + \frac{3-\alpha^2}{2} R(\alpha) \right] \\
&\quad (-11,9; -2,63), \quad (49) \\
A_{\parallel}(\alpha) &= \alpha \left[-\alpha + (1+\alpha^2) \operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} \right] \\
&\quad (0,275; 0,451), \\
B_{\parallel}(\alpha) &= \alpha (1+\alpha^2) R(\alpha) \quad (-0,721; -0,784); \\
D_{\parallel}(\alpha) &= \alpha \left\{ -\alpha + \frac{1+\alpha^2}{2\alpha} \left[\alpha + (1+\alpha^2) \operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} \right] \right\} \\
&\quad (3,68; 2,06), \\
\mathcal{E}_{\parallel}(\alpha) &= 1 + \frac{(1+\alpha^2)^2}{2\alpha} R(\alpha) \quad (-6,03; -8,38).
\end{aligned}$$

Здесь введено обозначение

$$R(\alpha) = -\left(1 + \frac{1}{\alpha^2}\right) \operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha} + 2L\left(\operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha}\right). \quad (50)$$

Проанализируем с помощью полученных формул анизотропное примесное рассеяние в полупроводнике с эллипсоидальной изоэнергетической поверхностью. Компоненты тензора проводимости σ_{jj} и подвижности $\mu_{jj} = \frac{\sigma_{jj}}{en}$ в главных осях эллипсоида (28) при ограничении в сумме (26) значениями $k, k' = 0$ и 1 равны:

$$\sigma_{jj} = en\mu_{jj} = -T_e \frac{(b_0^*)^2}{L_{00}^{jj}} \left\{ 1 + \frac{\left(L_{01}^{jj} - \frac{b_1^*}{b_0^*} L_{00}^{jj}\right)^2}{L_{00}^{jj} L_{11}^{jj} - (L_{01}^{jj})^2} \right\}. \quad (51)$$

Мы уже выразили здесь компоненты обратной матрицы $(L_{hk}^{jj})^{-1}$ через прямую матрицу (41).

Компоненты тензора электропроводности (51), ввиду сложности выражений (42) — (50), имеют достаточно громоздкий вид. Они значительно упрощаются в так называемом логарифмическом приближении (приближении далеких соударений), в котором получена, например, формула Конвелл — Вайскопфа [66]. В нашем рассмотрении это приближение соответствует удержанию в (48) лишь первых членов (т. е. $\alpha^2 \rightarrow 0$).

Выпишем компоненты тензора подвижности при примесном рассеянии в приближении $a^2 \rightarrow 0$. Они получаются после подстановки в (51) первых слагаемых из формул (48) и значений b_k^* , определенных формулой (25). В этом приближении подвижность выражается так:

$$\mu_{xx} = \mu_{yy} \equiv \mu_{\perp} = -\frac{13}{4} \cdot \frac{\kappa_0^2 T_e^{3/2}}{e^3 N_I (2\pi m_{\parallel})^{1/2}} \frac{1}{A_{\perp}(\alpha) \ln(C_1 a^2)}, \quad (52)$$

$$\mu_{zz} \equiv \mu_{\parallel} = -\frac{13}{4} \cdot \frac{\kappa_0^2 T_e^{3/2}}{e^3 N_I (2\pi m_{\parallel})^{1/2}} \frac{1}{A_{\parallel}(\alpha) \ln(C_1 a^2)}. \quad (53)$$

Нужно все же иметь в виду, что столь простые формулы не всегда удовлетворительны. Ими следует пользоваться, как уже отмечалось, только тогда, когда последующие члены разложения по параметру a^2 вносят незначительный вклад в $\Gamma_{jj}^{(h)}(a^2)$ по сравнению с первым. Однако в довольно широком диапазоне температур и концентраций примесных ионов необходимо пользоваться более полным выражением (48). Это, разумеется, усложняет вычисления, но при использовании (49) не связано с какими-либо принципиальными затруднениями.

При изотропном законе дисперсии $m_{\parallel} \rightarrow m_{\perp} = m^*$ ($\alpha \rightarrow \infty$) формулы (52), (53) упрощаются и становятся одинаковыми. Так как при $\alpha \rightarrow \infty$ коэффициенты $A_{\perp}(\alpha)$ и $A_{\parallel}(\alpha)$ согласно (49) равны друг другу: $A_{\perp}(\infty) = A_{\parallel}(\infty) = \frac{2}{3}$, то тензор подвижности вырождается в скаляр. Запишем его значение согласно (52), (53) при $\alpha \rightarrow \infty$:

$$\mu_{\parallel} = \mu_{\perp} = \mu = -\frac{39\pi}{128} \frac{8}{\pi} \left(\frac{2}{m^* \pi} \right)^{1/2} \frac{\kappa_0^2 T_e^{3/2}}{e^3 N_I \ln(C_1 a^2)}. \quad (54)$$

Записанная в таком виде подвижность (множитель $\frac{39\pi}{128} \approx 1$) совпадает с формулой Конвелл — Вайскопфа [66]. Совпадение, кстати, говорит о точности предложенного здесь вариационного метода. Его точность подтверждается еще и более детальной формулой Брукса — Херринга [67], если при $m_{\parallel} = m_{\perp}$ сохранить в подвижности (51) все, приведенные в (48), слагаемые компонент $\Gamma_{jj}^{(h)}(a^2)$ ⁵⁴. Не лишне, впрочем, заметить, что при $m_{\parallel} \neq m_{\perp}$ подвижность согласно (52), (53) является тензорной величиной и поэтому формулы работ [66, 67] не адекватны ей, даже если заменить в них массу

⁵⁴ Формула (54) отличается от формулы Конвелл — Вайскопфа несущественным множителем в логарифмическом члене. Различие связано с тем, что в [66] кулоновский потенциал обрезался на среднем расстоянии между примесными ионами, в то время как в (27) он (что более строго) обрезался на радиусе экранирования. Укажем еще, что полного совпадения (51) с аналогичным выражением работы [67] тоже не следует ожидать, поскольку там логарифмическая функция выносилась из-под знака интеграла.

носителя на некоторую приведенную эффективную массу. Для германия, к примеру, отношение компонент подвижности при примесном рассеянии составляет по (52), (53) и (49) $\frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} > 1,5$.

§ 5. МЕЖЭЛЕКТРОННОЕ РАССЕЯНИЕ

Влияние межэлектронного взаимодействия на функцию распределения носителей и кинетические эффекты в полупроводниках с неизотропным законом дисперсии энергии в литературе неоднократно рассматривалось (например, [139, 152]). Было показано, что функции распределения горячих электронов в n — Ge, вычисленные с учетом и без учета межэлектронного взаимодействия, существенно различны. Учет этого взаимодействия давал правильное определение полевой зависимости электропроводности и других кинетических характеристик. В предыдущей главе мы тоже видели, насколько влияет взаимодействие носителей друг с другом не только на сферически симметричную часть, но и на асимметричную часть функции распределения, как заметно оно влияет на электропроводность, особенно при низких температурах решетки, когда преобладающим механизмом рассеяния является рассеяние на ионизированных примесях. Однако выполненные там вычисления давали количественную характеристику влияния межэлектронного взаимодействия только в полупроводниках с изотропным законом дисперсии. Представляется поэтому интересным и важным обобщить вычисления на анизотропный закон энергии.

Разумеется, учет анизотропии носителей в их взаимодействии друг с другом значительно усложняет и кинетическое уравнение, и его решение. Анизотропия энергии, хотя и сохраняет суммарный импульс сталкивающихся частиц, но не сохраняет скорости. Суммарное значение компонент скорости в том или ином направлении после столкновения может измениться, что само по себе затрудняет запись интеграла столкновений и методику решения задачи, принятую в третьей главе.

Симметричное расположение долин в n — Ge и n — Si в значительной степени сглаживает эффект анизотропии межэлектронного рассеяния. Чтобы изучить в наиболее ясных условиях вклад этого рассеяния в величину проводимости, будем считать, как в предыдущем параграфе, что электроны сосредоточены только в одной эллипсоидальной долине или в двух долинах, оси вращения которых параллельны. Такая модель, кроме одноосно деформированных n — Ge, n — Si, PbTe, реализуется в одноосных кристаллах типа Te.

Рассеяние электронов друг на друге описывается потенциальной энергией (27), в которой статическая диэлектрическая проницаемость заменена высокочастотной (в кристаллах Ge, Si они практически одинаковы) и, кроме того, изменен знак (энергия положительна).

Интеграл межэлектронных столкновений по аналогии с (29), (30), а также (2.56) — (2.58) имеет следующий вид:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e = \frac{4e^4}{\kappa_\infty^2} \int w(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}' + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \varepsilon'_1 - \varepsilon_1) \times \\ \times [f(\mathbf{p}') f(\mathbf{p}'_1) - f(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}_1)] d^3\mathbf{p}' d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}'_1. \quad (55)$$

Подставим сюда функцию распределения $f(\mathbf{p})$ в виде (10) и линеаризуем интеграл (55) по функции $\varphi(\mathbf{p})$:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e \cong \frac{4e^4}{\kappa_\infty^2} \iiint w(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}'_1) \times \\ \times \delta(\varepsilon' + \varepsilon'_1 - \varepsilon - \varepsilon_1) f_0(\varepsilon) f_0(\varepsilon_1) \{\varphi\} d^3\mathbf{p}' d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}'_1 \equiv L_e \varphi(\mathbf{p}). \quad (56)$$

Для краткости мы здесь обозначили

$$\{\varphi\} \equiv \varphi(\mathbf{p}') + \varphi(\mathbf{p}'_1) - \varphi(\mathbf{p}) - \varphi(\mathbf{p}_1). \quad (57)$$

Умножим (56) на произвольную функцию $\psi(\mathbf{p})$ и проинтегрируем по пространству вектора $\mathbf{p}$. Переобозначив переменные интегрирования $\mathbf{p} \rightleftharpoons \mathbf{p}'$ и $\mathbf{p}_1 \rightleftharpoons \mathbf{p}'_1$, нетрудно убедиться, что $(\psi, L_e \varphi) = -\frac{1}{4} (\{\psi\}, L_e \varphi)$, т. е.

$$(\psi, L_e \varphi) = -\frac{e^4}{\kappa_\infty^2} \iiint w(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}'_1) \times \\ \times \delta(\varepsilon' + \varepsilon'_1 - \varepsilon - \varepsilon_1) f_0(\varepsilon) f_0(\varepsilon_1) \{\psi\} \{\varphi\} d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{p}' d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}'_1 = \\ = (\varphi, L_e \psi). \quad (58)$$

Отсюда видно, что оператор L_e тоже самосопряженный и знак-постоянный. Из (58), в частности, следует

$$(p_j, L_e \varphi) = 0, \quad (59)$$

что отражает закон сохранения импульса при столкновениях электронов.

Воспользовавшись δ -функцией, проинтегрируем (58) по пространству $\mathbf{p}_1$, а затем сделаем такую замену переменных:

$$\mathbf{p} = \mathbf{q} + \frac{1}{2} \mathbf{g}, \quad \mathbf{p}' = \mathbf{q}' + \frac{1}{2} \mathbf{g}, \quad \mathbf{p}_1 = -\mathbf{q} + \frac{1}{2} \mathbf{g}. \quad (60)$$

В итоге скалярное произведение $(\psi, L_e \varphi)$ получится в виде:

$$(\psi, L_e \varphi) = -\frac{e^4}{\kappa_\infty^2} \iiint w(|\mathbf{q}' - \mathbf{q}|) f_0(\varepsilon) f_0(\varepsilon_1) \delta(\varepsilon' + \varepsilon'_1 - \varepsilon - \varepsilon_1) \times \\ \times \{\psi\} \{\varphi\} d^3\mathbf{q} d^3\mathbf{q}' d^3\mathbf{g}. \quad (61)$$

Здесь везде (где противоположное не указано) подразумевается замена переменных (60) и, кроме того, значение $\mathbf{p}'_1$, полученное в результате интегрирования: $\mathbf{p}'_1 = \mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' = -\mathbf{q}' + \frac{1}{2} \mathbf{g}$.

При этом и с учетом (28) аргумент δ -функции в формуле (61) становится таким:

$$\varepsilon' + \varepsilon_1 - \varepsilon - \varepsilon_1 = \varepsilon(\mathbf{p}') + \varepsilon(\mathbf{p}_1) - \varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}_1) = 2[\varepsilon(\mathbf{q}') - \varepsilon(\mathbf{q})],$$

т. е. не зависящим от переменной g . Учтя это, а также замечая, что

$$f_0(\varepsilon) f_0(\varepsilon_1) \approx e^{-\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon}{T_e}} = e^{-\frac{-2\varepsilon(\mathbf{q}) + 2\varepsilon(g/2)}{T_e}},$$

можно при заданных выражением (18) $\varphi(\mathbf{p})$ и $\psi(\mathbf{p})$ выполнить интегрирование (61) по координате g . Оставшиеся затем интегралы по координатам $\mathbf{q}$ и $\mathbf{q}'$ оказываются того же вида, что и интегралы (33), и, следовательно, вычисляются тем же способом. Более того, матричные элементы оператора L_e можно выразить через те же функции $\Gamma_j^{(k)}$ (но с другими, естественно, аргументами), что и матричные элементы оператора L_I .

Первый исчезающий матричный элемент оператора L_e (в силу соотношения (59) матричные элементы L_{kk}^{jj} здесь равны нулю при $k = 0$ или $k' = 0$) имеет вид

$$L_{11}^{jj} = - \left(\frac{2\pi m_{\parallel}}{T_e} \right)^{1/2} \frac{e^4 n^2}{\kappa_{\infty}^2} \Gamma_j^*(2a^2). \quad (62)$$

Для упрощения в (62) опущен индекс «e» у оператора L_e и по аналогии с обозначениями (42), (43) введены функции

$$\Gamma_x^*(2a^2) = \Gamma_y^*(2a^2) \equiv \Gamma_{\perp}^*(2a^2) = \left(\frac{1}{2} \right)^{3/2} \left[3\Gamma_{\perp}^{(0)}(2a^2) + \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \Gamma_{\parallel}^{(0)}(2a^2) \right], \quad (63)$$

$$\Gamma_z^*(2a^2) \equiv \Gamma_{\parallel}^*(2a^2) = \left(\frac{1}{2} \right)^{1/2} \left[\frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \Gamma_{\perp}^{(0)}(2a^2) + \Gamma_{\parallel}^{(0)}(2a^2) \right].$$

Функции (63) могут иллюстрировать качественное отличие межэлектронного рассеяния от примесного, о чем уже упоминалось выше. Матричные элементы оператора L_e выражаются через функции $\Gamma_{\perp}^{(k)}$ и $\Gamma_{\parallel}^{(k)}$, в то время как при чисто примесном рассеянии элементы оператора L_I выражались только через одну из функций Γ_j . Еще более четко различие примесного и межэлектронного механизмов рассеяния проявится, если определить по формуле (51) суммарную проводимость при двух рассматриваемых здесь кулоновских механизмах рассеяния. Для этого подставим в (51) суммарный оператор столкновений $L = L_I + L_e$, учтем (41) и, полагая $a^2 \rightarrow 0$ (т. е. в приближении «далеких столкновений»), удержим в (48) только первые слагаемые. Отношение компонент полной проводимости σ к проводимости, обусловленной одним только рассеянием на ионизированных примесях $\sigma^{(I)}$ (при

$a^2 \rightarrow 0$), получится таким:

$$\frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{\perp}^{(I)}} = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\perp}^{(I)}} = \frac{4}{13} \left\{ 1 + \frac{\frac{9}{4}}{1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{3}{2} + \frac{1}{2} \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \frac{A_{\parallel}(\alpha)}{A_{\perp}(\alpha)} \right]} \right\}, \quad (64)$$

$$\frac{\sigma_{\parallel}}{\sigma_{\parallel}^{(I)}} = \frac{\mu_{\parallel}}{\mu_{\parallel}^{(I)}} = \frac{4}{13} \left\{ 1 + \frac{\frac{9}{4}}{1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \cdot \frac{A_{\perp}(\alpha)}{A_{\parallel}(\alpha)} \right]} \right\}. \quad (65)$$

При $m_{\parallel} \rightarrow m_{\perp}$ отношение $A_{\perp}(\alpha)/A_{\parallel}(\alpha)$, как известно из предыдущего параграфа, стремится к единице, и из выражений (64), (65) следует

$$\frac{\sigma}{\sigma^{(I)}} = \frac{\mu}{\mu^{(I)}} = \frac{4}{13} \left[1 + \frac{9}{4(1 + \sqrt{2})} \right] \approx (1,7)^{-1}.$$

Полученное число совпадает со значением γ_E , вычисленным в третьей главе. Межэлектронное взаимодействие в области кулоновских механизмов рассеяния некомпенсированного полупроводника с изотропным законом дисперсии уменьшает электропроводность примерно на 40%.

Иное соотношение получается при анизотропном законе (28). Так, в предельном случае $\frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \rightarrow \infty$ формулы (64), (65) дают

$$\frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{\perp}^{(I)}} = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\perp}^{(I)}} = \frac{4}{13} \left(1 + \frac{9}{4 + 3\sqrt{2}} \right), \quad \frac{\sigma_{\parallel}}{\sigma_{\parallel}^{(I)}} = \frac{\mu_{\parallel}}{\mu_{\parallel}^{(I)}} = \frac{4}{13}. \quad (66)$$

Мы видим, что изменение анизотропии эффективных масс от $\frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} = 1$

до $\frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} = \infty$ слабо сказывается на отношении поперечных составляющих тензора подвижности, но зато весьма заметно — на отношении продольных составляющих. В однодолинном германии, где $\frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \approx 20$, учет межэлектронного рассеяния уменьшает результирующую подвижность $\mu_{\parallel}$ примерно в три раза. Преобладание эффекта анизотропии межэлектронного рассеяния над анизотропией примесного здесь особенно велико.

Разумеется, столь заметное изменение отношения $\frac{\mu_{\parallel}}{\mu_{\parallel}^{(I)}}$ будет иметь место только при концентрации электронов не меньшей концентрации примесей и в области температур и полей, в которой решеточные механизмы рассеяния не играют заметной роли. К влиянию решеточных механизмов рассеяния мы еще вернемся. Здесь же пока только повторим, что в конкретных ситуациях может

оказаться недостаточным ограничение первыми слагаемыми (48). Тем не менее и при учете последующих слагаемых анизотропия межэлектронного рассеяния будет более заметной, чем анизотропия примесного.

§ 6. РАССЕЯНИЕ НОСИТЕЛЕЙ НА АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНАХ

В широком диапазоне температур решетки одним из важных механизмов изменения импульса носителей является механизм их рассеяния на акустических фоновых. Во второй главе мы детально рассмотрели этот механизм взаимодействия, определили вероятности излучения и поглощения акустического фона при изотропном законе дисперсии. Там же было дано выражение интеграла столкновений носителей с акустическими фонами. Здесь мы обобщим соответствующие формулы на случай анизотропного закона дисперсии (28). Будем, как и ранее в приближении деформационного потенциала, исходить из гамильтониана взаимодействия H'_{qa} носителя с акустическими колебаниями решетки (1.128):

$$H'_{qa} = \sum_{i,j} D_{ij} s_{ij}, \quad (67)$$

но теперь учтем не только продольную, но и поперечные ветви колебаний. Из-за этого амплитуду смещения точки $\mathbf{r}$ -кристалла вместо (2.26) запишем так:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}V} \right)^{1/2} \xi_{\mathbf{q}}^{(\alpha)} (a_{\mathbf{q}}^{(\alpha)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^{(\alpha)+} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}). \quad (68)$$

Здесь сохранены все обозначения (2.26) и добавлен лишь индекс α , определяющий номер ветви колебаний.

Гамильтониан (67) вместо (2.27) имеет теперь такой вид:

$$H'_a = \frac{1}{2} i \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \sum_{j,k} \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}V} \right)^{1/2} D_{jk} (\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j) (a_{\mathbf{q}}^{(\alpha)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - a_{\mathbf{q}}^{(\alpha)+} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}). \quad (69)$$

Вероятность перехода (точнее, плотность вероятности в пространстве импульса) носителя с импульсом $\mathbf{p}$ в $\mathbf{p}'$ находится так же, как в (2.29). Она равна

$$W_a(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{1}{32\pi^2 \hbar^3 \rho} \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}} \left[\sum_{j,k} D_{jk} (\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j) \right]^2 \times \\ \times \begin{cases} (N_{\mathbf{q}}^{(\alpha)} + 1) \delta[\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p}) - \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}] \delta_{\mathbf{p}', \mathbf{p} + \hbar\mathbf{q}} \\ N_{\mathbf{q}}^{(\alpha)} \delta[\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p}) + \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}] \delta_{\mathbf{p}', \mathbf{p} - \hbar\mathbf{q}}. \end{cases} \quad (70)$$

В главных осях эллипсоида (28) недиагональные элементы тензора деформационного потенциала равны нулю ($D_{jk} = 0$ при

$j \neq k$), а диагональные элементы $D_{11} = D_{22} \neq D_{33}$. Учитывая это, преобразуем сумму по j и k в (70):

$$\sum_{j,k} D_{jk} (\xi_{qj}^{(\alpha)} q_k + \xi_{qk}^{(\alpha)} q_j) = 2 [D_{11} (q \xi_q^{(\alpha)}) + (D_{33} - D_{11}) q_z \xi_{qz}^{(\alpha)}] =$$

$$= 2 [D_{11} (q \xi_q^{(\alpha)}) + (D_{33} - D_{11}) (i_0 q) (i_0 \xi_q)], \quad (71)$$

где i_0 — орт в направлении большой оси эллипсоида (28).

Так как для продольной ветви колебаний $(q \xi_q^{\parallel}) = q$, а для поперечной $(q \xi_q^{\perp}) = 0$, то вместо (71) сумму по j и k можно выразить так:

$$\sum_{j,k} D_{jk} (\xi_{qj}^{\parallel} q_k + \xi_{qk}^{\parallel} q_j) = 2q \left[D_{11} + (D_{33} - D_{11}) \frac{(i_0 q)}{q} \right],$$

$$\sum_{j,k} D_{jk} (\xi_{qj}^{\perp} q_k + \xi_{qk}^{\perp} q_j) = 2 (D_{33} - D_{11}) (i_0 q) (i_0 \xi_q^{\perp}). \quad (72)$$

Подставим (72) в формулу вероятности (70). Учтем, что при температуре решетки больше нескольких градусов Кельвина $T \gg \gg \hbar \omega_q$ (см. аналогичное утверждение во второй главе). Это позволяет, во-первых, в интересующей нас области температур (десятки и сотни градусов) считать $N_q^{(\alpha)} + 1 \approx N_q^{(\alpha)} \cong \frac{T}{\hbar \omega_q^{(\alpha)}}$ для всех ветвей акустических колебаний и, во-вторых, пренебречь в аргументе δ -функций величиной $\hbar \omega_q$ ⁵⁵. Вероятность $W_a(p, p')$ при указанных допущениях получается следующей:

$$W_a(p, p') = \frac{T}{4\pi^2 \hbar^4 \rho} \left\{ \frac{1}{s_{\parallel}^2} \left[D_{11} + (D_{33} - D_{11}) \left(\frac{i_0 q}{q} \right)^2 \right]^2 + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{s_{\perp}^2} (D_{33} - D_{11})^2 \left[1 - \left(\frac{i_0 q}{q} \right)^2 \right] \left(\frac{i_0 q}{q} \right)^2 \right\} \delta[\varepsilon(p) - \varepsilon(p')];$$

$$(\hbar q = p' - p). \quad (73)$$

Мы воспользовались здесь равенством

$$\sum_{(\perp)} (i_0 \xi^{\perp})^2 = \sum_{\alpha} (i_0 \xi^{(\alpha)})^2 - (i_0 \xi'')^2 = 1 - \left(\frac{i_0 q}{q} \right)^2$$

и учли, что $\omega_q^{\perp} = s_{\perp} q$ и $\omega_q^{\parallel} = s_{\parallel} q$, где $s_{\perp}$ и $s_{\parallel}$ — скорости поперечного и продольного звука соответственно.

Ниже будем, следуя принятым в литературе обозначениям, пользоваться введенными Херрингом константами деформационного потенциала (1.129): $D_{11} = \Xi_d$, $D_{33} - D_{11} = \Xi_u$. В этих

⁵⁵ Аналогичные приближения были сделаны во второй главе. Они оправданы до тех пор, пока взаимодействие считается квазиупругим и изменением энергии носителя при столкновении можно пренебречь. Учет неупругости будет выполнен несколько ниже.

обозначениях вероятность (73) имеет следующий вид:

$$W_a(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{T}{4\pi^2 \hbar^4 \rho} \left\{ \frac{1}{s_{\parallel}^2} \left[\Xi_d + \Xi_u \left(\frac{\mathbf{i}_0 \mathbf{q}}{q} \right)^2 \right]^2 + \frac{1}{s_{\perp}^2} \Xi_u^2 \left[1 - \left(\frac{\mathbf{i}_0 \mathbf{q}}{q} \right)^2 \right] \times \right. \\ \left. \times \left(\frac{\mathbf{i}_0 \mathbf{q}}{q} \right)^2 \right\} \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')] \quad (\hbar \mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}). \quad (74)$$

Записанную так вероятность можно подставить в интеграл столкновений носителей с акустическими фононами (2.10). Считая, что межэлектронное взаимодействие здесь тоже доминирует в процессе перераспределения энергии и функция распределения имеет вид (10), представим этот интеграл так:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_a = C_a \int w_a(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|) f_0(\varepsilon) [\varphi(\mathbf{p}') - \varphi(\mathbf{p})] \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3 \mathbf{p}' \equiv L_a \varphi, \quad (75)$$

где

$$C_a = \frac{T}{4\pi^2 \hbar^4 \rho s_{\parallel}^2} \Xi_d^2, \\ w_a(\hbar \mathbf{q}) = w_a(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|) = \left[1 + \left(\frac{\mathbf{i}_0 \mathbf{q}}{q} \right)^2 \frac{\Xi_u}{\Xi_d} \right]^2 + \\ + \left(\frac{s_{\parallel}}{s_{\perp}} \right)^2 \left(\frac{\Xi_u}{\Xi_d} \right)^2 \left[1 - \left(\frac{\mathbf{i}_0 \mathbf{q}}{q} \right)^2 \right] \left(\frac{\mathbf{i}_0 \mathbf{q}}{q} \right)^2. \quad (76)$$

Нетрудно убедиться, что оператор L_a (75) самосопряженный и знакоопределенный. Действительно, скалярное произведение $(\psi, L_a \varphi)$ равно:

$$(\psi, L_a \varphi) = C_a \int w_a(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|) f_0(\varepsilon) \psi(\mathbf{p}) [\varphi(\mathbf{p}') - \varphi(\mathbf{p})] \times \\ \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{p}' = -\frac{1}{2} C_a \int w_a(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|) f_0(\varepsilon) [\psi(\mathbf{p}') - \psi(\mathbf{p})] \times \\ \times [\varphi(\mathbf{p}') - \varphi(\mathbf{p})] \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{p}' = (\varphi, L_a \psi).$$

Действуя далее в полной аналогии с примесным рассеянием, вычислим матричные элементы оператора L_a . Они при $\varphi(\mathbf{p})$ в виде (18) равны:

$$L_{kk'}^{jj'} = -\frac{1}{2} C_a \int w_a(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|) f_0(\varepsilon) \varepsilon^{k+k'} (p_j' - p_j) (p_{j'}' - p_{j'}) \times \\ \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{p}'. \quad (77)$$

Выбрав ось z в направлении орта $\mathbf{i}_0$ и выполнив вычисления, описанные при получении формулы (36), найдем

$$L_{kk'}^{jj'} = -\frac{\pi n m_{\perp} m_{\parallel}^{1/2}}{(2\pi T_e)^{3/2}} \frac{(m_j m_{j'})^{1/2}}{m^2} T_e^{k+k'+1} C_a (k+k')! \times \\ \times \int \frac{g_j^* g_{j'}^*}{g^*} \sum_{l=0}^{k+k'} \frac{u^l}{l!} w_a(g) e^{-u} d^3 \mathbf{g}^*. \quad (78)$$

Здесь сохранены те же значения величин g^* и u , что и ранее (см. (34), (40)). Функция $w_a(g)$ в подынтегральном выражении (78) зависит только от углов, определяющих направление вектора g^* , но не от его модуля, ибо

$$\left(\frac{i_0 g}{g}\right)^2 = \frac{m_{\parallel} g_{\parallel}^{*2}}{m_{\perp} g_{\perp}^{*2} + m_{\parallel} g_{\parallel}^{*2}} = \frac{m_{\parallel} \cos^2 \vartheta}{m_{\perp} \sin^2 \vartheta + m_{\parallel} \cos^2 \vartheta}.$$

Это облегчает вычисление интеграла, который теперь берется в элементарных функциях:

$$L_{kk'}^{jj'} = -8nm_{\perp} (m_{\parallel})^{1/2} m_j (2\pi T_e)^{1/2} C_a (k + k' + 2)! T_e^{k+k'+1} M_j \delta_{jj'}, \quad (79)$$

где

$$\begin{aligned} M_x = M_y \equiv M_{\perp} &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (1-x^2) \left\{ \left[1 + B \frac{x^2}{\alpha^2 + x^2} \right]^2 + \left(\frac{s_{\parallel}}{s_{\perp}} \right)^2 B^2 \times \right. \\ &\times \left[\frac{1}{1+\alpha^2} - \frac{x^2}{\alpha^2 + x^2} \right] \frac{x^2}{\alpha^2 + x^2} \Big\} dx = \frac{2}{3} + B \left[\frac{4}{3} + 2\alpha^2 - \right. \\ &- 2\alpha(1+\alpha^2) \arctg \frac{1}{\alpha} \Big] + \frac{1}{2} B^2 \left[\frac{4}{3} + 5\alpha^2 - \alpha(3+5\alpha^2) \arctg \frac{1}{\alpha} \right] + \\ &+ \left(\frac{s_{\perp}}{s_{\parallel}} \right)^2 \frac{1}{2} B^2 \left[\frac{2}{3} \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2} - 5\alpha^2 + \alpha(1+5\alpha^2) \arctg \frac{1}{\alpha} \right], \quad (80) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_z \equiv M_{\parallel} &= \int_{-1}^1 x^2 \left\{ \left[1 + B \frac{x^2}{\alpha^2 + x^2} \right]^2 + \left(\frac{s_{\parallel}}{s_{\perp}} \right)^2 B^2 \left[\frac{1}{1+\alpha^2} - \right. \right. \\ &- \left. \left. \frac{x^2}{\alpha^2 + x^2} \right] \frac{x^2}{\alpha^2 + x^2} \right\} dx = \frac{2}{3} + 2B \left[\frac{2}{3} - 2\alpha^2 + 2\alpha^3 \arctg \frac{1}{\alpha} \right] + \\ &+ B^2 \left[\frac{2}{3} - 4\alpha^2 - \frac{\alpha^4}{1+\alpha^2} + 5\alpha^3 \arctg \frac{1}{\alpha} \right] + \\ &+ \left(\frac{s_{\parallel}}{s_{\perp}} \right)^2 B^2 \left[5\alpha^2 - \frac{11}{3} \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2} - \alpha^3 \frac{3+5\alpha^2}{1+\alpha^2} \arctg \frac{1}{\alpha} \right], \quad (81) \end{aligned}$$

$$B = (1 + \alpha^2) \frac{\Xi_u}{\Xi_d}, \quad \alpha^2 = \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel} - m_{\perp}}. \quad (82)$$

Из приведенного выражения матричного элемента $L_{kk'}^{jj'}$ можно заключить, что акустическое рассеяние и при эллипсоидальном законе дисперсии (28) характеризуется временем релаксации, но в отличие от изотропной энергии не одним, а набором времен релаксации.

Действительно, если выразить интеграл столкновений (75) на функции $\varphi(p)$ (18) в виде

$$L_a \varphi = - \sum_{j=1}^3 \frac{\varphi_j(p)}{\tau_j(\varepsilon)} \quad (83)$$

и формально введенные тут величины $\tau_j(\varepsilon)$ записать по аналогии с (2.89)

$$\tau_j(\varepsilon) = \left(\frac{T_e}{\varepsilon} \right)^{1/2} \tau_j^{(0)}, \quad (84)$$

то матричные элементы $L_{kk'}^{jj'}$ (20), после подстановки (84) в (75), получатся такими:

$$L_{kk'}^{jj'} = - \frac{4nm_j}{3\sqrt{\pi}\tau_j^{(0)}} T_e^{k+k'+1} (k+k'+2)! \delta_{jj'}. \quad (85)$$

Здесь не зависящая от энергии электрона величина $\tau_j^{(0)}$ определяется непосредственно из сравнения (85) с (79). Она равна

$$\tau_j^{(0)} = [6\sqrt{\pi} m_{\perp} m_{\parallel}^{1/2} (2\pi T_e)^{1/2} C_a M_j]^{-1}. \quad (86)$$

Компоненты (в главных осях эллипсоида энергии) тензора подвижности при акустическом механизме рассеяния в приближении времени релаксации согласно (84) равны:

$$\mu_j^{(a)} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{e\tau_j^{(0)}}{m_j}. \quad (87)$$

Они представляют обобщение известной уже нам изотропной подвижности (3.89), в которой длина свободного пробега l_a выражена через время релаксации (84)⁵⁶.

Мы не остановились на выводе формулы (87) более подробно потому, что подвижность в развитом здесь формализме получается автоматически из общего выражения (51). Если в последнем ограничиться двумя выписанными в (51) слагаемыми (разумеется, со значениями $L_{kk'}^{jj'}$, соответствующими акустическому рассеянию), то

$$\mu_j^{(a)} \cong \frac{9\pi}{32} \frac{13}{12} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{e\tau_j^{(0)}}{m_j}. \quad (88)$$

Множитель $(9\pi/32)(13/12) \approx 0,95$. Таким образом, равенства (87) и (88) практически совпадают. Это означает, что время релаксации (84) является удобной физической величиной, позволяющей количественно определять рассеяние носителей на акустических колебаниях решетки.

При низких температурах решетки возникает уже необходимость учета малой неупругости рассеяния на акустических фононах, т. е. учета энергии $\mathcal{E}_a$, передаваемой электронами решетки при их взаимодействии с акустическими фононами. Эта энергия (точнее, энергия, передаваемая единичному объему за единицу времени) была ранее определена формулой (2.94). Приведем ее явный вид с учетом анизотропии вероятности взаимодействия (70). Для

⁵⁶ Аналогичное (84) выражение компонент тензора времени релаксации в полупроводниках с эллипсоидальной энергией носителей впервые было получено (отличным от изложенного методом) в работе [153].

этого прежде всего запишем с учетом (70) интеграл столкновений (2.31) на функции $f_0(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_a &= \frac{1}{32\pi^2 \rho \hbar^3} \sum_{\alpha} \int \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}} \left[\sum_{j,k} D_{jk} (\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j) \right]^2 N_{\mathbf{q}}^{(\alpha)} \times \\ &\times \left\{ \left[e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}}{T}} f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}) - f_0(\varepsilon) \right] \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}) + \right. \\ &\left. + [f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}) - e^{-\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}}{T}} f_0(\varepsilon)] \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}) \right\} d^3\mathbf{p}'. \quad (89) \end{aligned}$$

Далее, поступая так же, как во второй главе, разложим выражение в фигурных скобках (89) по малому параметру неупругости $\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}$ и сохраним самые нижние по этому параметру не исчезающие слагаемые ряда. Кроме того (тоже, как во второй главе при получении (2.96)), заменим функцию Планка $N_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}$ на $\frac{T}{\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}}$. Все это даст

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_a &= - \frac{T}{32\pi^2 \hbar^2 \rho} \left\{ \frac{d}{d\varepsilon} \left(\frac{df_0}{d\varepsilon} + \frac{f_0}{T} \right) \sum_{\alpha,j,k} \int [D_{jk} (\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \right. \\ &+ \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j)]^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3\mathbf{p}' - 2 \left(\frac{df_0}{d\varepsilon} + \frac{f_0}{T} \right) \sum_{\alpha,j,k} \int [D_{jk} (\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \\ &+ \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j)]^2 \frac{d}{d\varepsilon'} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3\mathbf{p}'. \quad (90) \end{aligned}$$

Суммирование по ветвям колебаний (двум поперечным $\xi_{\mathbf{q}} \perp \mathbf{q}$ и одной продольной $\xi_{\mathbf{q}} \parallel \mathbf{q}$) здесь легко реализуется, поскольку вектора $\xi_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}$ ортонормированы, а в системе главных осей эллипсоида имеется всего три отличные от нуля компоненты D_{jk} : $D_{11} = D_{22}$ и D_{33} . Именно

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,j,k} [D_{jk} (\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j)]^2 &= 4 \sum_{\alpha} \{ D_{11} (\xi_{\mathbf{q}}^{(\alpha)} \mathbf{q}) + (D_{33} - D_{11}) \times \\ &\times (\mathbf{i}_0 \xi_{\mathbf{q}}^{(\alpha)}) (\mathbf{i}_0 \mathbf{q}) \}^2 = 4 \{ D_{\parallel}^2 q^2 + 2D_{11}(D_{33} - D_{11}) (\mathbf{i}_0 \mathbf{q})^2 + \\ &+ (D_{33} - D_{11})^2 (\mathbf{i}_0 \mathbf{q})^2 \}. \end{aligned}$$

В обозначениях Херринга (1.129)

$$\sum_{\alpha,j,k} [D_{jk} (\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j)]^2 = 4\Xi_d^2 \left\{ q^2 + 2 \frac{\Xi_u}{\Xi_d} (\mathbf{i}_0 \mathbf{q})^2 + \left(\frac{\Xi_u}{\Xi_d} \right)^2 (\mathbf{i}_0 \mathbf{q})^2 \right\}. \quad (91)$$

Подставим это выражение в интеграл (90), учтем сохранение импульса $\mathbf{p}' - \mathbf{p} = \pm \hbar \mathbf{q}$ и выполним интегрирование по пространству $\mathbf{p}'$, перейдя в этом пространстве к координатам (34) (учтя $(\mathbf{i}_0 \mathbf{p}')^2 = \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} p_{\parallel}^2$). Первый интеграл правой части (90) получится равным:

$$\sum_{\alpha,j,k} \int [D_{jk} (\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j)]^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3\mathbf{p}' = \frac{16\pi}{\hbar^2} \Xi_d^2 m_{\perp} (2m_{\parallel})^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ 2m_{\perp} \left[\frac{2}{3} + \frac{1}{3} \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \left(1 + 2 \frac{\Xi_u}{\Xi_d} + \frac{\Xi_u^2}{\Xi_d^2} \right) \right] \varepsilon^{3/2} + \right. \\ \left. + \left[p_{\perp}^2 + p_{\parallel}^2 \left(1 + 2 \frac{\Xi_u}{\Xi_d} + \frac{\Xi_u^2}{\Xi_d^2} \right) \right] \varepsilon^{1/2} \right\}. \quad (92)$$

Второй интеграл (90) вычисляется совершенно аналогично.

В формуле (92), как видим, сохранена еще зависимость от направления импульса $\mathbf{p}$. Поэтому ее и полное выражение (89) нужно усреднить по углам на изоэнергетической поверхности. Такая необходимость становится ясной из следующих соображений. Функция распределения $f(\mathbf{p})$ в координатах (34) представляется рядом, аналогичным ряду (2.16):

$$f(\mathbf{p}) = \sum_{l,m} f_l(\varepsilon) Y_{lm}(\vartheta^*, \varphi^*), \quad (93)$$

где ϑ^*, φ^* — углы, определяющие направление вектора $\mathbf{p}^*$ в деформированной системе (34). При таком разложении уравнение, из которого находится $f_0(\varepsilon)$, получается (как, впрочем, и при изотропном законе дисперсии) умножением кинетического уравнения на $\frac{1}{4\pi} \sin \vartheta^* d\vartheta^* d\varphi^*$ и интегрированием его по всем углам ϑ^* и φ^* . Эта процедура вполне эквивалентна интегрированию (89) по телесному углу, а значит, и усреднению по углам формулы (92). Обозначив скобками $\langle \dots \rangle$ указанное усреднение и учтя закон дисперсии (28), получим

$$\left\langle \sum_{\alpha,j,k} \int [D_{jk}(\xi_{\mathbf{q}j}^{(\alpha)} q_k + \xi_{\mathbf{q}k}^{(\alpha)} q_j)]^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon) d^3\mathbf{p}' \right\rangle = \\ = \frac{64\pi}{\hbar^2} \Xi_d^2 m_{\perp}^2 (2m_{\parallel})^{1/2} \left[\frac{2}{3} + \frac{1}{3} \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \left(1 + \frac{\Xi_u}{\Xi_d} \right)^2 \right] \varepsilon^{3/2}. \quad (94)$$

Вычислив так же второй интеграл (90), найдем окончательное выражение (89), которое запишем в виде

$$\left\langle \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_a \right\rangle = - \frac{1}{\tau_a^*(\varepsilon)} \frac{d}{d\varepsilon} \left[\varepsilon^2 \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{f_0}{T} \right) \right]. \quad (95)$$

Назовем здесь $\tau_a^*(\varepsilon)$ временем релаксации по энергии. Его обратная величина равна:

$$\frac{1}{\tau_a^*(\varepsilon)} = \frac{2Tm_{\perp}^2 (2m_{\parallel})^{1/2}}{\pi \rho \hbar^4} \Xi_d^2 \left[\frac{2}{3} + \frac{1}{3} \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \left(1 + \frac{\Xi_u}{\Xi_d} \right)^2 \right] \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}. \quad (96)$$

По своей форме выражение (95) совпадает с (2.96), полученным при изотропном законе дисперсии, и отличается от него только увеличенным числом констант. Зависимость от энергии носителей в формулах (95) и (2.96) совпадает, если в (96) принять параболический закон дисперсии.

После того как найдено выражение интеграла столкновений (95), можно вычислить энергию $\mathcal{E}_a$, учитывая закон дисперсии (28). Считая $f_0(\varepsilon)$ максвелловской функцией (35), получим

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_a &= \int \varepsilon \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_a d^3p = 4\pi m_{\perp} (2m_{\parallel})^{1/2} \int \varepsilon^{3/2} \left\langle \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_a \right\rangle d\varepsilon = \\ &= \frac{8\sqrt{2} m_{\perp}^2 m_{\parallel}^{1/2}}{\pi^{3/2} \rho \hbar^4} \Xi_d^2 \left[\frac{2}{3} + \frac{1}{3} \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}} \left(1 + \frac{\Xi_u}{\Xi_d} \right)^2 \right] n T_e^{3/2} \left(1 - \frac{T}{T_e} \right). \end{aligned} \quad (97)$$

Мы еще вернемся к этой формуле, а сейчас заметим, что (95) и (93) в приближении тензора времени релаксации позволяют найти (методом, описанным в третьей главе) функцию $f_0(\varepsilon)$ в тех случаях, когда концентрация электронов недостаточна для ее максвеллизации. Она по своему виду оказывается такой же, как в изотропном случае (3.48):

$$f_0(\varepsilon) = \text{const} \left(\alpha_E + \frac{\varepsilon}{T} \right)^{\alpha_E} e^{-\varepsilon/T},$$

но только α_E имеет теперь более общее значение:

$$\alpha_E = \frac{2}{3} \frac{e^2}{T} \tau_a^*(\varepsilon) \left[\frac{F_{\perp}^2}{m_{\perp}} \tau_{\perp}(\varepsilon) + \frac{F_{\parallel}^2}{m_{\parallel}} \tau_{\parallel}(\varepsilon) \right], \quad (98)$$

где $\tau_a^*(\varepsilon)$ определена в (96), а $\tau_{\perp}(\varepsilon)$ и $\tau_{\parallel}(\varepsilon)$ — формулой (84). При $\tau_{\perp} = \tau_{\parallel}$ формула (98) переходит в (3.44).

§ 7. СМЕШАННЫЙ МЕХАНИЗМ РАССЕЯНИЯ

В эксперименте чаще всего реализуется ситуация, когда в ограничение подвижности вносят одновременно вклад разные механизмы рассеяния. В полупроводниках типа n — Ge и p — Si при температурах от нескольких десятков градусов Кельвина и почти до дебаевской температуры механизмами, влияющими на асимметричную часть функции распределения, являются акустические колебания решетки, заряженные примесные центры и иногда, как мы видели, межэлектронное взаимодействие. Рассеяние электронов на оптических колебаниях решетки в указанной области температур может сказаться на энергетическом балансе электронного газа (см., например, [145, 154]), но мало влияет на изменение импульса.

Из всех перечисленных только что механизмов рассеяния наиболее трудным для расчета является анизотропное межэлектронное рассеяние. Его роль при смешанных механизмах рассеяния, естественно, не столь велика, как при рассеянии на примесях (с концентрацией, равной электронной), но, вообще говоря, может быть заметной. Поэтому представляется необходимым оценить эту роль и ее температурную зависимость при учете акустического рассеяния.

Максимально анизотропия межэлектронного рассеяния может проявиться, когда заселена лишь одна долина (в n — Ge при сжатии в направлении [111]) или две эквивалентные долины (в n — Si при сжатии вдоль одной из главных кристаллографических осей). Поэтому начнем рассмотрение с однодолинного полупроводника и определим компоненты тензора подвижности при анизотропном рассеянии на акустических фононах, примесных центрах и рассеянии электронов друг на друге.

Часто по аналогии с результирующим временем релаксации (3.17) результирующую подвижность μ при наличии нескольких механизмов рассеяния определяют формулой

$$\frac{1}{\mu} = \sum_l \frac{1}{\mu^{(l)}}, \quad (99)$$

где $\mu^{(l)}$ — подвижность, обусловленная одним из механизмов, и суммирование распространено на все типы рассеяния. Такое определение не всегда обосновано и может привести к заметной ошибке, хотя складывание обратных времен релаксации оправдано теорией вероятности независимых событий.

Использование суммы обратных времен релаксации в теоретических расчетах обычно связано с вычислительными трудностями из-за различной энергетической зависимости $\tau^{(l)}(e)$ слагаемых суммы. Эти трудности в значительной степени устраняются вариационным методом, в котором результирующий оператор $\hat{L}$ и различные матричные элементы $L_{hk}^{jj'}$ по существу самого метода должны складываться. В конкретно рассматриваемой сейчас задаче оператор $L = L_a + L_I + L_e$. Подстановка соответствующих матричных элементов (85), (41) и (62) в формулу (51) дает сразу значение подвижности, определяемой смешанными механизмами рассеяния. Приведем отношение компонент тензора результирующей подвижности μ_j к таким же компонентам тензора подвижности при одном только акустическом рассеянии $\mu_j^{(a)}$, взятом в виде (87):

$$\frac{\mu_j}{\mu_j^{(a)}} = \frac{9\pi}{32} \frac{Q_j}{\Gamma_j^{(0)} + Q_j} \times \left\{ 1 + \frac{[5\Gamma_j^{(0)} - 2\Gamma_j^{(1)} - Q_j]^2}{4(\Gamma_j^{(0)} + Q_j) \left[\left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty} \right)^2 \Gamma_j^* + \Gamma_j^{(2)} + 12Q_j - (\Gamma_j^{(1)} + 3Q_j)^2 \right]} \right\}, \quad (100)$$

где

$$Q_j = \frac{32}{9\pi} \frac{\kappa_0^2 T_e^{3/2}}{n e^3 \mu_j^{(a)} (2\pi m_\parallel)^{1/2}} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{\kappa_0^2 m_j T_e^{3/2}}{n e^4 (2\pi m_\parallel)^{1/2} \tau_j^{(0)}}. \quad (101)$$

Межэлектронное рассеяние в (100) отражено величиной $\Gamma_j^* \left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty} \right)^2$. Видно, что при прочих равных условиях его роль возрастает в

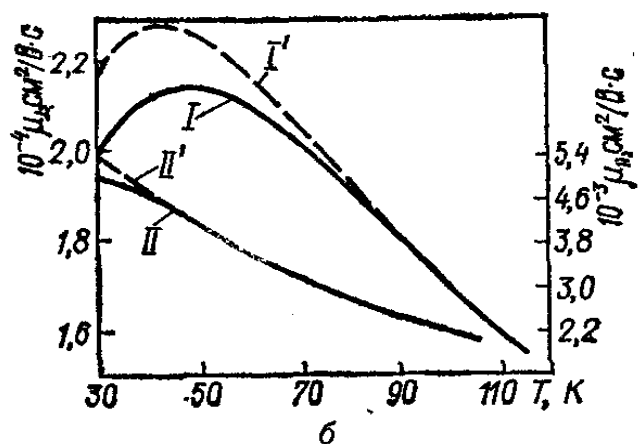
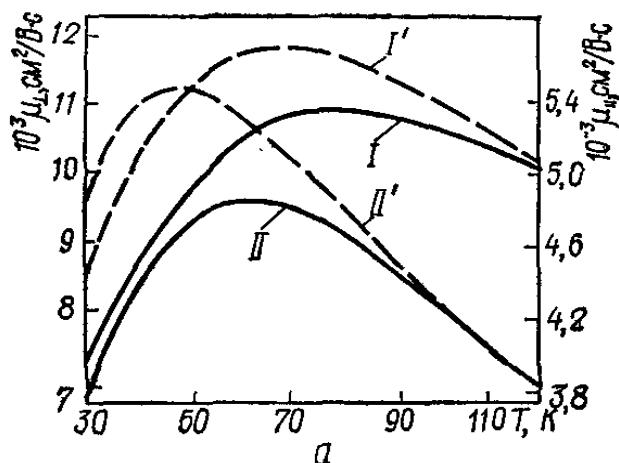


Рис. 22. Температурные зависимости поперечной $\mu_{\perp}$ и продольной $\mu_{\parallel}$ компонент тензора подвижности n — Ge (б) и n — Si (а) — кривые I и II — соответственно; кривые I' и II' — те же зависимости, вычисленные без учета межэлектронного рассеяния. Концентрация $5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

полупроводниках с большим различием статической и высокочастотной диэлектрических проницаемостей⁵⁷.

На рис. 22, а и б приведены температурные зависимости компонент тензора подвижности в слабых (не греющих полях) в n — Ge и n — Si, вычисленные по формулам (100) и (64) с учетом и без учета межэлектронного рассеяния. Из рис. 22, б видно, что в Ge при концентрациях электронов и примесных ионов $n = N_I = 5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ температурный ход компоненты $\mu_{\parallel}$ почти во всей рассчитанной области температур ($30 \div 100 \text{ K}$, в которой влияние оптических фононов на время релаксации еще не существенно) определяется главным образом рассеянием электронов на акустических фононах. В противоположность этому на кривой температурной зависимости $\mu_{\perp}$ отчетливо проявляется область преобладания примесного рассеяния, где межэлектронное взаимодействие заметно снижает подвижность. На анизотропию подвижности оно, однако, сравнительно не сильно влияет в n — Ge при $T > 30 \text{ K}$, поскольку преобладает более сильная анизотропия рассеяния на акустических фононах.

Более интересны температурные кривые n — Si (рис. 22, а). В кремнии при концентрации $n = N_I = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ компоненты $\mu_{\perp}$ и $\mu_{\parallel}$ определяются смешанным рассеянием во всем рассмотренном интервале температур. Подвижности в направлении оси тяжелой массы $\mu_{\parallel}$ с учетом и без учета межэлектронного рассеяния отличаются не только по абсолютной величине (до 25%), но и имеют разный температурный ход. Это взаимодействие не только уменьшает $\mu_{\parallel}$, но еще и смещает максимумы кривых $\mu_{\parallel}$ (примерно на

⁵⁷ Заметное различие проницаемостей κ_0 и κ_{∞} имеет место у полярных полупроводников. В этих полупроводниках, как правило, существенно взаимодействие с полярно-оптическими фононами, не учтенными здесь. Это нужно иметь в виду, применяя формулу (100) к полярным полупроводникам.

15 К). Оно также уменьшает подвижность $\mu_{\perp}$ и смещает ее максимум к более низкой температуре.

Наличие максимума на температурных кривых $\mu_{\parallel}$ и $\mu_{\perp}$ указывает на изменение вблизи температуры максимума доминирующего механизма рассеяния. Это изменение особенно заметно на кривых $\mu_{\parallel}$ в кремнии. Оказывается, что вообще анизотропия подвижности сильнее проявляется в кремнии, хотя анизотропия масс в германии гораздо больше. Существенное влияние здесь имеют упругие свойства полупроводника — величина констант деформационного потенциала.

§ 8. МЕЖДОЛИННОЕ РАССЕЯНИЕ

До сих пор наше рассмотрение ограничивалось полупроводниками с одной долиной (или двумя эквивалентными), заполненной электронами. Посмотрим, как следует обобщить теорию на случай, когда заполнены все нижайшие долины в зоне проводимости. В таком полупроводнике может появиться новый механизм рассеяния — междолинное рассеяние.

Междолинное взаимодействие электронов приводит к перебросу электронов из одной долины в другую или же к передаче энергии и импульса из одной долины в другую. Этот последний вид междолинного взаимодействия, при котором электроны, сталкиваясь, остаются в своих долинах, заметно влияет, как будет показано, на междолинную перекачку энергии. Что же касается влияния его на передачу импульса и подвижность, то степень этого влияния, во всяком случае при равенстве электронных концентраций в долинах, не должна превышать внутридолинного межэлектронного рассеяния, рассмотренного в § 5 и 7. Более того, учет междолинного рассеяния между всеми симметрично расположенными долинами в кубическом кристалле, по-видимому, должен вообще несколько сглаживать анизотропию рассеяния электронов друг на друге. Электрическое поле нарушает эквивалентность долин, и поэтому при низких температурах решетки и высоких электронных концентрациях междолинное взаимодействие будет влиять на проводимость и подвижность электронов.

Столкновения электронов с ионизованными примесями, в принципе, тоже могут приводить к перебросу электронов из одной долины в другую. Процесс этот, однако, маловероятен. Центры долин обычно расположены вблизи границ зоны Бриллюэна (см. § 5 гл. 1). Поэтому рассеяние на примесном центре, приводящее к перебросу электрона в другую долину, должно сопровождаться большим, порядка $\frac{2\pi\hbar}{a}$ (a — постоянная решетки), изменением импульса. Такое изменение при кулоновском рассеянии может иметь место только при достаточно близких и, следовательно, редких соударениях. Отсюда видно, что обычно процессы междо-

линного переброса электронов при рассеянии на примесных ионах не должны играть заметной роли в явлениях переноса.

Кроме перечисленных причин, междолинные переходы могут иметь место при рассеянии электронов на фононах. Эти фононы, в силу закона сохранения импульса, должны обладать импульсом порядка $\hbar q_{\max}$, где $q_{\max}$ — максимальное значение волнового вектора в зоне Бриллюэна. Такие фононы уже не те длинноволновые, с которыми до сих пор мы имели дело. Их энергия сравнима с энергией оптических фононов. В литературе принято эти фононы называть f - и g -фононами: f -фононы переводят электроны в долину с ориентацией оси вращения эллипсоида энергии, не параллельной оси исходной долины; g -фононы переводят электроны в долину с параллельной осью вращения.

По сравнению с импульсом f - или g -фонона, начальный до «столкновения» импульс электрона и конечный импульс его в другой долине малы. По этой причине матричный элемент, количественно характеризующий междолинные переходы, можно считать не зависящим от начального и конечного состояний. Можно также (как у длинноволновых оптических фононов) пренебречь дисперсией междолинных фононов. В таком приближении междолинное рассеяние формально аналогично внутридолинному рассеянию на оптических фононах в атомарных полупроводниках.

Воспользовавшись указанной аналогией, представим изменение функции распределения электронов i -й долины $f^{(i)}$ вследствие взаимодействия с междолинными фононами в следующем виде:

$$\left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t}\right)_M = -\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi}{\hbar} \sum'_{j \neq i} \langle i | H_M | j \rangle^2 N_{ij} \{ [f^{(i)}(\mathbf{p}) - e^{\hbar\omega_{ij}/T} f^{(j)}(\mathbf{p}')] \times \\ \times \delta[\varepsilon^{(j)}(\mathbf{p}') - \varepsilon^{(i)}(\mathbf{p}) - \hbar\omega_{ij}] + [e^{\hbar\omega_{ij}/T} f^{(i)}(\mathbf{p}) - f^{(j)}(\mathbf{p}')] \times \\ \times \delta[\varepsilon^{(j)}(\mathbf{p}') - \varepsilon^{(i)}(\mathbf{p}) + \hbar\omega_{ij}] \} d^3\mathbf{p}'. \quad (102)$$

Здесь указано суммирование по всем нижайшим долинам зоны проводимости, кроме рассматриваемой i -й, ω_{ij} — частота междолинного $i \rightarrow j$ фонона (f или g), N_{ij} — распределение Планка междолинных фононов, $\langle i | H_M | j \rangle^2$ — квадрат матричного элемента перехода электрона из i в j -ю долину. Он равен

$$\langle i | H_M | j \rangle^2 = \frac{\hbar}{2\rho\omega_{ij}V} D_{ij}^{(0)2} q_{ij}^2, \quad (103)$$

где $D_{ij}^{(0)}$ — константа соответствующего взаимодействия, аналогичная константе деформационного потенциала; q_{ij} — волновой вектор фонона.

Подставим в интеграл столкновений (102) функцию распределения электронов i -й и j -й долин (10), которые здесь запишем в виде двух слагаемых: сферически симметричного, зависящего от величины энергии, и асимметричного

$$f^{(i)}(\mathbf{p}) = f_0^{(i)}(\varepsilon) [1 + \varphi^{(i)}(\mathbf{p})] \equiv f_0^{(i)}(\varepsilon) + f_1^{(i)}(\mathbf{p}). \quad (104)$$

Так как угловая зависимость подынтегрального выражения (102) содержится только в функциях $f^{(j)}(\mathbf{p}')$, то при интегрировании асимметричная часть функции $f_1^{(j)}(\mathbf{p}')$ выпадет и получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_M = & - \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{j \neq i}' N_{ij} \langle i | H_M | j \rangle^2 \{ f^{(i)}(\mathbf{p}) \int [\delta(\varepsilon^{(j)}(\mathbf{p}') - \\ & - \varepsilon^{(i)}(\mathbf{p}) - \hbar\omega_{ij}) + e^{\hbar\omega_{ij}/T} \delta[(\varepsilon^{(j)}(\mathbf{p}') - \varepsilon^{(i)}(\mathbf{p}) + \hbar\omega_{ij})] d^3\mathbf{p}' + \\ & + \int f_0^{(j)}(\varepsilon^{(j)}) [e^{\hbar\omega_{ij}/T} \delta(\varepsilon^{(j)}(\mathbf{p}') - \varepsilon^{(i)}(\mathbf{p}) - \hbar\omega_{ij}) + \\ & + \delta(\varepsilon^{(j)}(\mathbf{p}') - \varepsilon^{(i)}(\mathbf{p}) + \hbar\omega_{ij})] d^3\mathbf{p}' \}. \end{aligned} \quad (105)$$

Отсюда можно увидеть, что действие интеграла столкновений на асимметричную часть функции распределения характеризуется междолинным временем релаксации. Действительно, если перейти в (105) к деформированным координатам (34), то интеграл легко вычислить. Мы запишем только ту его часть, в которую в качестве множителя входит $f_1^{(r)}(\varepsilon)$, и сразу введем время релаксации междолинного рассеяния $\tau_M^{(i)}$

$$\left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_M \equiv L_M^{(i)} f_1^{(i)} = - \frac{f_1^{(i)}}{\tau_M^{(i)}}, \quad (106)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_M^{(i)}} = & \frac{1}{\pi \rho \hbar^3} \left(\frac{m_x^{(j)} m_y^{(j)} m_z^{(j)}}{2} \right)^{1/2} \times \\ & \times \sum_{j \neq i}' \frac{q_{ij}^2 D_{ij}^2 N_{ij}}{\omega_{ij}} \{ \sqrt{\varepsilon^{(i)}(p) + \hbar\omega_{ij}} + e^{\hbar\omega_{ij}/T} \sqrt{\varepsilon^{(i)}(p) - \hbar\omega_{ij}} \Delta(\varepsilon' - \hbar\omega_{ij}) \}. \end{aligned} \quad (107)$$

Здесь для ясности введена ступенчатая функция $\Delta(\varepsilon' - \hbar\omega_{ij})$, которая, как указывалось во второй главе, всегда должна подразумеваться при $\varepsilon < \hbar\omega$.

По своей структуре формула (107) близка к (2.100), определяющей время релаксации на оптических фононах. Энергия междолинного фонона, как правило, измеряется несколькими сотнями градусов и в этом смысле близка (или только в несколько раз отличается) к энергии оптического фонона в атомарных полупроводниках. Наличие в (107) множителя N_{ij} указывает на экспоненциальную зависимость τ_M от температуры. Поэтому влияние междолинного рассеяния на явления переноса, как и влияние рассеяния на оптических фононах, в значительной мере определяется температурой решетки. При температуре до 100 К оно в общем мало.

В следующем параграфе оценим вклад междолинного рассеяния в величину подвижности электронов и электропроводность, но предварительно укажем (для полного охвата возможных междолинных механизмов) еще на один. Этот механизм связан с захватом электрона проводимости примесным центром и последующим теп-

ловым выбросом его в одну из долин. Попад в некоторую долину, электрон не «помнит» об импульсе до захвата. Такой междолинный переход поэтому может в известной степени влиять на заселенность долин, но мало скажется на электропроводности и подвижности.

§ 9. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В многодолинном полупроводнике, в котором заселены все нижайшие долины зоны проводимости и электроны всех этих долин вносят вклад в ток, междолинное рассеяние, в принципе, следует учесть наряду с внутридолинным. В литературе до сих пор нет расчета влияния на подвижность анизотропного рассеяния электронов из разных долин. Изложенный в § 5 учет внутридолинного анизотропного межэлектронного рассеяния позволяет нам теперь оценить возможный максимальный его вклад и при междолинном рассеянии. Напомним, что пренебрежение внутридолинным межэлектронным рассеянием недопустимо в области чисто примесного рассеяния (при концентрации электронов, примерно равной концентрации ионизованных примесных центров). В области смешанного рассеяния или в компенсированных полупроводниках при $N_I \gg n$ внутридолинное межэлектронное рассеяние уже незначительно влияет на подвижность. Поэтому, не делая большой погрешности в области температур и полей, где имеет место смешанная проводимость (а тем более в области чисто решеточной проводимости), можно пренебречь вкладом в подвижность рассеяния электронов разных долин друг на друге. Как уже отмечалось, можно также пренебречь междолинными переходами при рассеянии на примесных ионах.

Итак, помимо рассмотренных ранее механизмов акустического и примесного рассеяния в атомарных полупроводниках мы в общем случае учтем еще рассеяние на оптических фононах и междолинное рассеяние на фононах. Покажем, что такой учет можно реализовать в рамках изложенного выше вариационного метода.

Междолинное решеточное рассеяние согласно (106) описывается в приближении времени релаксации. Поэтому оно не приводит к зацеплению асимметричных частей функций распределения электронов в разных долинах. Матричный элемент оператора $L_m^{(i)}$ междолинного рассеяния из i -й долины во все остальные записывается в виде

$$(L^{(i)})_{kk'}^{jj'} = - \sum_{l \neq i}' \frac{m_{\perp} m_{\parallel}^{1/2}}{2^{1/2} \pi \rho \hbar^3 \omega_{il}} D_{il}^2 q_{il}^2 N_{il} \int (p_j p_{j'} \varepsilon^{k+k'} f_0^{(i)}) \times \\ \times [(\varepsilon + \hbar \omega_{il})^{1/2} + e^{\hbar \omega_{il}/T} (\varepsilon - \hbar \omega_{il})^{1/2} \Delta(\varepsilon - \hbar \omega_{il})] d^3 p. \quad (108)$$

Для общности по аналогии с (35) примем

$$f_0^{(i)}(\varepsilon) = \frac{n_i}{m_{\perp} (m_{\parallel})^{1/2} (2\pi T_i)^{3/2}} e^{-\varepsilon/T_i}, \quad (109)$$

где n_i — концентрация электронов i -й долины; T_i — введенная пока формально электронная температура в i -й долине. В слабом поле электроны практически не разогреваются ($T_i \cong T$), и концентрация в каждой долине равна полной концентрации электронов, разделенной на число долин.

Переход к деформированным импульсам (34) позволяет вычислить интеграл (108) в общем виде:

$$(L^{(i)})_{jj'}^{jj'} = -\frac{8}{3} \delta_{jj'} \sum_{l \neq i}' \frac{n_i D_{il}^2 q_{il}^2 N_{il} m_{\perp} (m_{\parallel})^{1/2} m_j}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3 \rho \omega_{il}} T_i^{k+k'+\frac{3}{2}} \times \\ \times \left(-\frac{\hbar \omega_{il}}{2T_i} \right)^{k+k'+3} \left(\frac{d}{dx} \right)^{k+k'+1} \left\{ \frac{1}{x} K_1(x) [e^x + e^{-x+\hbar \omega_{il}/T}] \right\}_{x=\frac{\hbar \omega_{il}}{2T_i}}, \quad (110)$$

$K_1(x)$ — уже встречавшаяся ранее модернизированная функция Ганкеля.

Матричные элементы оператора внутримолинового рассеяния на оптических фононах получаются из (110), если заменить $D_{il} q_{il}$ на $D_0 K$, частоту ω_{il} на ω_0 и опустить суммирование (сравнить с (2.43) и (102)).

Зная матричные элементы всех механизмов рассеяния, воспользуемся формулой (51) и определим в главных осях эллипсоида масс тензор подвижности электронов i -й долины. В этом определении будет учтено анизотропное примесное рассеяние и рассеяние на акустических фононах, а также изотропное рассеяние на оптических и междолинных фононах. Разумеется, вклад всех указанных механизмов рассеяния в величину подвижности не одинаков и не всегда нужно учитывать все типы рассеяния.

Покажем, как, зная подвижности в отдельных долинах, можно найти результирующую подвижность. Допуская для общности, что электронные температуры и концентрации в разных долинах могут различаться, запишем в главных осях i -й долины ее вклад в суммарный ток:

$$\mathbf{j}_{\perp}^{(i)} = en_i \mu_{\perp}(T_i) \mathbf{F}_{\perp}, \quad \mathbf{j}_{\parallel}^{(i)} = en_i \mu_{\parallel}(T_i) \mathbf{F}_{\parallel}, \quad (111)$$

или

$$\mathbf{j}^{(i)} = en_i \{ \mu_{\perp}(T_i) \mathbf{F} + [\mu_{\parallel}(T_i) - \mu_{\perp}(T_i)] (\mathbf{i}_0 \mathbf{F}) \mathbf{i}_0 \}, \quad (112)$$

где $\mathbf{i}_0$ — орт в направлении оси вращения эллипсоида энергии.

Перейдем теперь к лабораторной системе координат и спроектируем плотность тока (112) на l -ю ось этой системы, после чего просуммируем по всем долинам

$$\mathbf{j}_l = e \sum_i n_i \{ \mu_{\perp}(T_i) (\mathbf{F} \mathbf{l}_0) + [\mu_{\parallel}(T_i) - \mu_{\perp}(T_i)] (\mathbf{i}_0 \mathbf{F}) (\mathbf{l}_0 \mathbf{i}_0) \} \quad (113)$$

($\mathbf{l}_0$ — орт в направлении l -й оси). В безразогревном случае, когда все n_i равны друг другу и все электронные температуры T_i равны

решетчатой температуре T , имеем

$$j_l = en\mu_{\perp}(T)(F l_0) + \frac{1}{r} en(\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}) \sum_{i_0} (i_0 F)(i_0 l_0). \quad (114)$$

В германии четыре долины ($r = 4$) и компоненты ортов i_0 в главных кристаллографических осях имеют составляющие $\frac{1}{\sqrt{3}} [(111)]$, $\frac{1}{\sqrt{3}} [-1, 1, 1]$, $\frac{1}{\sqrt{3}} [1, -1, 1]$, $\frac{1}{\sqrt{3}} [-1, -1, 1]$, и, следовательно, сумма (114) равна

$$\sum_{i_0} (i_0 F)(i_0 l_0) = \frac{4}{3} (l_0 F).$$

Отсюда компонента тока j_l в $n - \text{Ge}$

$$j_l = \frac{1}{3} en(2\mu_{\perp} + \mu_{\parallel}) F_l,$$

и результирующая подвижность в слабом поле

$$\mu = \frac{1}{3} (2\mu_{\perp} + \mu_{\parallel}). \quad (115)$$

Легко проверить, что подвижность в $n - \text{Si}$ в слабом поле тоже определяется формулой (115). Таким образом, в кубических кристаллах, несмотря на анизотропию рассеяния, подвижность электронов и проводимость в слабом поле вырождаются (как упоминалось в начале главы) в скаляр. Это вырождение обусловлено симметричным расположением долин и иллюстрирует общетеоретические выводы о свойствах кубических кристаллов.

В сильном электрическом поле симметрия долин при произвольной ориентации поля нарушается (относительно этого поля), и вместе с ней результирующая подвижность из скалярной становится величиной тензорной. Рассмотрим это изменение, но предварительно еще раз вернемся к приближению электронной температуры и остановимся на его специфике в многодолинных полупроводниках.

§ 10. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

При концентрации носителей $n \gg n^{(e)}$ приближение электронной температуры способно, как было показано, достаточно точно и эффективно описать электрические свойства полупроводника с одной долиной носителей. В многодолинных полупроводниках ситуация осложняется тем, что по существу вместо одного кинетического уравнения приходится иметь дело с системой зацепляющихся

уравнений типа

$$e\mathbf{F} \frac{\partial f^{(i)}}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_a + \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_l + \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_e + \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_{op} + \\ + \sum_{j \neq i}' \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_j \quad (i = 1, 2, \dots, r). \quad (116)$$

Здесь в правой части представлены интегралы столкновений соответственно с акустическими фононами, примесными заряженными центрами, внутридолинными межэлектронными, а также с оптическими фононами и междолинными фононами.

Решение системы уравнений (116) приведет к разным функциям распределения в долинах, по-разному ориентированных относительно приложенного электрического поля. Поэтому их нельзя характеризовать единым параметром — единой электронной температурой. Посмотрим, насколько законно и обоснованно введение разных внутридолинных электронных температур.

В однодолинном полупроводнике электронная температура определялась из уравнения баланса мощности. Поступая аналогичным образом и здесь, запишем уравнение баланса мощности i -й долины. Для этого умножим (116) на энергию ε и проинтегрируем по всему пространству импульса

$$e \int \varepsilon \mathbf{F} \frac{\partial f^{(i)}}{\partial \mathbf{p}} d^3 \mathbf{p} = \int \varepsilon \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_L d^3 \mathbf{p} \equiv \mathcal{E}^{(i)}, \quad (117)$$

где $\left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_L$ — интеграл столкновений, равный сумме всех слагаемых правой части уравнения (116).

Левую часть уравнения (117) можно записать в виде

$$e \int \varepsilon \mathbf{F} \frac{\partial f^{(i)}}{\partial \mathbf{p}} d^3 \mathbf{p} = -e \int \mathbf{F} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} f^{(i)} d^3 \mathbf{p} = -e \int (\mathbf{v} \mathbf{F}) f^{(i)} d^3 \mathbf{p} = -\mathbf{j}^{(i)} \mathbf{F}.$$

Она представляет джоулевую мощность, отбираемую электронами i -й долины от источника тока. Очевидно, что равная ей правая часть (117) — это мощность, переданная электронами i -й долины решетке.

Запишем джоулевую мощность в главных осях тензора эффективных масс i -й долины

$$\sum_{i,j'} \sigma_{jj'}^{(i)} F_i F_{j'} = en_i [\mu_{\perp}^{(i)} F_{\perp}^2 + \mu_{\parallel}^{(i)} F_{\parallel}^2] = en_i \mu_{\perp}^{(i)} \left[F^2 + \frac{\mu_{\parallel}^{(i)} - \mu_{\perp}^{(i)}}{\mu_{\perp}^{(i)}} (\mathbf{i}_0 \mathbf{F})^2 \right], \quad (118)$$

$\mathbf{i}_0$ — орт в направлении оси вращения эллипсоида энергии i -й долины. Из формулы (118) видно, что мощность, затраченная источником тока на электроны i -й долины, определяется эффективным полем $\mathbf{F}^*(i)$:

$$F^{*2}(i) = F^2 + \frac{\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}}{\mu_{\perp}} (\mathbf{i}_0 \mathbf{F})^2, \quad (119)$$

значение которого зависит от взаимной ориентации векторов $\mathbf{i}_0$ и $\mathbf{F}$.

С другой стороны, непосредственно из интеграла столкновений, мощность $\mathcal{E}^{(i)}$ не зависит от эффективного поля, а определяется температурой электронов в долине, если такая имеет физический смысл. Ясно, что при произвольной ориентации поля удовлетворить одновременно уравнение (117) одной температурой во всех долинах не удастся. Возникает необходимость введения разных электронных температур.

При $n_i \gg n^{(e)}$ максвелловская функция $f_0^{(i)}(\epsilon)$ с внутридолинной электронной температурой T_i является хорошей приближенной функцией уравнения (117). На первый взгляд, однако, введение такой функции недопустимо по следующей причине. Выше мы неоднократно подчеркивали, что эффективная электронная температура имеет смысл только тогда, когда межэлектронный обмен энергией более быстрый, чем обмен при других взаимодействиях электронов. Поскольку сечение внутри- и междолинного столкновения электронов друг с другом одно и то же (по крайней мере при вычислении кулоновского рассеяния на плоских волнах), то представляется правдоподобным, что межэлектронное рассеяние электронов разных долин должно уравнивать их температуры во всех долинах.

Для оправдания различных электронных температур в долинах, хорошо описывающих эксперимент, в литературе высказывались предположения о том, что внутридолинное взаимодействие электронов друг с другом более интенсивно, чем междолинное (например, в работе [155]). Причиной такого различия могло быть, по мнению авторов, различие матричных элементов межэлектронного взаимодействия, рассчитанных на функциях Блоха и плоских волнах.

Были предприняты также попытки экспериментально обнаружить различие интенсивностей внутри- и междолинного межэлектронного взаимодействия [156]. Они показали, что если указанные матричные элементы и отличаются, то это отличие настолько незначительно, что не может служить оправданием для введения разных эффективных температур в разных долинах. Между тем широкое применение приближения внутридолинных электронных температур в полупроводниках Ge и Si [133] доказали эффективность такого приближения.

Покажем, что отмеченное противоречие является только кажущимся и что в действительности его нет. Нужно иметь в виду, что при $n \gg n^{(e)}$ и $n_i \gg n^{(e)}$ электронная температура в долинах определяется не только условием обращения в нуль внутридолинного интеграла межэлектронных столкновений (пропорционального квадрату концентрации)⁵⁸, но еще и уравнением баланса

⁵⁸ Равенство нулю межэлектронного интеграла столкновений служит (на это указывалось выше) лишь для определения $f_0^{(0)}(\epsilon)$. На асимметричную часть функции распределения внутридолинное межэлектронное рассеяние хотя и влияет, но никогда не является главным фактором, определяющим ее.

мощности (117). Последнее при разных эффективных полях (119) удовлетворяется разными электронными температурами в каждой долине. Одни долины больше нагреваются, другие меньше. При этом оказывается (это будет показано ниже), что само различие в электронных температурах горячих и холодных долин обратно пропорционально концентрации электронов в долинах. Поэтому $(\mathcal{E}^{(i)})_j \equiv \int \varepsilon \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_j d^3\mathbf{p}$ пропорционально только концентрации (а не ее квадрату), т. е. зависит от концентрации так же, как и решеточные механизмы рассеяния. Тем самым устраняется указанное выше противоречие: решеточные механизмы рассеяния поддерживают установление в каждой долине своих электронных температур. Естественно, рост общей концентрации электронов в полупроводнике сопровождается процессом выравнивания внутридолинных температур, частично за счет перераспределения электронов между долинами.

Воспользуемся теперь приближением внутридолинной электронной температуры для определения передачи энергии из одной долины в другую. Обратимся снова к уравнению баланса мощности. В этом уравнении внутридолинное рассеяние электронов друг на друге и их рассеяние на примесных ионах не связано с изменением энергии. Энергия, переданная акустическим фононам, была определена в (97), а переданная оптическим фононам без особого труда может быть найдена из общего вида интеграла столкновений (2.98). Наибольшую трудность в этом уравнении вызывает именно вычисление междолинной передачи энергии при взаимодействии электронов разных долин.

Мощность $(\mathcal{E}^{(i)})_j$, переданная единичному объему электронов i -й долины при их кулоновском взаимодействии с электронами j -й долины, записанная на основе интеграла Ландау (3.54), имеет вид

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{E}^{(i)})_j &\equiv \int \varepsilon \left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_j d^3\mathbf{p} = \\
 &= -B_e \sum_{k,l} \int \varepsilon \frac{\partial}{\partial p_k} \left[f_0^{(i)}(\varepsilon) \frac{\partial f_0^{(j)}(\varepsilon')}{\partial p_l'} - f_0^{(j)}(\varepsilon') \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial p_l} \right] \times \\
 &\quad \times \frac{\partial^2 |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|}{\partial v_k \partial v_l} d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{p}' = B_e \sum_{k,l} \int \left[f_0^{(i)}(\varepsilon) \frac{\partial f_0^{(j)}(\varepsilon')}{\partial p_l'} - \right. \\
 &\quad \left. - f_0^{(j)}(\varepsilon') \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial p_l} \right] v_k \frac{\partial^2 (|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|)}{\partial v_k \partial v_l} d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{p}'. \quad (120)
 \end{aligned}$$

Константа $B_e = 2\pi e^4 \ln \left(\frac{\rho_D}{b_0} \right)$ определена в (3.55).

Подставим в (120) максвелловские функции (35) и заметим, что

$$\frac{\partial f_0^{(i)}}{\partial p_l} = - \frac{v_l}{T_i} f_0^{(i)}(\mathbf{v}),$$

$$\sum_{k,l} v_k v'_l \frac{\partial^2}{\partial v_k \partial v_l} (|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|) = \frac{v^2 v'^2 - (\mathbf{v}\mathbf{v}')^2}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3}.$$

Мощность $(\mathcal{E}^{(i)})_j$ получается после этого такой ⁵⁹:

$$(\mathcal{E}^{(i)})_j = \frac{n^{(i)} n^{(j)}}{(2\pi)^3} \frac{m_{\perp}^2 m_{\parallel}}{(T_i T_j)^{3/2}} B_e \left(\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_j} \right) I. \quad (121)$$

Здесь

$$I = \int \exp \left[- \left(\frac{\varepsilon}{T_i} - \frac{\varepsilon}{T_j} \right) \right] \frac{v^2 v'^2 - (\mathbf{v}\mathbf{v}')^2}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3} d^3 \mathbf{v} d^3 \mathbf{v}', \quad (122)$$

I — это двухцентровый интеграл со сложной угловой зависимостью.

Для его вычисления воспользуемся разложением

$$\frac{v^2 v'^2 - (\mathbf{v}\mathbf{v}')^2}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3} =$$

$$= \begin{cases} v' \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{v'}{v} \right)^l \frac{l(l+1)}{2l+1} [P_{l-1}(\cos \vartheta) - P_{l+1}(\cos \vartheta)], & v' < v, \\ v \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{v}{v'} \right)^l \frac{l(l+1)}{2l+1} [P_{l-1}(\cos \vartheta) - P_{l+1}(\cos \vartheta)], & v' > v, \end{cases} \quad (123)$$

где $P_l(x)$ — полиномы Лежандра; ϑ — угол между $\mathbf{v}$ и $\mathbf{v}'$.

Разложение (123) позволяет выполнить интегрирование в (120) по азимутальным углам. Выберем в качестве полярной оси ось вращения i -го эллипсоида и выразим $P_l(\cos \vartheta)$ по теореме сложения полиномов Лежандра (см. [86]) через функции углов ϑ_i и ϑ'_i между этой осью и $\mathbf{v}$, $\mathbf{v}'$ соответственно. Интегрирование по азимутальному углу (от азимутальных углов подынтегральное выражение не зависит) даст $2\pi P_l(\cos \vartheta_i) P_l(\cos \vartheta'_i)$. Далее целесообразно снова воспользоваться теоремой сложения и выразить $P_l(\cos \vartheta'_i)$ через функции от угла ϑ_{ij} между осями вращения i -го и j -го эллипсоидов и угла ϑ'_j между $\mathbf{v}'$ и осью вращения j -го эллипсоида. Интегрирование по второму азимутальному углу даст $2\pi P_l(\cos \vartheta'_j) \times$

⁵⁹ При интегрировании (120) мы приняли по аналогии с (2.63), что минимальное значение параметра прицельного расстояния сталкивающихся электронов определяется их средней кинетической энергией, т. е. $b_0 = \frac{e^2}{3T_e}$. Поскольку различие температур в долинах не велико, а b_0 стоит под знаком логарифма, ошибка от такого допущения, очевидно, невелика.

$\times P_l(\cos \vartheta_{ij})$. В результате интеграл I получится таким:

$$I = (2\pi)^2 \sum_{l=0}^{\infty} \frac{l(l+1)}{2l+1} \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dx' [P_{l-1}(x) P_{l-1}(x') P_{l-1}(x_{ij}) - \\ - P_{l+1}(x) P_{l+1}(x') P_{l+1}(x_{ij})] \int_0^{\infty} e^{-\psi_i(x)v^2} v^2 dv \times \\ \times \left\{ \frac{1}{v^l} \int_0^v e^{-\psi_j(x')v'^2} v'^{l+3} dv' + v^{l+1} \int_v^{\infty} e^{-\psi_j(x')v'^2} \frac{dv'}{v'^{l-2}} \right\}. \quad (124)$$

Здесь $x_{ij} = \cos \vartheta_{ij}$ — косинус угла между осями вращения эллипсоидов, и

$$\psi_j(x) = \frac{m_{\perp}}{2T_j} \left[1 + \frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{m_{\perp}} x^2 \right].$$

Функции $\psi_i(x)$ и $\psi_j(x')$ четные. Поэтому интегрирование (124) по x и x' обращает в нуль все нечетные полиномы Лежандра. Интеграл I равен

$$I = \sum_{k=0}^{\infty} I_{2k} P_{2k}(x_{ij}). \quad (125)$$

В частности, коэффициент I_0 имеет вид [157]:

$$I_0 = \frac{16\sqrt{2}}{3} \pi^{5/2} \frac{T_i T_j}{m_{\perp}^2 m_{\parallel} (m_{\parallel} - m_{\perp})^{1/2}} \times \\ \times \left\{ \frac{2m_{\parallel} + m_{\perp}}{(m_{\perp} m_{\parallel})^{1/2}} \left[T_j^{3/2} \operatorname{arctg} \left(\frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{m_{\perp}} \frac{T_i}{T_i + T_j} \right)^{1/2} + \right. \right. \\ \left. \left. + T_i^{3/2} \operatorname{arctg} \left(\frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{m_{\perp}} \frac{T_j}{T_i + T_j} \right)^{1/2} \right] - \frac{m_{\parallel} [2(T_i + T_j)^2 - 3T_i T_j]}{\sqrt{m_{\perp} (m_{\parallel} - m_{\perp}) (T_i + T_j)^{1/2}}} \times \right. \\ \left. \times \operatorname{arctg} \left(\frac{(m_{\parallel} - m_{\perp})(T_i T_j)^{1/2}}{\sqrt{m_{\parallel} m_{\perp}} (T_i + T_j)} \right) - \left(\frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{m_{\parallel}} \right)^{1/2} \sqrt{T_i T_j (T_i + T_j)} \right\}. \quad (126)$$

Такой же вид (но еще более громоздкий) имеют следующие коэффициенты ряда (125). Мы поэтому их не приводим, хотя все они выражаются в элементарных функциях. Численные оценки с характерными для n — Ge и n — Si значениями $m_{\perp}$ и $m_{\parallel}$ показали малость этих коэффициентов по сравнению с I_0 .

Если положить $m_{\parallel} = m_{\perp} = m$, то из (121) и (126) следует

$$(\mathcal{E}^{(i)})_j = - \frac{2^{3/2} B_e n^{(i)} n^{(j)}}{(\pi m)^{1/2} (T_i + T_j)^{3/2}} (T_i - T_j). \quad (127)$$

Для газоразрядной плазмы, состоящей из двух сортов частиц со скалярными массами m_1, m_2 и температурами T_1, T_2 , известно выражение мощности, передаваемой при кулоновском взаимодействии частицами сорта «1» частицам сорта «2». Выражение это, впервые полученное Спитцером и независимо Коганом [157], в наших обозначениях имеет вид

$$(\mathcal{E}^{(1)})_2 = - \frac{2^{3/2} B_e n^{(1)} n^{(2)} (m_1 m_2)^{1/2}}{\pi^{1/2} (m_1 T_2 + m_2 T_1)^{3/2}} (T_1 - T_2). \quad (128)$$

При $m_1 = m_2 = m$ формулы (127) и (128) полностью совпадают. Таким образом, полученные здесь формулы (121) и (126) представляют собой обобщение формулы (128) на систему с заряженными частицами, обладающими тензорной эффективной массой.

В качестве примера оценим влияние междолинного кулоновского взаимодействия носителей в многодолинном полупроводнике $n - \text{Ge}$. Для расчета возьмем концентрацию электронов $n = 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. При таких условиях можно с достаточной точностью считать, что подвижность определяется в основном их взаимодействием с акустическими фононами. Пренебрежем пока эффектом перезаселения долин (он ниже также будет рассмотрен).

Пусть греющее носители поле направлено вдоль оси [111] кристалла. В соответствии с (119) эффективное поле в долине с осью, параллельной полю $\vec{F}$, равно $F_1^* = \left(\frac{\mu_{\parallel}}{\mu_{\perp}} \right)^{1/2} F$. В остальных трех долинах оно будет одинаковым и равным $F_2^* = \frac{1}{3} \times \left(8 + \frac{\mu_{\parallel}}{\mu_{\perp}} \right)^{1/2} F$. Так как в германии $\left(\frac{\mu_{\parallel}}{\mu_{\perp}} \right) \ll 1$, то самым слабым эффективным полем оказывается поле в долине [111]. Она будет относительно «холодной», а остальные три — «нагретыми» одинаково.

Запишем систему уравнений баланса мощности для определения электронных температур в долинах. Учтем потери энергии электронов внутри долин на взаимодействие с акустическими и оптическими фононами. Воспользуемся формулой (97), а потерю энергии при взаимодействии с оптическими фононами, учтя (2.98), запишем так⁶⁰:

$$(\mathcal{E}^{(i)})_{\text{оп}} = - \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{m_{\perp} m_{\parallel}^{1/2}}{\pi \rho \hbar^2} D_0^2 K^2 T_i^{1/2} n^{(i)} N_0 \times \\ \times \left[\exp \left(\frac{\hbar \omega_0}{T} - \frac{\hbar \omega_0}{T_i} \right) - 1 \right] \frac{\hbar \omega_0}{2 T_i} e^{\hbar \omega_0 / 2 T_i} K_1 \left(\frac{\hbar \omega_0}{2 T_i} \right). \quad (129)$$

⁶⁰ Во избежание недоразумений напомним, что в формуле (129) K определяет вектор обратной решетки, введенный в (2.42), а K_1 — это модифицированная функция Ганкеля первого порядка.

Имея в виду явный вид выражений (2.98), (97), (121) и (117), представим следующим образом уравнения баланса мощности:

$$\left. \begin{aligned} eF \int \varepsilon \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \mathbf{p}} d^3 \mathbf{p} &= (\mathcal{E}^{(1)})_a + (\mathcal{E}^{(1)})_{оп} + 3 (\mathcal{E}^{(1)})_2, \\ eF \int \varepsilon \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{p}} d^3 \mathbf{p} &= (\mathcal{E}^{(2)})_a + (\mathcal{E}^{(2)})_{оп} - (\mathcal{E}^{(1)})_2. \end{aligned} \right\} \quad (130)$$

В (130) отражено то, что в «холодную» долину (обозначенную индексом «1») межэлектронным взаимодействием передается энергия из трех более нагретых долин (обозначенных индексом «2»).

Решение системы (130) проще всего, по-видимому, искать следующим образом. Прежде всего из двух уравнений (130) нужно исключить электрическое поле F . Это даст уравнение, связывающее температуры T_1 и T_2 . Задав в нем одну из температур, можно найти другую. Далее, уже из известного соотношения между T_1 и T_2 находится их зависимость от поля. Она для рассмотренного нами конкретного случая представлена на рис. 23. Значения упругих констант принимались такими, как в работе [115].

Из рис. 23 видно, что уже при полях порядка 100 В/см электронная температура T_1 в «холодной» долине (кривая 1) заметно меньше, чем в других долинах. Она, однако, намного больше температуры, которая была бы у электронов этой долины при отсутствии междолинной передачи энергии. Штриховая кривая на рис. 23, определяющая полевую зависимость электронной температуры долины 1, полученную без учета такой передачи энергии, наглядно это иллюстрирует.

Стоит обратить внимание на то, что наибольшее относительное различие между кривыми 1 и штриховой имеет место в области относительно небольших полей. С ростом поля оно уменьшается, поскольку эффективность межэлектронного взаимодействия,

а значит, и эффективность передачи энергии (с ростом средней энергии электронов) уменьшаются. В сильном поле изменится также соотношение между кривыми 1 и 2 из-за неучтенного здесь эффекта перераспределения концентраций электронов в долинах.

Кривые на рис. 23 получены в предположении, что рассеяние импульса электронов определяется внутридолинным взаимодействием с акустическими фононами. В работе [158] учтено также рассеяние на оптических и междолинных фононах. Расчет этот подтвер-

Рис. 23. Зависимость электронной температуры в «холодной» (1) и «нагретой» (2) долинах

n — Ge от греющего поля. Здесь $\tau = \frac{T_{1,2}}{T}$; T — температура решетки.

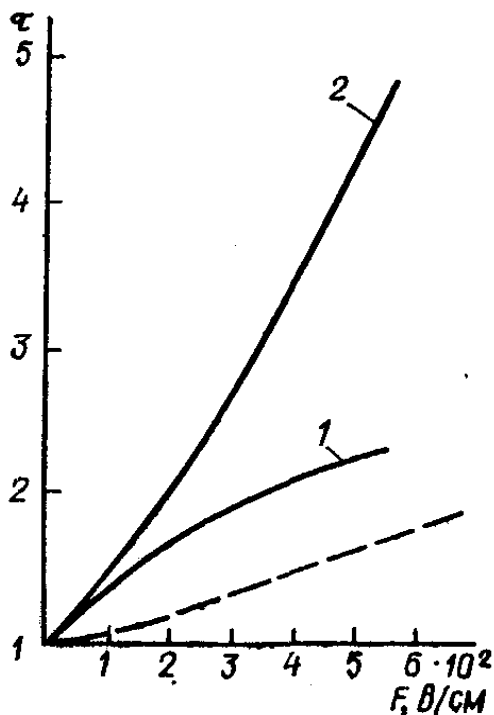
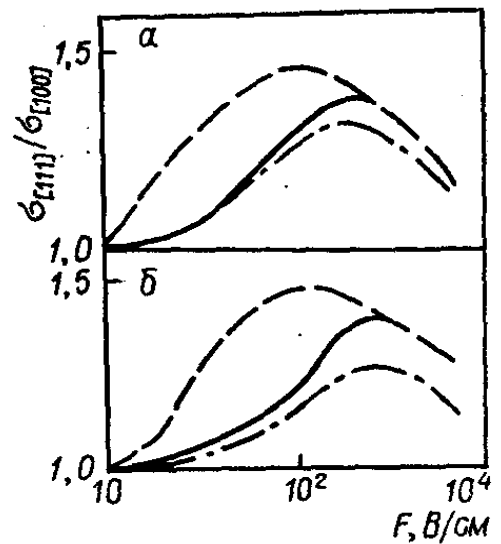


Рис. 24. Отношение проводимостей $\frac{\sigma_{[111]}}{\sigma_{[100]}}$ n —

— Si в зависимости от поля (сплошная кривая вычислена с учетом междолинного взаимодействия, штриховая — вычислена без этого учета, штрихпунктирная — экспериментальная):

a — $\rho = 1 \text{ Ом} \cdot \text{см}$; b — $\rho = 0,3 \text{ Ом} \cdot \text{см}$.



дил важную роль именно кулоновской передачи мощности. В частности, он показал, что при концентрации электронов $n \geq 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ междолинная передача энергии кулоновским взаимодействием электронов уменьшает в германии анизотропию проводимости: в формуле $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_0 [\hat{I} + \beta (\hat{I} + \hat{\gamma}\Gamma) F^2]$

константа γ уменьшается в 1,5—2 раза. Здесь $\hat{I}$ — единичный тензор, Γ — диагональный тензор, компоненты которого зависят от угла между F и кристаллографической осью.

Экспериментально рассмотренная здесь междолинная перекачка энергии исследовалась в работе [158a] в широком диапазоне концентраций примесей (донорного и акцепторного типа). В работе [158] изучалась проводимость и анизотропия проводимости n — Si при 77 К. На рис. 24 приведены полученные зависимости отношения $\sigma_{[111]} : \sigma_{[100]}$ от F в направлениях [111] и [100]. Из рис. 24 видно, что значительное расхождение между теоретическими кривыми, вычисленными без учета и с учетом междолинного взаимодействия электронов, существенно уменьшается, если учесть обмен энергией между электронами разных долин. Нужно еще иметь в виду, что в n — Si заметную роль играет междолинная передача энергии путем взаимодействия электронов с междолинными фононами. Она изменяет заселенность долин и отражается, в свою очередь, на кулоновской передаче энергии и внутридолинной температуре.

Таким образом, из данных эксперимента и теоретического анализа следует, что: 1) межэлектронная передача энергии играет важную роль в энергетическом балансе долин; 2) учет этой передачи энергии особенно важен в области небольших полей и температур решетки, куда он вносит относительно наибольшую поправку в энергетический баланс долин и проводимость; 3) при полях, превышающих некоторое «критическое» поле из-за уменьшения сечения кулоновского взаимодействия, роль междолинной передачи энергии электронами уменьшается и отношение $\sigma_{[111]} : \sigma_{[100]}$ стремится к единице.

Рассмотренные в § 2 закономерности эффекта Сасаки качественно согласуются с настоящими выводами (см. также [159]). Мы познакомимся сейчас еще с одним эффектом, также подтверждающим эти выводы.

§ 11. ВЛИЯНИЕ МЕЖЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ВОЗНИКНОВЕНИЕ ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ПОПЕРЕЧНОЙ ПРОВОДИМОСТИ

Выше шла речь об анизотропии проводимости в сильном электрическом поле. Оказывается, что анизотропия в полупроводниках кубической структуры может возникнуть и в слабом поле, если перпендикулярно к нему приложено греющее носители поле [160]. Значение проводимости в слабом поле зависит от взаимной ориентации полей относительно кристаллографических осей образца и от величины греющего поля. Эрлбах [161] впервые указал на возможность возникновения в этом случае даже отрицательной проводимости в направлении, перпендикулярном греющему полю.

Мы не станем здесь останавливаться на работах, ставивших своей целью экспериментально обнаружить эффект, предсказанный Эрлбахом. Во всяком случае, эффект должен быть непосредственно связан с неустойчивостями, возникающими в полупроводниках, к которым приложено сильное электрическое поле. В таком поле и при симметричной ориентации его относительно электронных долин может, согласно теоретическим предсказаниям [162], возникнуть многозначный эффект Сасаки. Многозначность обусловлена флуктуациями электронной концентрации в долинах, вызывающими поперечную э. д. с. Сасаки и дальнейшее перераспределение электронов.

Согласно работе [163], флуктуационные процессы эффективны лишь в разомкнутой цепи, поперечной к цепи греющего поля. Если поперечная цепь замкнута, то ток в ней подавляет флуктуации и уже при слабом поперечном поле возникнут аномалии анизотропии, а возможно, и поперечная отрицательная проводимость $\sigma_{\perp} < 0$. В работе [163] действительно была обнаружена отрицательная поперечная проводимость в чистом n — Ge при продольном сжатии его в направлении [110].

Чтобы понять причину возникновения отрицательной поперечной проводимости и ее основные особенности, ограничимся рассмотрением наиболее простого случая. Пусть к однородному монокристаллическому n — Ge приложено греющее электрическое поле F в направлении [100] и поле $E \ll F$ в направлении [010]. При такой ориентации полей⁶¹ в полупроводнике образуются две пары неэквивалентных долин: долины «1», оси вращения которых параллельны направлениям [111], $[-1, -1, 1]$, и долины «2» с другим эффективным полем, параллельным направлениям $[-1, 1, 1]$, $[1, -1, 1]$. Считая, как и выше, концентрации носителей достаточными для максвеллизации внутридолинных функций распределения, определим электронные температуры T_1

⁶¹ Мы не останавливаемся на способах экспериментальной реализации однородных полей $F \perp E$. Одним из таких способов мог бы быть, например, бесконтактный метод определения тока Δj .

и T_2 в каждой из пар долин. Для этого воспользуемся формулами (112), (114) и (115), которые будем теперь рассматривать как нулевое по E приближение, и вычислим поправку Δj к суммарному току (113) в следующем — линейном по E — приближении. Она из (113) (при замене F на $F + E$) получается такой:

$$\Delta j = en\mu E + \frac{1}{3} enF\Delta T \frac{E}{E} \frac{\partial}{\partial T_e} (\mu_{\perp}^{(0)} - \mu_{\parallel}^{(0)}) - \frac{4}{3} e\Delta n (\mu_{\perp}^{(0)} - \mu_{\parallel}^{(0)}) F \frac{E}{E}. \quad (131)$$

Здесь $\mu_{\perp}^{(0)}$, $\mu_{\parallel}^{(0)}$ — подвижности при $E = 0$ и, следовательно, одинаковые во всех долинах, а производная по электронной температуре берется при значении T_e , соответствующем $E = 0$. В формуле учтено, что из-за различия электронных температур в долинах $T_1 = T_e - \Delta T$, $T_2 = T_e + \Delta T$ и электронные концентрации также различны: $n_1 - n_2 = \Delta n$. При фононном механизме междолинной релаксации и принятом направлении полей F , E , $\Delta n > 0$. Так как включение слабого поля E не изменяет полной концентрации электронов n , то $\Delta n^{(i)}$ в неэквивалентных долинах отличаются только знаком. Значения Δn и ΔT должны быть найдены из уравнений баланса концентрации и мощности в долинах.

Уравнение баланса мощности в i -й долине было определено в (117). Запишем его здесь с учетом слабого поля E :

$$(\mathcal{E}^{(i)})_a + (\mathcal{E}^{(i)})_{оп} + (\mathcal{E}^{(i)})_j = j^{(i)} (F + E) \quad (i, j = 1, 2). \quad (132)$$

Левая часть этого уравнения задана выражениями (97), (129) и (121). В нулевом приближении по слабому полю она запишется в виде

$$(\mathcal{E}_0^{(i)})_a + (\mathcal{E}_0^{(i)})_{оп} \equiv \mathcal{E}_0^{(i)} = \frac{1}{4} n\mu(T_e) F^2, \quad (133)$$

где μ — подвижность (115), зависящая от электронной температуры T_e в поле F , и $\frac{n}{4}$ — концентрация носителей в долине, одинаковая во всех долинах при $E = 0$ из-за симметричной ориентации поля F .

В первом приближении по E из (132) для долин типа «1» и «2» получаются такие уравнения:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\mathcal{E}_0^{(1)})_L}{\partial T_e} \Delta T_1 + \frac{n^2 m_{\perp}^2 m_{\parallel}}{128\pi^3} \frac{\Delta T_2 - \Delta T_1}{T_e^5} B_e I_0^{(0)} = \\ & = \frac{en}{4} \left[\frac{d\mu}{dT_e} F^2 \Delta T_1 + \frac{2}{3} (\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}) FE \right], \\ & \frac{\partial (\mathcal{E}_0^{(2)})_L}{\partial T_e} \Delta T_2 + \frac{n^2 m_{\perp}^2 m_{\parallel}}{128\pi^3} \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{T_e^5} B_e I_0^{(0)} = \end{aligned} \quad (134)$$

$$= \frac{en}{4} \left[\frac{d\mu}{dT_e} F^2 \Delta T_2 - \frac{2}{3} (\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}) FE \right].$$

По смыслу определения первого приближения здесь $I_0^{(0)}$ — функция (126) от аргументов $T_1 = T_2 = T_e$.

К выводу системы (134) необходимо сделать следующее разъяснение. Включение дополнительного к $\mathbf{F}$ поля $\mathbf{E}$ изменяет в долинах не только температуру электронов, но и их концентрацию. Поэтому казалось бы, что уравнения баланса концентрации и мощности должны быть связаны друг с другом и нельзя отдельно находить ΔT без одновременного определения Δn . В общем случае это действительно так. Тем не менее в нашем частном случае система (134) остается справедливой в линейном по E приближении. Чтобы убедиться в этом, достаточно разделить все члены уравнения (132) на концентрацию $n^{(i)}$, после чего $n^{(i)}$ остается только в слагаемом $\mathcal{E}_j^{(i)}/n^{(i)}$, которое согласно (121) само пропорционально ΔT , т. е. пропорционально параметру малости. В линейном приближении в него вместо $n^{(i)}$ должно войти среднее значение концентрации $\frac{1}{4} n$. Имея это в виду, мы и считали, что в (132) концентрация $n^{(i)} = \frac{1}{4} n$ и ток $\mathbf{j}^{(i)}$, с точностью до линейных по E членов в долинах «1» и «2», согласно (112) определяется в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^{(1)} &= \frac{1}{4} en \left\{ \mu_{\perp} (\mathbf{F} + \mathbf{E}) \pm \frac{1}{\sqrt{3}} (\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}) (F + E) \mathbf{i}_0^{(1)} \right\}, \\ \mathbf{j}^{(2)} &= \frac{1}{4} en \left\{ \mu_{\perp} (\mathbf{F} + \mathbf{E}) \pm \frac{1}{\sqrt{3}} (\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}) (F - E) \mathbf{i}_0^{(2)} \right\}. \end{aligned} \quad (135)$$

Из системы (134) непосредственно следуют равенства $\Delta T_1 = -\Delta T_2 \equiv -\Delta T$, доказывающие справедливость утверждения, что изменения электронных температур в долинах «1» и «2» отличаются только знаком. Само значение ΔT получается таким:

$$\Delta T = \frac{en (\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}) FE}{6 \left[\frac{n^2 m_{\perp}^2 m_{\parallel}}{64 \pi^3 T_e^5} B_e I_0^{(0)} - \mu \frac{d}{dT_e} \left(\frac{(\mathcal{E}_0^{(1)})_L}{\mu} \right) \right]}. \quad (136)$$

Для определения Δn воспользуемся уравнением баланса носителей в неэквивалентных долинах

$$\int f^{(1)}(\mathbf{p}) \frac{d^3 \mathbf{p}}{\tau_{12}(\varepsilon)} = \int f^{(2)}(\mathbf{p}) \frac{d^3 \mathbf{p}}{\tau_{21}(\varepsilon)}, \quad (137)$$

где $\tau_{12}(\varepsilon) = \tau_{21}(\varepsilon)$ — время междолинной релаксации. Примем, что единственным механизмом перераспределения электронов в долинах является их взаимодействие с междолинными фононами $\hbar \omega_m$. При низких температурах решетки (когда только и имеет место рассматриваемый эффект) $\tau_{12}(\varepsilon)$ намного больше всех характерных времен релаксации и поэтому междолинные переходы происходят сравнительно редко. Они не могут заметно сказаться

на энергетическом балансе долин, и в уравнении баланса мощности (132) мы их не учитывали. Они, однако, заметно влияют на концентрации в долинах, а значит и на величину тока Δj (131).

Обратное время релаксации τ_{12}^{-1} в рассматриваемой ситуации только двух неэквивалентных долин при фиксированных T и F можно в соответствии с (107) представить в виде

$$\tau_{12}^{-1}(\varepsilon) = \text{const} \{ (\varepsilon + \hbar\omega_M)^{1/2} + e^{\hbar\omega_M/T} (\varepsilon - \hbar\omega_M)^{1/2} \Delta(\varepsilon - \hbar\omega_M) \}. \quad (138)$$

Подставив это выражение в уравнение (137), найдем отношение электронных концентраций в долинах «2» и «1»⁶²:

$$\begin{aligned} \frac{n_2}{n_1} = & \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{\hbar\omega_M}{2T_1} - \frac{\hbar\omega_M}{2T_2} \right) \times \\ & \times \frac{K_1 \left(\frac{\hbar\omega_M}{2T_1} \right) \left[1 + \exp \left(\frac{\hbar\omega_M}{T} - \frac{\hbar\omega_M}{T_1} \right) \right]}{K_1 \left(\frac{\hbar\omega_M}{2T_2} \right) \left[1 + \exp \left(\frac{\hbar\omega_M}{T} - \frac{\hbar\omega_M}{T_2} \right) \right]}. \end{aligned} \quad (139)$$

При достаточно низких температурах решетки, когда $\hbar\omega_M \gg T_e$, можно, воспользовавшись асимптотическим разложением модернизированных функций Ганкеля [86], упростить (139). Если к тому же имеет место неравенство $(\hbar\omega_M/T_e)(\Delta T/T_e) \ll 1$, то $\frac{n_2}{n_1}$ еще более упрощается и $\frac{\Delta n}{n}$ принимает значение

$$\frac{\Delta n}{n} = \frac{\hbar\omega_M}{4T_e} \cdot \frac{\Delta T}{T_e}. \quad (140)$$

Формулы (136), (139), (140) полностью определяют ток Δj , а значит, и проводимость $\sigma_{\perp}$ в направлении слабого поля E . Последняя согласно (131) зависит от напряженности греющего поля F и полной концентрации n . Зависимость эта существенно нелинейная, поскольку и электронная температура T_e и подвижность μ сложным образом зависят от F .

На рис. 25 представлены вычисленные при разных температурах решетки и электронных концентрациях отношения поперечной проводимости $\sigma_{\perp} F$ к продольной $\sigma_{\parallel} (F)$ в зависимости от продольного поля F . Температура электронов находилась по формуле (133). Подвижность вычислялась с учетом анизотропного рассеяния на акустических фононах и примесных центрах. Концентрация последних принималась равной концентрации электронов.

Из приведенных кривых на рис. 25 видно, что при достаточно низких температурах решетки имеется область полей F , где поперечная проводимость отрицательна. Характерно, что эта область полей сужается с возрастанием температуры решетки

⁶² В уравнении баланса концентраций (137) весьма существен вид распределения электронов с энергией $\varepsilon > \hbar\omega_M$. Максвелловская функция, которой мы пользуемся, вносит некоторую погрешность в значение (139). Эта погрешность, однако, не изменит качественных выводов, приведенных ниже.

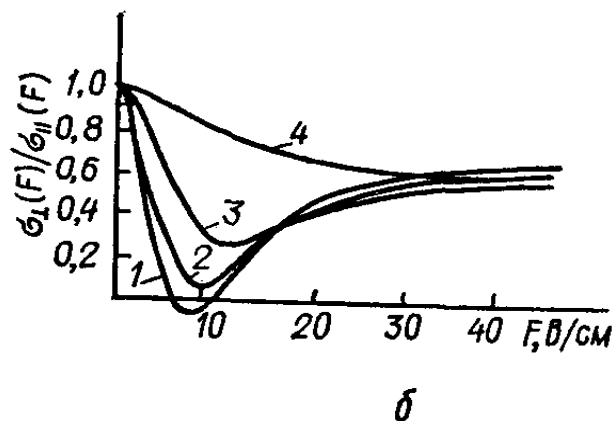
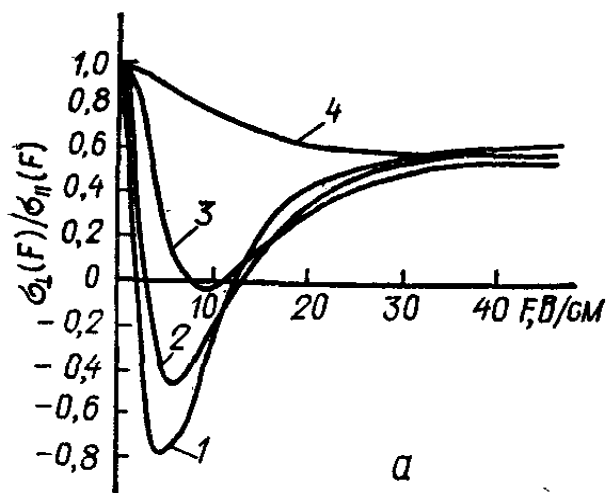


Рис. 25. Отношение поперечной $\sigma_{\perp}(F)$ проводимости к продольной $\sigma_{\parallel}(F)$ в n -Ge в зависимости от напряженности поля; концентрация электронов см^{-3} :

$a - 10^{11}$, $b - 10^{12}$; $\frac{\hbar\omega_0}{T}$: 1 — 40, 2 — 30, 3 — 20, 4 — 10.

и концентрации n . Начиная с некоторых значений температуры решетки T_K и электронной концентрации n_K , отрицательная поперечная проводимость исчезает при любых F .

В сильных продольных полях, при которых взаимодействие с оптическими фононами играет существенную роль в определении электронной температуры, отношение $\sigma_{\perp}(F)/\sigma_{\parallel}(F)$ стремится к значению, не зависящему от электронной концентрации и даже температуры решетки. Само значение $\sigma_{\perp}$, конечно, зависит от n (концентрации примесей). Это видно из рис. 26. При рассмотренных концентрациях, начиная с полей 20 В/см, проводимость $\sigma_{\perp}$ практически уже не зависит от F , хотя $\sigma_{\perp}(F)/\sigma(0)$ заметно различаются при разных n .

Положительность $\sigma_{\perp}$ в поле, при котором энергоотдача электронов определяется их взаимодействием с оптическими фононами, доказывается выражениями (131), (136), (139). Поэтому для

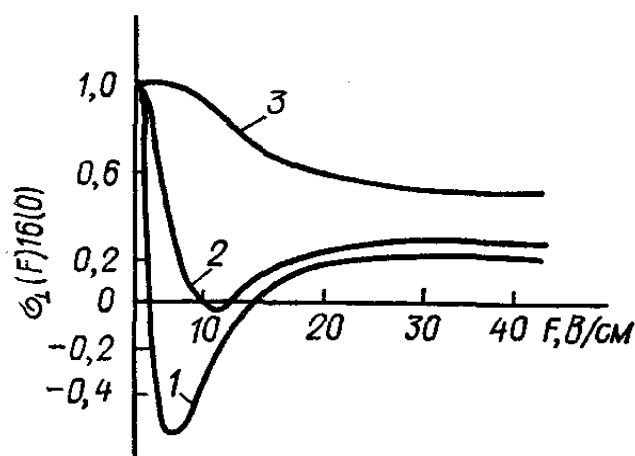


Рис. 26. Зависимость отношения поперечной проводимости к омической в n -Ge от поля при $\frac{\hbar\omega_0}{T} = 40$; n :

1 — 10^{11} , 2 — 10^{12} , 3 — 10^{13} см^{-3} .

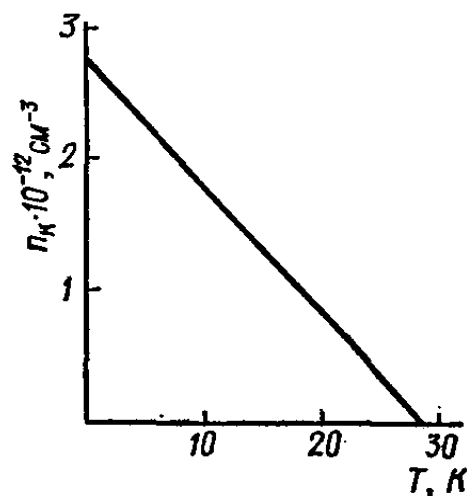


Рис. 27. Зависимость «критической» электронной концентрации от «критической» температуры решетки.

качественного анализа условий возникновения отрицательных $\sigma_{\perp}$ достаточно учесть энергоотдачу электронов одним лишь акустическим фононам. Она определена в (97). При этом Δj (131) запишем так:

$$\Delta j = en\mu E \left\{ 1 - \frac{(T_e - T)(\hbar\omega_M - s_1 T_e)}{\beta \left[\left(\frac{3}{2} - s \right) T_e^2 - \left(\frac{1}{2} - s \right) T_e T + \frac{nB_e I_0^{(0)}}{T_e^{7/2} C_M} \right]} \right\}. \quad (141)$$

Здесь обозначено:

$$C_M = \frac{64 \sqrt{2\pi} \Xi_d^2 \left[\frac{2}{3} + \frac{m_{\parallel}}{3m_{\perp}} \left(1 + \frac{\Xi_u}{\Xi_d} \right)^2 \right]}{m_{\perp}^{1/2} \hbar^4 \rho}, \quad \beta = \frac{1}{2} \left(\frac{3\mu}{\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}} \right)^2,$$

$$s = \frac{T_e \partial \mu}{\mu \partial T_e}, \quad s_1 = T_e \frac{\partial}{\partial T_e} \ln(\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}).$$

$$I_0^{(0)} = I_0 \text{ при } T_i = T_j = T_e; \quad (I_0^{(0)} \propto T_e^{7/2}).$$

Согласно (141) отрицательная поперечная проводимость может иметь место, когда второе слагаемое станет больше единицы. Это требует удовлетворения неравенству

$$aT_e^2 - bT_e + c \leq 0, \quad (142)$$

где ⁶³

$$a = \beta \left(\frac{3}{2} - s \right) + s_1, \quad b = \beta T \left(\frac{1}{2} - s \right) + s_1 T + \hbar\omega_M,$$

$$c = \beta \frac{nB_e I_0^{(0)}}{T_e^{7/2} C_M} + T \hbar\omega_M.$$

Неравенство (142) определяет область значений T_e , а значит, и область значений напряженности продольного электрического поля F , в которой возникают отрицательные $\sigma_{\perp}$. «Критические» значения T_{ek} , т. е. значения на границах указанной области (области неустойчивости)

$$T_{ek} = \frac{1}{2a} [b \pm (b^2 - 4ac)^{1/2}], \quad (143)$$

зависят от концентрации электронов и температуры решетки. С увеличением T и n «критические» значения T_{ek} приближаются друг к другу.

Чтобы T_{ek} имело реальное значение, должно удовлетворяться условие $b^2 \geq 4ac$. Оно связывает критические значения электронной концентрации n_k и температуры решетки T_k , выше которых поперечная неустойчивость не может иметь места. Зависимость n_k от T_k практически получилась линейной, что

⁶³ В области, где преобладает взаимодействие электронов с акустическими фононами, величины $a, b, c > 0$. Для качественного анализа неравенства (142) они могут считаться не зависящими от T_e , т. е. от поля F .

иллюстрируется рис. 27. Отсюда все значения n и T , выходящие за пределы треугольника рис. 27, соответствуют положительным $\sigma_{\perp}$ при любых греющих полях F .

С ростом температуры решетки и электронной концентрации уменьшается и в конце концов исчезает интервал полей, при которых возможно появление поперечной отрицательной проводимости. Этот интервал ограничен условием $F_{k1} \leq F \leq F_{k2}$, где F_{k1} и F_{k2} — некоторые «критические» поля, зависящие от n и T . Необходимость того, чтобы поле F было больше F_{k1} , связана с тем, что отрицательная поперечная проводимость является существенно нелинейным эффектом и поэтому может возникнуть, только начиная с определенных значений греющего поля. Когда же F превышает второе предельное значение F_{k2} , разогрев электронов во всех долинах становится сравнительно большим и при этом уменьшается относительное различие концентраций в неэквивалентных долинах. Оно и направлено на получение положительных значений $\sigma_{\perp}$.

Межэлектронное взаимодействие, как видим, весьма существенно влияет на условия возникновения отрицательной поперечной проводимости. Это влияние проявляется главным образом в кулоновской передаче энергии из более нагретых долин в менее нагретые. Иначе говоря, межэлектронное взаимодействие направлено на выравнивание электронных температур в долинах, а значит, и на выравнивание электронных концентраций. Таким образом, можно сказать, что оно действует в направлении стабилизации полупроводника. При электронных концентрациях $n > n_{\max}$ (см. рис. 27) отрицательная поперечная проводимость не может возникнуть ни при каких греющих полях и температурах решетки.

В атомарных полупроводниках отрицательная проводимость может еще возникнуть по причине, аналогичной эффекту Ганна, упоминавшемуся в первой главе. Напомним, что в зоне проводимости германия, кроме нижайших в энергетическом отношении долин, центры которых расположены на границе зоны Бриллюэна в точках L (см. рис. 1), имеются еще более высоко расположенные долины, и в частности долины, центр которых находится в точках $k = 0$ (см. рис. 8). Переход электронов под влиянием поля в эти долины, в принципе, может привести к появлению неустойчивости.

Гаммер [164] рассмотрел в n — Ge переходы из долин $[111]$ в долины $[100]$. В его задаче греющее поле было направлено по оси кристалла $[110]$ и слабое — по $[001]$. Расчет, выполненный по методу Монте — Карло, показал, что при комнатной температуре неустойчивость не получается. При 77 К Гаммером была получена отрицательная поперечная дрейфовая скорость при тянущем поле $\sim 10^3$ В/см и поперечном поле ~ 10 В/см. Мы ограничимся этими сведениями, так как более подробно остановиться на работе [164] и других (например, [165]) здесь нет возможности.

ПОЛЯРНЫЕ
ПОЛУПРОВОДНИКИ§ 1. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ
С КОЛЕБАНИЯМИ РЕШЕТКИ

Атомы веществ, образующих кристаллическую решетку таких широко применяемых в различных областях науки и техники полупроводников, как $A_{III}B_V$ и $A_{II}B_{VI}$, находятся частично в ионном состоянии. Хотя, как правило, эффективный заряд этих ионов меньше элементарного, тем не менее их колебания (колебания дипольного характера) оказываются важным механизмом рассеяния электронов. Основные характеристики этого механизма — механизма рассеяния на полярных оптических фононах — были рассмотрены нами во второй главе. Здесь еще раз вернемся к нему и сопоставим его роль с ролью других механизмов взаимодействия носителей с нарушениями периодичности кристаллической решетки. При этом учтем непараболичность закона дисперсии.

Вероятность внутризонного перехода электрона из состояния с волновым вектором k в состояние k' при «столкновении» с фононом любого типа определяется матричным элементом (2.28):

$$\langle k, \dots, N_q \dots | H'_q | \dots N'_q, k' \rangle, \quad (1)$$

где N_q и N'_q — число фононов с волновым вектором q (2.30) соответственно до и после электронного перехода, а H'_q — оператор взаимодействия. Составной частью этого матричного элемента является интеграл перекрытия (по объему элементарной ячейки V_0) между периодическими частями функций Блоха $u_k(r)$ и $u_{k'}(r)$:

$$\frac{1}{V_0} \int u_{k'}^*(r) u_k(r) d\tau. \quad (2)$$

Если волновые функции электрона (дырки) взяты в виде плоских волн $u_k(r) = 1$, то интеграл (2) равен единице. Точность такого приближения, однако, требует оценки. В частности, когда речь идет о полупроводниках с узкой запрещенной зоной (такими и являются полупроводники $A_{III}B_V$), непараболичность закона дисперсии (1.118) в принципе может дать отклонение интеграла перекрытия (2) от единицы.

Матц [166] учел непараболичность и рассчитал интеграл (2) на детальных функциях (1.102), полученных Кейном. К сожалению, результат Матца оказался достаточно сложным, и нет необходимости его приводить. Нам важно лишь знать, что при $\frac{\varepsilon(k)}{\varepsilon_g} \rightarrow 0$, как показал численный расчет, интеграл перекрытия стремится к единице. Поскольку даже в таком узкозонном полупроводнике, как InSb, при температуре решетки $T \leq 100$ К отношение средней энергии электронов к ширине запрещенной зоны $\frac{\bar{\varepsilon}(k)}{\varepsilon_g} \approx 0,05 + 0,1$, то отклонение (2) от единицы невелико. Поэтому во всех случаях, когда удовлетворяется неравенство $\frac{\bar{\varepsilon}}{\varepsilon_g} \ll 1$, можно матричный элемент (1) вычислять на плоских волнах.

Кроме интеграла перекрытия (2) непараболичность энергии электрона проявляется в значении матричного элемента (1). Анализ этого вопроса показал [168], что непараболичность вносит в квадрат матричного элемента (который, собственно, определяет вероятность перехода) поправочный множитель $|\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')|^2$, равный

$$|\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')|^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{m^* \varepsilon_g + 2\mathbf{p}\mathbf{p}'}{[(m^* \varepsilon_g + 2p^2)(m^* \varepsilon_g + 2p'^2)]^{1/2}} \right\}; \quad (\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}). \quad (3)$$

Видно, что здесь тоже при $\varepsilon \ll \varepsilon_g$ множитель $|\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')|^2$ близок к единице. Имея в виду невырожденные полупроводники, у которых неравенство $\varepsilon \ll \varepsilon_g$ не нарушается, в дальнейшем (если не будет оговорено противное) будем считать $|\varphi(\mathbf{p}, \mathbf{p}')|^2 = 1$. Тем самым мы налагаем определенные ограничения на температуру решетки и приложенное к полупроводнику поле.

В связи с последним замечанием нужно иметь в виду, что электрическое поле, как постоянное, так и переменное, само влияет на вероятности электронных переходов и интеграл столкновений. Традиционно в задачах электропроводности, гальваномагнитных и других кинетических эффектов это влияние не учитывается и не делаются необходимые оговорки об условиях оправданности такого неучета, хотя в литературе они рассматривались. Мы сошлемся, например, на работы [169—171], в которых определялись виртуальные межзонные переходы, инициированные электрическим полем. В работе [169], в частности, показано, что интеграл столкновений заметно зависит от электрического поля только тогда, когда неопределенность энергии электрона, связанная с перепутыванием состояний в различных зонах, становится порядка средней энергии электрона в зоне, причем в переменном поле — эффект наиболее выражен, если частота поля близка к $\frac{\varepsilon_g}{\hbar}$.

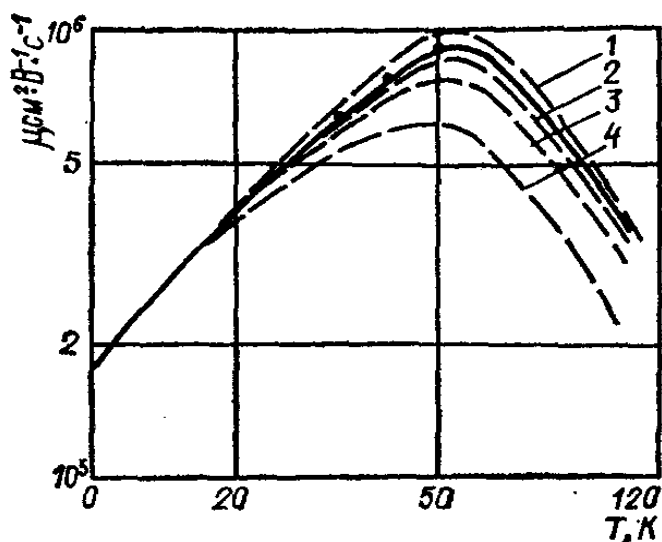
Рис. 28. Температурная зависимость подвижности электронов в n - InSb , вычисленная при учете рассеяния электронов на полярно-оптических и акустических фононах. Значения акустического потенциала деформации на кривых приняты:

1 — 0, 2 — 2,2 эВ, 3 — 18 эВ, 4 — 30 эВ, сплошная кривая вычислена при 7,2 эВ; точки — эксперимент.

Из сказанного следует, что во многих актуальных случаях интеграл (2), (3) можно считать равным единице.

Посмотрим теперь, какие механизмы взаимодействия носителей с решеткой в полярных полупроводниках $A_{III}B_V$ имеют место, и оценим их относительную роль в определении кинетических коэффициентов. Отметим прежде всего, что в настоящей главе рассматриваются процессы, обусловленные электронами нижней долины зоны проводимости, минимум которой находится в точке $k = 0$ зоны Бриллюэна (см. рис. 1). Электрическое поле и температура решетки будут приниматься такими, что более высоко расположенные долины (рис. 5) являются практически пустыми и не влияют на рассматриваемые явления переноса. Поэтому и междолинное рассеяние учитываться не будет.

Не будет учитываться также взаимодействие носителей с акустическими и пьезоэлектрическими фононами, хотя полупроводники $A_{III}B_V$ и $A_{III}B_{VI}$ обладают пьезоэлектрическими свойствами, а рассеяние носителей на продольных акустических колебаниях решетки имеет место у всех кристаллов. Как было показано во второй главе, вероятность взаимодействия электрона с акустическими фононами определяется величиной акустического потенциала деформации. Этот потенциал у полупроводников $A_{III}B_V$ имеет значение порядка 5—8 эВ (см. табл. 1), а иногда и меньшее. При наличии других механизмов рассеяния столь небольшой потенциал деформации определяет незначительную эффективность механизма акустического рассеяния в области азотной и более высокой температуры. Прямыми измерениями указанная неэффективность была доказана в InSb Кранцером и Горником [172]. Рис. 28 иллюстрирует полученную ими экспериментальную температурную зависимость подвижности. На рис. 28 нанесены также вычисленные при различных значениях акустического потенциала деформации кривые $\mu(T)$ при учете рассеяния на акустических и полярно-оптических фононах. Видно, что только в области вблизи 50 К и начиная со значения потенциала деформации 18 эВ акустическое рассеяние становится заметным, но даже при потенциале, равном 30 эВ, его вклад в подвижность составляет всего 10—20%. Столь большое значение



потенциала, однако, противоречит многочисленным данным опыта ⁶⁴.

Остановимся еще на возможности пренебрежения пьезоэлектрическим взаимодействием носителей. Во второй главе отмечалось, что этот вид взаимодействия носителей существенен при низких температурах решетки. Подвижность при таком рассеянии изменяется в соответствии с (2.93) по закону $T^{-1/2}$. Поэтому при очень низких температурах пьезоэлектрическое взаимодействие может стать определяющим. С повышением температуры, как показывает та же формула (2.93), его роль уменьшается и практически сводится к нулю. Так, конкретно в InSb, по данным [173], при $T > 50\text{K}$ пьезоэлектрическое рассеяние уже можно не принимать во внимание. Отметим попутно, что в электрическом поле разогрев электронов увеличивает $\tau_{\text{пэ}}$ и тем самым тоже уменьшает эффективность пьезоэлектрического рассеяния.

На основании проведенного анализа можно утверждать, что в рассматриваемой ниже области температур действительно достаточно ограничиться рассмотрением взаимодействия носителей с оптическими фононами. Кроме того, могут оказывать известное влияние на кинетические явления кулоновские механизмы взаимодействия: рассеяние носителей на ионизованных примесях и друг на друге. В примесных полупроводниках рассеяние на примесях иногда вообще является наиболее важным. Что же касается межэлектронного взаимодействия, то здесь, как и в атомарных полупроводниках, оно зависит от концентрации n и имеются две характерные концентрации $n^{(e)}$ и $n^{(p)}$. Когда концентрация электронов превышает $n^{(e)}$, межэлектронное взаимодействие навязывает вид сферически симметричной части функции распределения, а при $n > n^{(p)}$ оно еще влияет на ее асимметричную часть.

Рассеяние электронов на примесных центрах в нижайшей Г-долине зоны проводимости полупроводников $A_{III}B_{V}$ описывается временем релаксации (2.82). Это значительно облегчает учет его во всех задачах явлений переноса. Межэлектронное же взаимодействие, как неоднократно подчеркивалось ранее, нельзя правильно описать выражением, содержащим аналог времени релаксации. Рассеяние носителей на полярно-оптических фононах в широком диапазоне температур является существенно неупругим, и его тоже нельзя (в отличие от атомарных полупровод-

⁶⁴ В литературе встречаются противоречивые данные о величине акустического потенциала деформации. Эренрайх [174] впервые пришел к выводу о преобладании в InSb оптического рассеяния над акустическим в широком интервале температур. Он определил значение константы деформационного потенциала D_0 равным 7,2 эВ. Это значение оспаривалось многими. Так, в [175] получено $D_0 = 30$ эВ, однако Джинсом [176] и другими авторами была указана ошибочность работы [175]. Значение $D_0 = 7,2$ эВ было подтверждено, в частности в докладе Хилсума [177].

ников) описать с помощью времени релаксации, что сильно усложняет решение кинетического уравнения в полярных полупроводниках. Рассмотрим ниже некоторые методы, позволяющие в известной степени преодолеть трудности учета рассеяния, не характеризуемого временем релаксации.

§ 2. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПОЛЯРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ В СЛАБОМ ПОЛЕ

Фрелих еще в 1937 г. [178], решая задачу об электрическом пробое в полярных полупроводниках, отвел взаимодействию с полярно-оптическими колебаниями решетки основную роль в определении состояния электронного газа во внешнем электрическом поле. Вычисления Фрелиха имели фактически лишь оценочный характер и относились к достаточно высоким температурам решетки T или сильным полям F , когда средняя энергия электрона $\bar{\epsilon}$ значительно превосходит энергию оптического фонона $\hbar\omega_0$, и поэтому можно пользоваться квазиупругим описанием «столкновений» электронов с фононами и соответствующим временем релаксации (2.107).

Более последовательный расчет был выполнен Давыдовым и Шмушкевичем [179], определившими функцию распределения электронов в предельных случаях $\bar{\epsilon} \ll \hbar\omega_0$ и $\bar{\epsilon} \gg \hbar\omega_0$ и вычислившими электропроводность σ в зависимости от напряженности приложенного внешнего поля. Значительно позже влияние оптических колебаний на электропроводность определялось в других работах (см., например, работы [180—182]).

Работы [178, 179] выполнялись во время, когда структура зоны проводимости полупроводников не была известна. Их результаты поэтому не могут быть отнесены к полупроводникам $A_{III}B_V$, у которых при $\bar{\epsilon} \gg \hbar\omega_0$ существенно проявляется непараболичность зоны. В этих работах, как, впрочем, и в последующих [180—182] и ряде других, межэлектронное взаимодействие не принималось во внимание. Между тем при низких температурах легированных полупроводников межэлектронным рассеянием нельзя пренебрегать. Рассмотрим сейчас именно такую ситуацию.

Пусть к однородному полярному полупроводнику приложено постоянное электрическое поле напряженности F . Так же, как в предыдущих главах, будем считать, что полупроводник является несобственным и некомпенсированным. Поэтому концентрация электронов проводимости n практически равна концентрации примесных ионов N_I , которые во всей области рассматриваемых температур считаются полностью ионизованными. Обобщение задачи на случай $n \neq N_I$ не представляет труда [137].

Кинетическое уравнение задачи (2.13) запишем в виде

$$e\mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{po}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{el}. \quad (4)$$

Слагаемыми в правой части этого уравнения являются интегралы столкновений электронов с полярными фононами (2.51), ионизованными примесями (2.69) и друг с другом (2.67). В диффузионном приближении $f(\mathbf{p}) = f_0(\epsilon) + f_1(\epsilon) \cos \vartheta$ интеграл столкновений с оптическими фононами согласно (2.106) определяется выражениями

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_{\text{po}} &= \frac{e^2 \omega_0 N_0}{2\hbar p(\epsilon)} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \times \\ &\times \left\{ \frac{dp^{(+)^2}}{d\epsilon} Q_0(p^{(+)}, p) [e^{\alpha_0} f_0(\epsilon + \hbar\omega_0) - f_0(\epsilon)] + \right. \\ &\left. + \frac{dp^{(-)^2}}{d\epsilon} Q_0(p^{(-)}, p) [f_0(\epsilon - \hbar\omega_0) - e^{\alpha_0} f_0(\epsilon)] \Delta(\epsilon - \hbar\omega_0) \right\}, \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{\text{po}} &= \frac{e^2 \omega_0 N_0}{2\hbar p(\epsilon)} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \times \\ &\times \left\{ \frac{dp^{(+)^2}}{d\epsilon} [Q_1(p^{(+)}, p) f_1(\epsilon + \hbar\omega_0) e^{\alpha_0} - f_1(\epsilon) Q_0(p^{(+)}, p)] + \right. \\ &\left. + \frac{dp^{(-)^2}}{d\epsilon} [Q_1(p^{(-)}, p) f_1(\epsilon - \hbar\omega_0) - e^{\alpha_0} Q_0(p^{(-)}, p) f_1(\epsilon)] \Delta(\epsilon - \hbar\omega_0) \right\}. \quad (6) \end{aligned}$$

Напомним, что здесь N_0 — планковская функция распределения оптических фононов; ω_0 — их предельная длинноволновая частота; α_0 , $p^{(\pm)}$, $\Delta(\epsilon - \hbar\omega_0)$ определены формулами (3.92), (3.66); $Q_0(p^{(\pm)}, p)$ и $Q_1(p^{(\pm)}, p)$ — функции Лежандра второго рода (2.105). Их явные выражения имеют такой вид:

$$Q_0(p^{(\pm)}, p) \equiv Q_0\left(\frac{p^{(\pm)^2} + p^2}{2p^{(\pm)}p}\right) = \ln \frac{p^{(\pm)} + p}{|p^{(\pm)} - p|}, \quad (7)$$

$$Q_1(p^{(\pm)}, p) \equiv Q_1\left(\frac{p^{(\pm)^2} + p^2}{2p^{(\pm)}p}\right) = \frac{p^{(\pm)^2} + p^2}{2p^{(\pm)}p} Q_0(p^{(\pm)}, p) - 1.$$

Для параболической зоны, которая будет рассматриваться в этом параграфе⁶⁵, функция $Q_0(p^{(\pm)}, p)$ может быть представлена в более простом виде

$$Q_0(p^{(\pm)}, p) = 2 \operatorname{Arsh} \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega_0} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

В полярных кристаллах диэлектрические постоянные κ_0 и κ_∞ не совпадают, и поэтому потенциал взаимодействия элект-

⁶⁵ При низкой температуре решетки и в слабом поле непараболичность у большинства полупроводников $A_{\text{III}}B_{\text{V}}$ еще может в достаточной мере не проявиться.

ронов друг с другом (зависящий от высокочастотной проницаемости κ_∞) отличается от потенциала взаимодействия электронов с ионами. В связи с этим множители B_e в (3.55) и (3.63) отличаются в $\left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty}\right)^2$ раз. Будем обозначать их B_e (для описания межэлектронного взаимодействия) и B_i (для описания взаимодействия с ионами).

Перейдем к безразмерным переменным x (3.69) и функциям $\xi_0(x)$, $\xi_1(x)$ (3.70). По аналогии с процедурой третьей главы запишем уравнение для определения безразмерной асимметричной части функции распределения $\xi_1(x)$ (считая $n \gg n^{(e)}$). Это уравнение, учитывая (3.111) и (6), имеет вид

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty}\right)^2 \left\{ \psi(x) \left[\frac{d\xi_1}{dx} + \left(2x - \frac{1}{x}\right) \xi_1(x) + 4 \int_x^\infty \xi_1(x) dx \right] + \right. \\ & \quad \left. + e^{-x^2} \left[\frac{2}{3} \left(\int_0^x x^3 \xi_1(x) dx - 2x^3 \int_x^\infty \xi_1(x) dx \right) - \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \frac{4}{5} \left(\int_0^x x^5 \xi_1(x) dx + x^5 \int_x^\infty \xi_1(x) dx \right) \right] \right\} = \int_0^\infty \hat{Q}[\xi_1(x)] dx + \gamma_2 \int_0^\infty x^4 e^{-x^2} dx; \end{aligned} \quad (9)$$

$\psi(x)$ и γ_2 определены (3.99) и формулой (3.78), в которой эффективный заряд e^* равен $e/\kappa_0^{1/2}$. В отличие от третьей главы, здесь $\hat{Q}$ не функция x , а оператор, действующий на $\xi_1(x)$:

$$\hat{Q}[\xi_1(x)] = \frac{V\pi}{4} \{ \gamma \hat{Q}_{po}[\xi_1(x)] + 2\xi_1(x) \}, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{po}[\xi_1(x)] = & x^2 \left\{ Q_0(p^{(+)}, p) \xi_1(x) - e^{\alpha_0} \left[\frac{2x^2 + \alpha}{2\sqrt{x^2 + \alpha}} \times \right. \right. \\ & \times \frac{1}{x} Q_0(p^{(+)}, p) - 1 \left. \right] \xi_1(\sqrt{x^2 + \alpha}) + e^{\alpha_0} Q_0(p^{(-)}, p) \xi_1(x) \Delta(x^2 - \alpha) - \\ & \left. - \left[\frac{2x^2 - \alpha}{2\sqrt{x^2 - \alpha}} \frac{1}{x} Q_0(p^{(-)}, p) - 1 \right] \xi_1(\sqrt{x^2 - \alpha}) \Delta(x^2 - \alpha) \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\gamma = \frac{eF_0 N_0 T_e}{\pi n e^{*4} \ln(\rho_D/b_0)}, \quad (12)$$

$$F_0 = \frac{em^*\omega_0}{\hbar} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right). \quad (13)$$

Так же, как выше, перейдем от интегро-дифференциального уравнения (9) к интегральному, введя функцию $\eta(x)$:

$$\xi_1(x) = C x e^{-x^2} + x e^{-x^2} \int_0^x \eta(x) dx. \quad (14)$$

Константу C , как в третьей главе, определим из закона сохранения импульса электронного газа. Формально это определение сводится к приравниванию нулю правой части уравнения (9) при $x \rightarrow \infty$:

$$C = - \frac{1}{\int_0^\infty \hat{Q} [xe^{-x^2}] dx} \left\{ \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \gamma_2 + \int_0^\infty \hat{Q} \left[xe^{-x^2} \int_0^x \eta(t) dt \right] dx \right\}. \quad (15)$$

Не повторяя вычислений, приведенных в третьей главе, запишем уравнение для определения функции $\eta(x)$:

$$\left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty} \right)^2 \hat{H}_1 [\eta(x)] + \hat{H}_2 [\eta(x)] = \gamma_2 U(x). \quad (16)$$

Оператор $\hat{H}_1 [\eta(x)]$, представляющий межэлектронное взаимодействие, здесь точно такой, как в (3.122). Оператор $\hat{H}_2 [\eta(x)]$ представляет рассеяние электронов на оптических фононах и существенно отличается от (3.123). Он имеет тут следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{H}_2 [\eta(x)] = & \frac{\int_0^x \hat{Q} [xe^{-x^2}] dx}{\int_0^\infty \hat{Q} [xe^{-x^2}] dx} \int_0^\infty \hat{Q} \left[xe^{-x^2} \int_0^x \eta(t) dt \right] dx - \\ & - \int_0^x \hat{Q} \left[xe^{-x^2} \int_0^x \eta(t) dt \right] dx. \end{aligned} \quad (17)$$

Функция $U(x)$ в правой части (16) тоже отличается от (3.121). Она равна:

$$U(x) = \int_0^x x^4 e^{-x^2} dx - \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{\int_0^x \hat{Q} [xe^{-x^2}] dx}{\int_0^\infty \hat{Q} [xe^{-x^2}] dx}. \quad (18)$$

Выше было доказано, что оператор $\hat{H}_1$ является самосопряженным и положительно определенным. При высоких электронных температурах, когда $T_e \gg \hbar\omega_0$ и у большинства электронов $x^2 \gg \alpha$, выражение (11) можно разложить по степеням $\frac{\alpha}{x^2}$.

Оператор $\hat{Q}_{p0}$ при этом приближенно преобразуется в функцию, обратно пропорциональную времени релаксации (которое, напомним, имеет физический смысл при $\epsilon \gg \hbar\omega_0$). Полный оператор $\hat{Q}$ (10) в уравнении (9) тоже, следовательно, преобразуется в функцию переменной x , умноженную на $\xi_1(x)$. Таким образом, $\hat{H}_2$ в (17) принимает вид, аналогичный (3.123) (но, естественно,

не равный). Он, как доказано, тоже самосопряженный и положительно определенный.

Легко проверить, что в слабом поле, когда $T_e \simeq T$, оператор $\hat{H}_2$ остается положительным и самосопряженным при произвольном соотношении между T и $\hbar\omega_0$. Однако, если T_e отличается от T и неравенство $T_e \gg \hbar\omega_0$ не выполняется, оператор $\hat{H}_2$ уже не самосопряженный. Всякая подстановка вида (14), искусственно преобразующая оператор $\hat{H}_2$ в самосопряженный (например, замена в (14) e^{-x^2} на $e^{-x^2 T_e/T}$), нарушит самосопряженность оператора $\hat{H}_1$. Поэтому уравнение (16) при $T_e \neq T$ нельзя преобразовать в уравнение с самосопряженным оператором и к нему нельзя непосредственно применить вариационный метод, развитый в третьей главе.

В принципе не исключена возможность решения уравнения (16) стандартным методом итерирования после приведения его к удобному для этого виду. Однако итерация здесь оказывается весьма громоздкой и практически неудобной. Кроме того, такое решение связано с трудностью оценки погрешности полученного результата. Погрешность ответа также трудно оценить, если искать решение (16) методом моментов, который в данном случае законен.

Учитывая сказанное, ограничимся в этом параграфе рассмотрением слабых полей и положим $T_e = T$. Оператор $\hat{H}_2$ тогда становится самосопряженным, и можно искать решение (16) развитым ранее вариационным методом.

Нетрудно убедиться, что при $T_e = T$ имеет место равенство

$$\int_0^\infty \hat{Q} \left[x e^{-x^2} \int_0^x \eta(t) dt \right] dx = \int_0^\infty \eta(t) dt \int_0^\infty \hat{Q} [x e^{-x^2}] dx. \quad (19)$$

С помощью этого равенства, а также (14), (15) и (18) находим

$$\int_0^\infty x^3 \xi_1(x) dx = -\gamma_2 \left\{ \frac{9\pi}{64 \int_0^\infty \hat{Q} [x e^{-x^2}] dx} + \frac{1}{\gamma_2} \int_0^\infty U(x) \eta(x) dx \right\}. \quad (20)$$

По своей структуре выражение (20) полностью аналогично выражению (3.124). Поэтому можно перенести полученный в (3.137) результат и определить электропроводность

$$\sigma = \frac{m^* e^2}{3\pi e^{*4} \ln(\rho_D/b_0)} \left(\frac{2T_e}{m^*} \right)^{3/2} \left\{ \frac{9\pi}{64 \int_0^\infty \hat{Q} [x e^{-x^2}] dx} + \frac{b_1^2}{H_{11}} + \sum_{l=2}^\infty \frac{(D_b^{(l-i)})^2}{D^{(l-i)} D^{(l)}} \right\}, \quad (21)$$

Детерминанты $D_b^{(l-1)}$, $D^{(l-1)}$ и $D^{(l)}$ в (21) формально совпадают с детерминантами (3.134), но нужно иметь в виду, что здесь

$$H_{lm} = H_{m'} = \left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty} \right)^2 H_{lm}^{(1)} + H_{lm}^{(2)}, \quad (22)$$

где $H^{(2)}$ задано формулой (17). Матричные элементы H_{lm} и величины b_l такие же, как в (3.132), но со значениями H_{lm} и $U(x)$, определенными выражениями (22) и (18) соответственно.

Приведем некоторые значения матричных элементов $H_{lm}^{(1)}$. В общем виде они определены формулой (3.139):

$$H_{11}^{(1)} = \frac{1}{8} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2}, \quad H_{12}^{(1)} = \frac{11}{32} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2}, \quad H_{22}^{(1)} = \frac{157}{128} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2}. \quad (23)$$

Для определения явного вида матричных элементов $H_{lm}^{(2)}$ введем такие обозначения:

$$(l, m) = \int_0^\infty x^{2l} \hat{Q}_{po} [x^{2m+1} e^{-x^2}] dx, \quad (24)$$

$$\{l, m\} = \frac{4}{V\pi} \int_0^\infty x^{2l} \hat{Q} [x^{2m+1} e^{-x^2}] dx. \quad (25)$$

В силу (10) выражения (24) и (25) связаны друг с другом равенством

$$\{l, m\} = \gamma(l, m) + (l + m)! \quad (26)$$

Можно проверить, что после подстановки в формулу (24) явного вида оператора $\hat{Q}_{po}$ (11) интеграл (24) в точности совпадает с интегралом (38) работы [183]. Воспользуемся его выражением в [183] и представим (l, m) в виде

$$(l, m) = \frac{1}{2} \alpha_0 e^{\alpha_0/2} \delta_{lm}(\alpha_0), \quad (27)$$

где $\delta_{lm}(\alpha_0)$ — функция, вычисленная в [183]. С помощью этой функции непосредственно находятся выражения (l, m) и $\{l, m\}$ при конкретных значениях l и m . Приведем их при тех значениях l, m , которые понадобятся ниже:

$$\begin{aligned} \{0, 0\} &= R(\alpha_0) K_1 \left(\frac{\alpha_0}{2} \right) + 1, \\ \{0, 1\} &= R(\alpha_0) \left[\alpha_0 K_0 \left(\frac{\alpha_0}{2} \right) + 2 K_1 \left(\frac{\alpha_0}{2} \right) \right] + 1, \\ \{0, 2\} &= R(\alpha_0) \left[\frac{5}{2} \alpha_0 K_0 \left(\frac{\alpha_0}{2} \right) + (\alpha_0^2 + 6) K_1 \left(\frac{\alpha_0}{2} \right) \right] + 2, \\ \{1, 1\} &= R(\alpha_0) \left[\frac{7}{2} \alpha_0 K_0 \left(\frac{\alpha_0}{2} \right) + (\alpha_0^2 + 6) K_1 \left(\frac{\alpha_0}{2} \right) \right] + 2, \\ \{1, 2\} &= R(\alpha_0) \left[(\alpha_0^3 + 13\alpha_0) K_0 \left(\frac{\alpha_0}{2} \right) + \right. \end{aligned} \quad (28)$$

$$+ (6\alpha_0^2 + 24) K_1\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)\Big] + 6,$$

$$\{2,2\} = R(\alpha_0) \left[\left(-\frac{13}{2} \alpha_0^3 + 66\alpha_0 \right) K_0\left(\frac{\alpha_0}{2}\right) + \right. \\ \left. + \left(\alpha_0^4 + \frac{147}{4} \alpha_0^2 + 120 \right) K_1\left(\frac{\alpha_0}{2}\right) \right] + 24,$$

где $K_0\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)$ и $K_1\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)$ — модифицированные функции Ганкеля, а

$$R(\alpha_0) = \frac{\alpha_0}{2} \gamma e^{\alpha_0/2}. \quad (29)$$

Формулы (24) — (29) позволяют представить матричный элемент $H_{lm}^{(2)}$ оператора (17) в таком удобном для вычислений виде:

$$H_{lm}^{(2)} = \frac{\sqrt{\pi}}{16lm} \left[\{l, m\} - \frac{\{l, 0\} \{m, 0\}}{\{0, 0\}} \right]. \quad (30)$$

Это выражение вместе с (23) полностью определяет матричные элементы H_{lm} (22), а значит, и детерминанты $D^{(l)}$ и $D^{(l-1)}$. Для вычисления детерминанта $D_b^{(l-1)}$ нужно еще определить b_l . Эти последние, учитывая (3.132), (18) и (25), находятся по формуле

$$b_l = \frac{\sqrt{\pi}}{16l} \left[\frac{3 \{l, 0\}}{\{0, 0\}} - \frac{(2l+3)!!}{2^l} \right]. \quad (31)$$

Целесообразно обозначить

$$\tilde{H}_{lm} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \{0, 0\} H_{lm}, \quad \tilde{b}_l = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \{0, 0\} b_l. \quad (32)$$

В этих обозначениях электропроводность σ и подвижность $\mu = \frac{\sigma}{en}$ по формулам (21), (3.134) и (12) выражаются следующим рядом:

$$\mu = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{1}{N_0 F_0} \left(\frac{2T}{m^*} \right)^{1/2} \frac{\gamma}{\{0, 0\}} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{\tilde{b}_1^2}{\tilde{H}_{11}} + \frac{(\tilde{H}_{11}\tilde{b}_2 - \tilde{H}_{12}\tilde{b}_1)^2}{\tilde{H}_{11}(\tilde{H}_{11}\tilde{H}_{22} - \tilde{H}_{12}^2)} + \dots \right\}. \quad (33)$$

Все слагаемые ряда (33) положительны, поскольку оператор H положительно определенный и, как показано в третьей главе, обрыв ряда на любом l -м члене определяет уменьшенное значение σ и μ .

Сопоставим, следуя [184], полученную подвижность μ с подвижностью μ_0 , вычисленной без учета межэлектронных столкновений. Рассеяние электронов на одних только оптических фононах при высоких температурах $T \gg \hbar\omega_0$ (или $\alpha_0 \ll 1$) приводит,

согласно [183], к подвижности

$$(\mu_0)_{T \gg \hbar \omega_0} = \frac{4}{3N_0 F_0} \left(\frac{2T}{\pi m^*} \right)^{1/2}, \quad (34)$$

а при низких температурах решетки $T \ll \hbar \omega_0$ (или $\alpha_0 \gg 1$) — к подвижности

$$(\mu_0)_{T \ll \hbar \omega_0} = \frac{1}{N_0 F_0} \left(\frac{\hbar \omega_0}{2m^*} \right)^{1/2}. \quad (35)$$

Если подставить (34), (35) в (33) и определить отношение подвижностей с учетом и без учета кулоновского рассеяния, то окажется:

$$\frac{\mu}{(\mu_0)_{T \gg \hbar \omega_0}} = \frac{9\pi}{32} \frac{\gamma}{\{0, 0\}} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{\tilde{b}_1^2}{\tilde{H}_{11}} + \frac{(\tilde{H}_{11}\tilde{b}_2 - \tilde{H}_{12}\tilde{b}_1)^2}{\tilde{H}_{11}(\tilde{H}_{11}\tilde{H}_{22} - \tilde{H}_{12}^2)} + \dots \right\}, \quad (36)$$

или

$$\frac{\mu}{(\mu_0)_{T \ll \hbar \omega_0}} = \frac{3}{4} \left(\frac{\pi}{\alpha_0} \right)^{1/2} \frac{\gamma}{\{0, 0\}} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{\tilde{b}_1^2}{\tilde{H}_{11}} + \frac{(\tilde{H}_{11}\tilde{b}_2 - \tilde{H}_{12}\tilde{b}_1)^2}{\tilde{H}_{11}(\tilde{H}_{11}\tilde{H}_{22} - \tilde{H}_{12}^2)} + \dots \right\}. \quad (37)$$

Пренебрежение примесным и межэлектронным рассеянием, согласно (9) и (10), формально соответствует устремлению параметра γ (12) к бесконечности. Полезно иметь в виду, что этот параметр, характеризующий для данного полупроводника концентрацию электронов и температуру решетки, можно простым образом связать с подвижностями при чисто решеточном или чисто примесном рассеянии. При чисто примесном (и $n = N_I$, $T_e = T$) рассеянии подвижность μ_I согласно (3.88) имеет вид

$$\mu_I = \frac{2em^*}{ne^{*4} \ln(\rho_D/b_0)} \left(\frac{2T}{\pi m^*} \right)^{3/2}. \quad (38)$$

Отсюда и из (34), (35), (12) следует

$$\gamma = \frac{1}{3} \frac{\mu_I}{(\mu_0)_{T \gg \hbar \omega_0}}, \quad \gamma = \frac{(\pi \alpha_0)^{1/2}}{8} \frac{\mu_I}{(\mu_0)_{T \ll \hbar \omega_0}}. \quad (39)$$

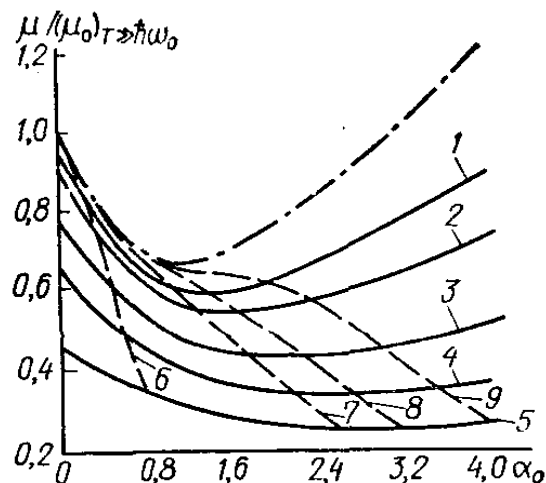
Предельные подвижности μ_I , $(\mu_0)_{T \gg \hbar \omega_0}$ и $(\mu_0)_{T \ll \hbar \omega_0}$ могут быть непосредственно измерены на опыте. Формула (39) тем самым позволяет получить дополнительную возможность контролировать значение параметра γ , а значит, и концентрацию электронов n ⁶⁶.

При $\gamma \rightarrow \infty$ целесообразно в (28) воспользоваться известными разложениями функций $K_0\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)$ и $K_1\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)$ (см. [86]). Подставив

⁶⁶ При равенстве концентраций $n = N_I$ нельзя, как мы видели, разделить примесное рассеяние от межэлектронного. Поэтому в области, где решеточное рассеяние пренебрежимо мало, истинная подвижность отличается от (38) в $\gamma_E \cong 0,58$ раз (см. (3.143)).

Рис. 29. Зависимость относительной подвижности электронов от обратной температуры. Сплошные кривые вычислены при значениях γ :

1 — 10; 2 — 5; 3 — 2; 4 — 1; 5 — 0,5. Штрих-пунктирная кривая $\gamma \rightarrow \infty$. Штриховые кривые вычислены при постоянной концентрации: 6 — $n = n_1$; 7 — $\frac{n_1}{40}$; 8 — $\frac{n_1}{80}$; 9 — $\frac{n_1}{250}$. В частном случае полупроводника с параметрами InSb $n_1 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$.



их в (36), (37) и учтя (23), (30) и (31), нетрудно убедиться, что правые части (36), (37) стремятся к единице соответственно при $\alpha_0 \rightarrow 0$ или $\alpha_0 \rightarrow \infty$. Следовательно, в предельных случаях высоких и низких температур решетки, когда $\gamma \rightarrow \infty$ (т. е. при предельно низких концентрациях электронов), подвижность (33) совпадает с чисто решеточной подвижностью (34) или (35). Поскольку, однако, не исключена возможность (при определенных n и T) значений $\gamma \ll 1$, то подвижность (33) отличается от (34), (35), особенно при низких температурах.

На рис. 29 представлена в зависимости от обратной температуры α_0 подвижность μ , вычисленная по формуле (36) в единицах чисто решеточной подвижности (34). Параметр γ считался постоянным, и в (36) сохранялись три слагаемых ряда. Расчет показал, что третье слагаемое всегда меньше единицы и его учет вносит лишь небольшую поправку в окончательный результат. Что же касается второго слагаемого, то оно в ряде случаев даже превосходит первое и поэтому им нельзя пренебрегать.

Кривые рис. 29 построены при $\left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty}\right)^2 = 1,2$, типичном для многих полупроводников полярного типа (например, InSb). С ростом γ , т. е. с увеличением относительной роли решеточного рассеяния, подвижность, естественно, все в меньшей мере становится чувствительной к величине $\left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty}\right)^2$. Уже начиная с $\gamma = 1$ во всем диапазоне α_0 значения μ на рис. 29 получаются такими, как при $\kappa_0 \approx \kappa_\infty$. Поэтому начиная с $\gamma \approx 1$ можно рассматривать кривые рис. 29 как универсальные в смысле независимости их от различия высокочастотной и статической проницаемостей. Кристаллы с большим различием κ_0 и κ_∞ , как, например, щелочно-галогениды, для нас здесь не представляют интереса.

Для сравнения на рис. 29 нанесена штрих-пунктирная кривая подвижности Ховарда и Зондгеймера [183], вычисленная без учета примесного и межэлектронного рассеяния. Видно, что с ростом γ кривые приближаются к штрих-пунктирной, совпадающей с кривой рис. 29 при $\gamma \rightarrow \infty$. Это еще раз подтверждает высказанное ранее утверждение, что при больших γ (т. е. при высоких температурах или низких электронных концентрациях) возрастает относительная роль решеточного рассеяния.

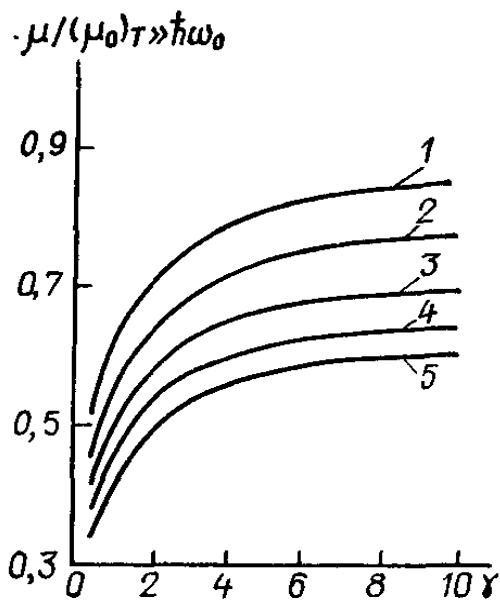


Рис. 30. Концентрационная зависимость $\frac{\mu}{(\mu_0)T \gg \hbar\omega_0}$. Значения $\frac{\hbar\omega_0}{T}$ равны:
1 — 0,2; 2 — 0,4; 3 — 0,6;
4 — 0,8; 5 — 1.

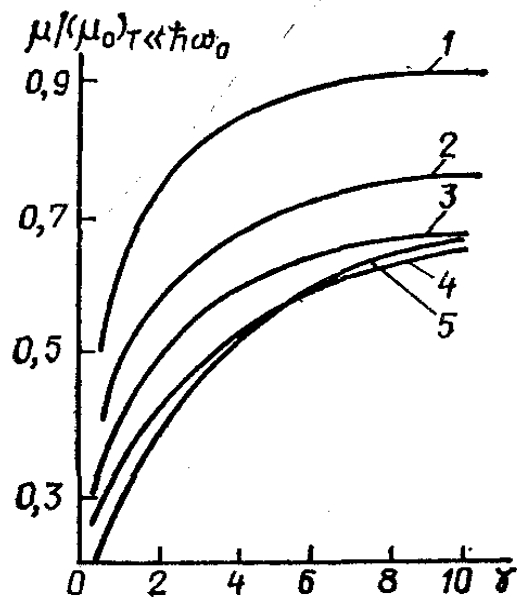


Рис. 31. Концентрационная зависимость относительной подвижности $\frac{\mu}{(\mu_0)T \ll \hbar\omega_0}$. Значения $\frac{\hbar\omega_0}{T}$ на кривых:
1 — 1; 2 — 1,4; 3 — 1,8; 4 — 2,4; 5 — 3,2.

В отличие от атомарных полупроводников параметр γ (12) в слабых полях изменяется экспоненциально с температурой (а не пропорционально $T^{3/2}$, как эквивалентный ему параметр γ_1 (3.77) в атомарных полупроводниках). Столь резкая зависимость γ от T обязывает при сопоставлении теоретической и экспериментальной температурных зависимостей относительной подвижности $\frac{\mu}{(\mu_0)T \gg \hbar\omega_0}$ принимать во внимание изменение γ . Поэтому при увеличении α_0 на рис. 2 следует перемещаться с верхних кривых на нижние, что увеличит расхождение с кривой работы [183].

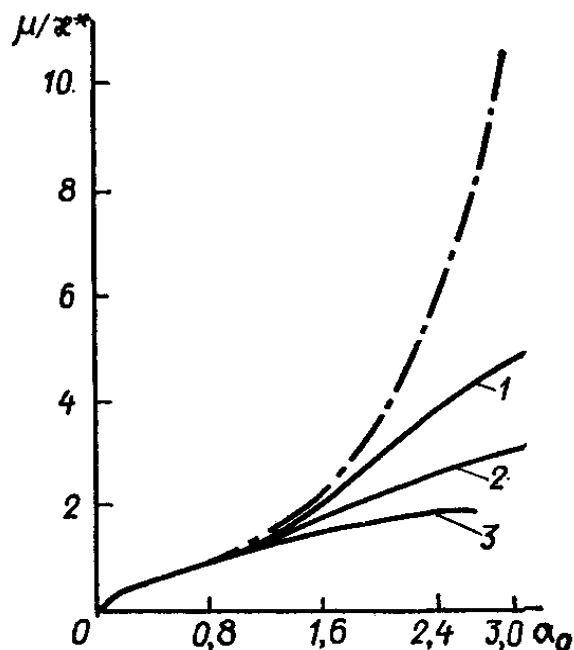
Обратим внимание на немонотонный характер кривых рис. 29. Уже из формул (34), (35) видно, что в предельных случаях $\alpha_0 \rightarrow 0$ и $\alpha_0 \rightarrow \infty$ закон изменения подвижности при чисто решеточном рассеянии разный при высоких ($\mu \propto T^{-1/2}$) и низких ($\mu \propto e^{\alpha_0}$) температурах. Если температура решетки конечна, то даже при $\gamma \rightarrow \infty$ (т. е. $n \rightarrow 0$), когда кулоновское рассеяние пренебрежимо мало, изменение подвижности с T отличается от обоих предельных случаев (34), (35). Относительная подвижность $\frac{\mu}{(\mu_0)T \gg \hbar\omega_0}$ становится минимальной при $T \approx \hbar\omega_0$. Включение

кулоновских механизмов рассеяния не изменяет характера кривых, но сдвигает минимум в сторону более низких температур.

Соотношение между ролью кулоновского рассеяния и рассеяния на оптических фононах можно наглядно проиллюстрировать на концентрационных кривых подвижности. Эти кривые, каждая из которых соответствует фиксированной температуре, представ-

Рис. 32. Зависимость подвижности в условных единицах $\left[\mu^* = \frac{4}{3F_0} \left(\frac{2T}{\pi m^*} \right)^{1/2} \right]$ от обратной температуры. Концентрация электронов:

1 — $\frac{n_1}{250}$, 2 — $\frac{n_1}{80}$, 3 — $\frac{n_1}{40}$. Штрих-пунктирная кривая $n \rightarrow 0$.



лены на рис. 30 и 31. Из рисунков видно, что в области малых значений γ подвижность мала и резко растет с γ . В этой области она в основном определяется кулоновскими механизмами рассеяния, и поэтому всякое изменение n сразу же проявляется на ее величине. По мере роста γ (уменьшения n) полупроводник переходит из области примесного рассеяния в область решеточного рассеяния. Изменения подвижности становятся все более медленными и в конце концов прекращаются. Кривые рис. 30 и 31 переходят в насыщение, наступающее тем позже, чем больше α_0 .

Вернемся снова к температурной зависимости подвижности. На рис. 32 представлены кривые подвижности (в условных единицах), вычисленные по формуле (33), в зависимости от α_0 . Рис. 32 тоже иллюстрирует влияние кулоновского рассеяния на подвижность, но больший интерес, чем абсолютная подвижность, представляет температурный ход относительной подвижности. Она изображена на рис. 29 штриховыми линиями. Сопоставление их со штрих-пунктирной кривой показывает, что подвижность при всех концентрациях n меньше, а при низких температурах решетки во много раз меньше чисто решеточной подвижности. Чем больше концентрация n , тем круче становятся штриховые кривые. С уменьшением n крутизна штриховых кривых 6—9 рис. 29 (как и кривых рис. 30 и 31) уменьшается и проявляется перегиб, соответствующий переходу от кулоновского к решеточному доминирующему механизму рассеяния ⁶⁷.

Посмотрим теперь, насколько полученная нами подвижность отличается от подвижности, вычисленной с помощью сдвинутой по импульсу максвелловской функции распределения (3.142). Впервые такое вычисление было выполнено Стреттоном [185], принявшим концентрацию электронов достаточно высокой, чтобы межэлектронное взаимодействие было господствующим во всем диапазоне энергий. Позже функция (3.142) применялась в более

⁶⁷ Нужно иметь в виду, что приведенные выводы справедливы только до таких температур, при которых еще не нарушаются критерии применимости уравнения (4). При очень низких температурах начнут проявляться другие механизмы рассеяния, и поэтому сделанные выше утверждения при низких T нужно рассматривать скорее как качественную тенденцию.

общих задачах с «промежуточными» концентрациями (когда межэлектронное взаимодействие существенно при энергиях $\epsilon < \hbar\omega_0$ и не существенно при более высоких энергиях) [186—190].

Несомненно, в слабом поле сферически симметричная часть функции распределения невырожденного электронного газа имеет максвелловский вид при всех концентрациях электронов. Это, однако, не означает, что функция (3.142) всегда является удовлетворительной функцией распределения носителей в слабом поле при любой неупругости рассеяния. В третьей главе было показано, что в атомарных полупроводниках сдвинутая максвелловская функция (3.142) дает только первый член ряда, аналогичного (33) или (36), (37). Определим, как выглядит этот ряд при низкой температуре (когда $T \ll \hbar\omega_0$) в полярных полупроводниках.

При $T \ll \hbar\omega_0$, или, что то же, $\alpha_0 \gg 1$, можно воспользоваться асимптотическим разложением функций $K_0\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)$ и $K_1\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)$:

$$\begin{aligned} K_0\left(\frac{\alpha_0}{2}\right) &\cong \left(\frac{\pi}{\alpha_0}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{1}{\alpha_0}\right) e^{-\alpha_0/2}, \quad K_1\left(\frac{\alpha_0}{2}\right) \cong \\ &\cong \left(\frac{\pi}{\alpha_0}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{3}{4\alpha_0}\right) e^{-\alpha_0/2}. \end{aligned} \quad (40)$$

Формула (37) при учете (23), (30), (31), (32) и (40) получается такой:

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{(\mu_0)_{T \ll \hbar\omega_0}} &\cong \frac{3}{2\alpha_0} \cdot \frac{g_0}{g_0 + 2} \times \\ &\times \left\{ 1 + \frac{9 + \alpha_0^2 g_0^2}{\alpha_0 g_0 \left(\frac{3}{2} g_0 + 2\alpha_0\right) + 4 \left[1 + \sqrt{2} \left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty}\right)^2\right]} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (41)$$

Здесь

$$g_0 = \gamma (\pi\alpha_0)^{1/2} = \frac{1}{8} \pi\alpha_0 \frac{\mu_I}{(\mu_0)_{T \ll \hbar\omega_0}}. \quad (42)$$

Слагаемые $\frac{\mu}{(\mu_0)_{T \ll \hbar\omega_0}}$, не приведенные в (41), малы и вносят лишь небольшую поправку. Если α_0 настолько больше единицы, что имеет место также и неравенство $g_0 \gg 1$, то после удержания в (41) одного только первого слагаемого получим

$$\frac{\mu}{(\mu_0)_{T \ll \hbar\omega_0}} \cong \frac{3}{2\alpha_0}.$$

Это в точности результат, приведенный в работе [185] и основанный на использовании сдвинутой максвелловской функции.

Можно увидеть, однако, что при $g_0 \gg 1$ второе слагаемое в фигурных скобках (41) больше единицы и стремится к $\frac{2}{3} \alpha_0$, а значит, тогда $\frac{\mu}{(\mu_0)_{T \ll \hbar \omega_0}} \rightarrow 1$, как и должно быть. Таким образом, применение сдвинутой максвелловской функции к полярным полупроводникам требует осторожности и должно учитывать все оговорки, сделанные по этому поводу в третьей главе [186—190].

§ 3. ВЛИЯНИЕ НЕПАРАБОЛИЧНОСТИ ЭНЕРГИИ НА ФУНКЦИЮ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И ПОДВИЖНОСТЬ

Обобщим результаты предыдущего параграфа с учетом непараболичности закона дисперсии энергии электронов [191—195]. Выше указывалось, что непараболичность должна быть особенно заметной в сильных полях и высоких температурах. Одновременно указывалось, что в полярных кристаллах, где рассеяние электронов на оптических фононах в общем случае не описывается временем релаксации, учет непараболичности сильно усложнит задачу. Опасность приближенного решения обычными методами (ввиду появления здесь весьма сложных выражений) связана с возможностью получения неустойчивых решений относительно допущенных малых ошибок. Иначе говоря, ошибка в конечном результате может не уменьшаться, а, наоборот, расти с увеличением числа приближений.

Исходя из сказанного, разовьем новый метод решения задачи, который позволит вычислить не только интегральные характеристики, такие, например, как подвижность, но и саму функцию распределения и установить ее особенности. Начнем с рассмотрения полупроводника в слабом электрическом поле, где предложенный метод законен. Решение задачи в сильном поле будет приведено в следующем параграфе.

Итак, пусть к однородному полупроводнику типа $A_{III}B_{IV}$ приложено слабое электрическое поле F , не вызывающее разогрева электронного газа. Кинетическое уравнение задачи снова примем в виде (4), где интегралы столкновений с оптическими фононами заданы выражениями (5) и (6). Ограничимся диффузионным приближением, которое в слабом поле безусловно законно. Далее, для некоторого упрощения задачи будем считать полупроводник компенсированным с концентрацией примесных ионов $N_I \gg n$. Это позволит в уравнении (4) пренебречь членом, описывающим межэлектронное взаимодействие. Зато рассеяние электронов на примесных ионах будем учитывать и пользоваться временем релаксации Брукса — Херринга

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_I \cong - \frac{f_1(\varepsilon)}{\tau_I(\varepsilon)}, \quad (43)$$

$$\frac{1}{\tau_I(\varepsilon)} = \frac{2\pi e^{*4} N_I}{p^2(\varepsilon)} \frac{dp}{d\varepsilon} \left[\ln(\xi + 1) - \frac{\xi}{\xi + 1} \right], \quad (44)$$

$$\xi = \frac{T}{\pi n e^2 \hbar^2} p^2(\varepsilon). \quad (45)$$

Подставим (6), (43), (44) и закон дисперсии Кейна (1.118) в уравнение (4). Так как в слабом поле функция $f_0(\varepsilon)$ — максвелловская с температурой решетки T , то уравнение (4) должно служить только для определения функции $f_1(\varepsilon)$. Это уравнение согласно (6) является разностным уравнением второго порядка и имеет следующий вид:

$$a(\varepsilon) f_1(\varepsilon - \hbar\omega_0) + b(\varepsilon) f_1(\varepsilon) + c(\varepsilon) f_1(\varepsilon + \hbar\omega_0) = d(\varepsilon). \quad (46)$$

Мы ввели такие обозначения:

$$\begin{aligned} a(\varepsilon) &= \left(1 + 2 \frac{\varepsilon - \hbar\omega_0}{\varepsilon_g} \right) Q_1(\varepsilon - \hbar\omega_0) \Delta(\varepsilon - \hbar\omega_0), \\ b(\varepsilon) &= - \left(1 + 2 \frac{\varepsilon + \hbar\omega_0}{\varepsilon_g} \right) Q_0(\varepsilon) - \left(1 + 2 \frac{\varepsilon - \hbar\omega_0}{\varepsilon_g} \right) \Delta(\varepsilon - \hbar\omega_0) \times \\ &\quad \times Q_0(\varepsilon - \hbar\omega_0) e^{\alpha_0} - \frac{p(\varepsilon)}{e F_0 N_0 \tau_I(\varepsilon)}, \\ c(\varepsilon) &= \left(1 + 2 \frac{\varepsilon + \hbar\omega_0}{\varepsilon_g} \right) e^{\alpha_0} Q_1(\varepsilon), \\ d(\varepsilon) &= \frac{F p(\varepsilon)}{N_0 F_0} \frac{d\varepsilon}{dp} \frac{df_0}{d\varepsilon}; \quad \left(F_0 \equiv \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \frac{m^* e \omega_0}{\hbar} \right), \\ Q_0(\varepsilon) &\equiv Q_0(p^{(+)}, p) = \ln \frac{p(\varepsilon + \hbar\omega_0) + p(\varepsilon)}{p(\varepsilon + \hbar\omega_0) - p(\varepsilon)}; \\ Q_0(\varepsilon - \hbar\omega_0) &\equiv Q_0(p^{(-)}, p) = \ln \frac{p(\varepsilon) + p(\varepsilon - \hbar\omega_0)}{p(\varepsilon) - p(\varepsilon - \hbar\omega_0)}, \\ Q_1(\varepsilon) &\equiv Q_1(p^{(+)}, p) = \frac{p^2(\varepsilon + \hbar\omega_0) + p^2(\varepsilon)}{2p(\varepsilon + \hbar\omega_0)p(\varepsilon)} Q_0(\varepsilon) - 1, \\ Q_1(\varepsilon - \hbar\omega_0) &\equiv Q_1(p^{(-)}, p) = \frac{p^2(\varepsilon) + p^2(\varepsilon - \hbar\omega_0)}{2p(\varepsilon)p(\varepsilon - \hbar\omega_0)} Q_0(\varepsilon - \hbar\omega_0) - 1. \end{aligned} \quad (47)$$

Для получения однозначного решения уравнения (46) его следует дополнить граничными условиями. В нашей задаче естественными граничными условиями являются $f_1(\varepsilon \leq 0) = 0$ и $f_1(\varepsilon \rightarrow \infty) = 0$. В развитом ниже приближении вместо бесконечного интервала изменения энергии ε выбирается конечный интервал $l\hbar\omega_0$ ($l \gg 1$) и граничное условие накладывается на значение функции $f_1(\varepsilon)$ в точке $\varepsilon = l\hbar\omega_0$. Возможны два варианта граничных условий: 1) считать $f_1(\varepsilon > l\hbar\omega_0)$ равным нулю; 2) считать, что при $\varepsilon \geq l\hbar\omega_0$ функция $f_1(\varepsilon)$ принимает значения, соответствующие асимптотическому решению при $\varepsilon \gg \hbar\omega_0$. В случае низких

температур решетки и температур, близких к дебаевской, выполненный расчет показал [196], что оба варианта граничных условий дают практически совпадающие результаты. При высоких температурах предпочтительнее второй вариант, позволяющий ограничиться не слишком большими значениями l .

Перейдем от разностного уравнения (46) с областью изменения переменной ε от нуля до $l\hbar\omega_0$ к эквивалентной системе линейных алгебраических уравнений. Для этого положим $\varepsilon_k = \varepsilon' + k\hbar\omega_0$. Переменная ε' теперь будет изменяться в пределах $0 \leq \varepsilon' \leq \hbar\omega_0$, а целое число k — принимать значения $0, 1, 2, \dots, (l-1)$. Если обозначить $a_k = a(\varepsilon_k)$, $b_k = b(\varepsilon_k)$ и т. д., то названная алгебраическая система уравнений имеет вид

[illegible]

Матрица коэффициентов при неизвестных φ_k является трехдиагональной. Решение системы (48) при достаточно большом l можно реализовать на ЭВМ. Изменяя значения ϵ' и находя из (48) соответствующие φ_k , получим с необходимой точностью функцию $f_1(\epsilon)$ во всем исследуемом интервале энергий.

Система (48) так же, как и исходное разностное уравнение (46), существенно упрощается в предельных случаях высоких и низких температур. При температурах $T \ll \hbar\omega_0$ можно считать, что электронов, с энергиями значительно превосходящими $\hbar\omega_0$, практически нет, и поэтому в (48) достаточно ограничиться двумя значениями k : $k = 0$ и $k = 1$. Это сразу дает

$$\varphi_0 = f_1(\varepsilon) = \frac{b_1 d_0 - c_0 d_1}{b_0 b_1 - c_0 a_1} \quad (0 \leq \varepsilon \leq \hbar \omega_0). \quad (49)$$

Подставив в (49) выражения (47) и разложив в них функции $Q_0(\epsilon)$ и $Q_1(\epsilon)$ по степеням $\frac{\epsilon}{\hbar\omega_0}$, получим

$$f_1(\varepsilon) = eF \left(\frac{1}{\tau_{\text{no}}} + \frac{1}{\tau_I} \right)^{-1} \frac{d\varepsilon}{dp} \frac{df_0}{d\varepsilon}, \quad (50)$$

где τ_{po} — низкотемпературное время релаксации при непараболическом законе дисперсии (1.118), когда рассеяние происходит на полярных оптических фононах

$$\tau_{po} = \frac{1}{eF_0 N_0} \left(\frac{m^* \hbar \omega_0}{2} \right)^{1/2} \frac{\left(1 + \frac{\hbar \omega_0}{\epsilon_g} \right)^{1/2}}{1 + \frac{2\hbar \omega_0}{\epsilon_g}}. \quad (51)$$

При параболическом законе дисперсии ($\epsilon_g \rightarrow \infty$) время (51) совпадает с известным из литературы [183] низкотемпературным временем релаксации на оптических фононах (ср. с формулой (35),

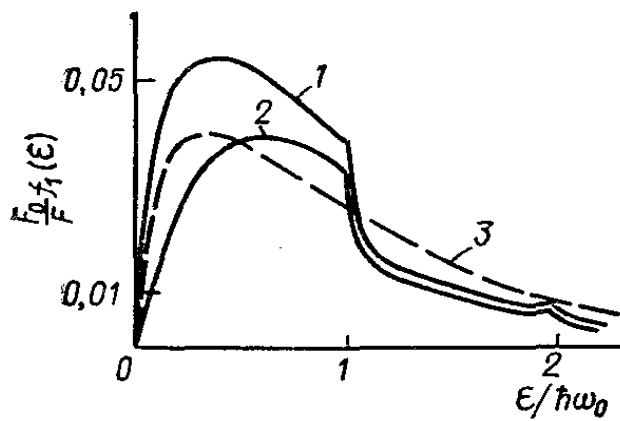


Рис. 33. Зависимость асимметричной части функции распределения от энергии электронов:

1 — рассеяние на оптических фононах; 2 — рассеяние на оптических фононах и примесях ($N_I = 10^{15} \text{ см}^{-3}$); 3 — рассеяние на оптических фононах в приближении времени релаксации; $T = 200 \text{ К}$.

в которой τ определяется соотношением $\tau = m^* \mu / e$. При законе дисперсии (1.118) непараболичес-

ность вносит в τ_{po} , а значит, и в решеточную подвижность

$$(\mu_{po})_{T \ll \hbar\omega_0} = \frac{1}{F_0 N_0} \left(\frac{\hbar\omega_0}{2m^*} \right)^{1/2} \frac{(1 + \hbar\omega_0/\varepsilon_g)^{1/2}}{1 + 2\hbar\omega_0/\varepsilon_g} \quad (52)$$

поправку порядка $\hbar\omega_0/\varepsilon_g$, а не T/ε_g , как могло бы показаться на первый взгляд. Это связано с тем, что, рассеиваясь на фононах, электрон попадает в область энергий $\varepsilon > \hbar\omega_0$. Следовательно, если средняя энергия электронов $\bar{\varepsilon} \ll \hbar\omega_0$, то влияние непараболичности будет определяться отношением $\hbar\omega_0/\varepsilon_g$, а не $\bar{\varepsilon}/\varepsilon_g$. В полупроводниках с узкой запрещенной зоной и высокоэнергичными оптическими фононами указанная поправка может оказаться важной.

Обратимся теперь к поведению f_1 и μ при изменении температуры решетки. В работе [196] система уравнений (48) при различных температурах решалась на ЭВМ М-220. Для контроля точности результатов число интервалов по $\hbar\omega_0$ бралось от 2 до 10. При температуре, ниже дебаевской, начиная с $l > 5$ все результаты оказались совпадающими, что, между прочим, подтверждало надежность метода. При температуре, выше дебаевской, расчет выполнялся с десятью интервалами $\hbar\omega_0$ по второму варианту граничных условий. В обоих вариантах решений при $T < \hbar\omega_0$ и $T > \hbar\omega_0$ численные результаты совпадали с асимптотическими, полученными в приближении времени релаксации.

На рис. 33 приведены типичные зависимости $f_1(\varepsilon)$, вычисленные⁶⁸ для InSb при $T = 200 \text{ К}$ и учете рассеяния на одних оптических фононах (кривая 1) и на оптических фононах и примесных ионах (кривая 2 при $N_I = 10^{15} \text{ см}^{-3}$). Как видно из рисунка, интересной особенностью приведенных кривых является наличие изломов при энергиях, кратных $\hbar\omega_0$. Наиболее резкий излом $f_1(\varepsilon)$ оказался в точке $\varepsilon = \hbar\omega_0$.

Наличие изломов у функции f_1 связано с дискретным изменением энергии электрона при каждом акте излучения или поглощения оптического фонона. Изломы наглядно отражают то, что электроны, ускоряясь в электрическом поле, сразу же резко уменьшают свою энергию при излучении фонона. Очевидно, с уменьше-

⁶⁸ В численных расчетах значения ε' на интервале $0 \div \hbar\omega_0$ задавались с расстоянием $0,01\hbar\omega_0$.

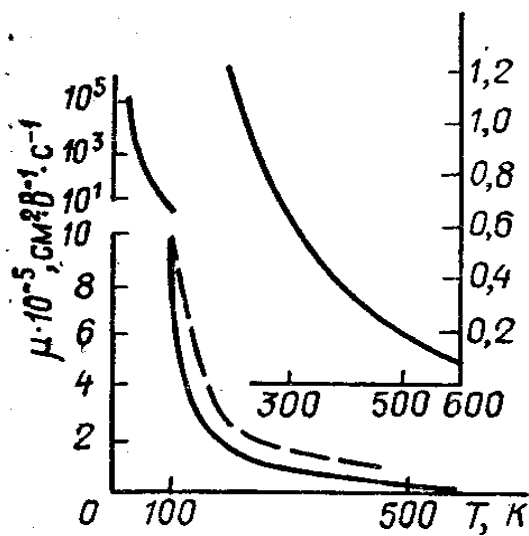


Рис. 34. Зависимость подвижности электронов от температуры решетки при рассеянии на оптических фононах. Штриховая кривая — подвижность при параболическом законе дисперсии. В области низких температур подвижность отложена в другом масштабе. Участок 200—600 К выделен отдельно в правой части рисунка.

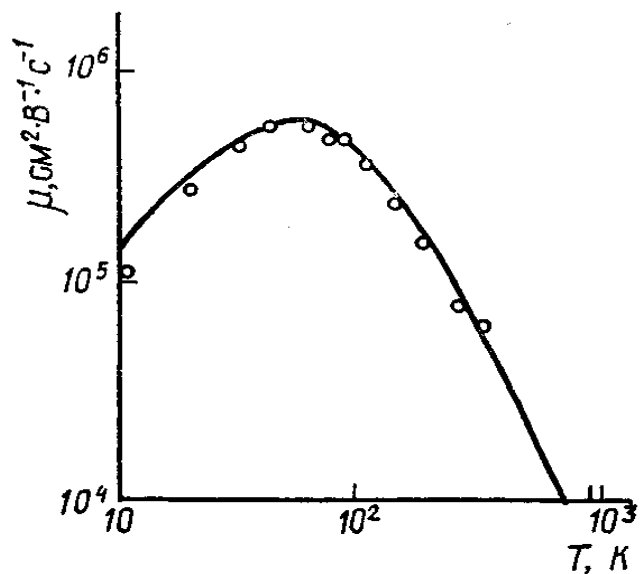


Рис. 35. Зависимость подвижности от температуры решетки при рассеянии на оптических фононах и примесях ($N_i = 6 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$). Точки — эксперимент [197].

нием температуры решетки и, значит, уменьшением энергии электронов изломы будут выражены более сильно. Повышение температуры ведет к сглаживанию изломов $f_1(\epsilon)$. К такому же сглаживанию приведут всякие квазиупругие механизмы рассеяния. В частности, увеличение концентрации примесей, кроме уменьшения абсолютного значения $f_1(\epsilon)$ во всем интервале изменения ϵ и сдвига максимума $f_1(\epsilon)$, будет еще и сглаживать ее. Это иллюстрируется кривыми 1 и 2 (рис. 33). Для сравнения штриховая кривая представляет функцию f_1 в приближении низкотемпературного времени релаксации, обусловленного одними оптическими фононами.

Подвижность электронов в n — InSb, вычисленная с помощью определенной здесь функции $f_1(\epsilon)$, представлена ⁶⁹ на рис. 34 и 35. Для иллюстрации вкладов оптического и примесного рассеяния кривые рис. 34 построены при учете одного только рассеяния на оптических фононах, а кривая рис. 35 — при учете обоих типов рассеяния (при $N_i \cong 10^{15} \text{ см}^{-3}$). Считалось, что во всей области температур электронный газ оставался невырожденным. Поэтому кривая рис. 34 является типичной для полупроводников $A_{III}B_V$ с малой концентрацией примесей и электронов.

Как и следовало ожидать (это отмечалось в предыдущем параграфе), непараболичность закона дисперсии в InSb мало сказывается на величине подвижности в области низких температур. Зато

⁶⁹ Небезынтересно подчеркнуть, что ступенчатый характер асимметричной части функции распределения получен в слабом поле, где справедлив закон Ома и где симметричная часть функции распределения $f_0(\epsilon)$ — максвелловская с температурой решетки.

она оказалась весьма заметной при более высоких температурах. Уже при $T = 100$ К учет непараболичности уменьшает подвижность при рассеянии на оптических фононах примерно в 1,5 раза. При комнатной температуре μ уменьшается в 2,5 раза, а при 400 К — почти в 4 раза.

Уменьшение подвижности с температурой, очевидно, объясняется увеличением средней эффективной массы электронов. Формально зависимость эффективной массы от энергии определяется двумя соотношениями: $m_1(\epsilon) = \frac{p^2}{2\epsilon}$ и $m_2(\epsilon) = \frac{p}{v} = p \frac{dp}{d\epsilon}$. Обе эти «эффективные» массы входят в выражение подвижности в разных степенях. По-видимому, именно степенная зависимость подвижности от $m_1(\epsilon)$ и $m_2(\epsilon)$ приводит к столь заметному уменьшению μ при сравнительно небольшом изменении средних значений m_1 и m_2 .

Интересно сравнить вычисленную температурную зависимость подвижности с данными опыта. На рис. 35 точками отмечены значения подвижности, измеренные Кинчем [197] в InSb в интервале температур от 4 К до комнатной.

Концентрация примесей в работе [197] равнялась $6 \cdot 10^{14}$ см⁻³, а концентрация электронов — $5 \cdot 10^{13}$ см⁻³. При таком соотношении между n и N_I межэлектронное взаимодействие можно не принимать во внимание. Близость концентрации примесей на опыте и в расчете позволяет произвести сопоставление расчетной кривой с измеренной не только качественное, но в известной мере и количественное.

Кинчу [197] удалось объяснить температурную зависимость подвижности лишь в интервале $T = 20 \div 50$ К, где преобладает примесный механизм рассеяния, описываемый временем релаксации (44), и непараболичность энергии не играет заметной роли. При более высоких температурах расчет, выполненный в [197] на основании введенных времен — релаксации на акустических и оптических фононах, не дал согласия с опытом.

Анализ экспериментальных данных и рассчитанной зависимости подвижности от температуры привел Кинча [197] к выводу о необходимости учета непараболичности в InSb, начиная примерно с азотных температур. Это согласуется со сделанными выше утверждениями о влиянии непараболичности. Учет ее, а также правильный учет рассеяния электронов на оптических фононах (не основанный на использовании времени релаксации) позволил (см. рис. 35) правильно ⁷⁰ объяснить измеренную зависимость $\mu = \mu(T)$ практически во всем диапазоне T . Исключение составляет только область очень низких температур, где уже необходим учет других (главным образом квазиупругих) механизмов рассеяния.

⁷⁰ Характерные изломы функции распределения $f_1(\epsilon)$ на рис. 37 были получены позже в [198] и других работах. Метод решения кинетического уравнения (46), аналогичный изложенному, был независимо развит в [199] при изучении разностных уравнений второго порядка.

Таким образом, можно заключить, что в InSb в широком интервале температур для правильного описания подвижности достаточно учесть непараболичность и только два вида рассеяния: на оптических фононах и примесях.

§ 4. ПОЛЕВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ И ПРОВОДИМОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С НЕПАРАБОЛИЧЕСКИМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ

Одной из причин, изменяющих поведение быстрых электронов и практически не влияющих на медленные, является непараболичность закона дисперсии энергии. Покажем, что непараболичность, при которой эффективная масса электрона растет с его энергией ϵ в полярных полупроводниках устраняет эффект «убегания», приводит к конечному значению $\frac{dT_e}{dF}$ при любом поле и тем самым лишает поле F^* смысла пробивного поля.

В InSb (как и в других полупроводниках $A_{III}B_V$) непараболичность энергии определяется формулой (1.118). В целях большей общности пока не станем раскрывать функциональную зависимость $p = p(\epsilon)$ и запишем интеграл столкновений с оптическими фононами (2.104) в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{po} = a \int \{ [e^{\alpha_0} f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})] \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_0) + [f(\mathbf{p}') - e^{\alpha_0} f(\mathbf{p})] \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_0) \} \frac{d^3 \mathbf{p}'}{(\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2}, \quad (53)$$

где

$$a = \frac{e^2 \omega_0 N_0}{2\pi \hbar} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0} \right). \quad (54)$$

Коэффициент a связан с введенным выше характерным для каждого полярного полупроводника полем F_0 (13) соотношением

$$a = \frac{e F_0 N_0}{2\pi m^*}. \quad (55)$$

Будем решать задачу в диффузионном приближении при высоких температурах решетки, позволяющих в интеграле (53) разложить подынтегральное выражение по степеням $\frac{\hbar\omega_0}{\epsilon}$, ограничившись квадратичными членами разложения [200]. Интеграл (53) при этом получится следующим:

$$\left(\frac{\partial f_0}{\partial t}\right)_{po} = 2\pi a \left(\frac{\hbar\omega_0}{p}\right)^2 \frac{d\epsilon}{dp} \frac{d}{d\epsilon} \left\{ \left(p \frac{dp}{d\epsilon}\right)^2 \ln \left(\frac{2p}{\hbar\omega_0} \frac{d\epsilon}{dp}\right) \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{df_0}{d\epsilon} + \frac{f_0}{T} \right] \right\}, \quad (56)$$

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{po} = -4\pi a \frac{dp}{d\epsilon} f_1(\epsilon). \quad (57)$$

Если концентрация примесных центров и электронов проводимости невелика и можно пренебречь взаимодействием электронов с примесями и друг с другом, то из кинетического уравнения

$$eF \frac{d\varepsilon}{dp} \left\{ \frac{df_0}{d\varepsilon} \cos \vartheta + \frac{1}{p} \frac{dp}{d\varepsilon} f_1(\varepsilon) \sin^2 \vartheta + \right. \\ \left. + \frac{df_1}{d\varepsilon} \cos^2 \vartheta \right\} = \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_{po} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{po} \cos \vartheta \quad (58)$$

находим

$$f_1(\varepsilon) = - \frac{eF}{4\pi a} \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right)^2 \frac{df_0}{d\varepsilon}, \quad (59)$$

$$\left(\frac{dp}{d\varepsilon} \right)^4 \left(\frac{df_0}{d\varepsilon} + \frac{f_0}{T} \right) + \frac{1}{6} \left(\frac{eF}{2\pi a \hbar \omega_0} \right)^2 \ln^{-1} \left(\frac{2p}{\hbar \omega_0} \frac{d\varepsilon}{dp} \right) \frac{df_0}{d\varepsilon} = 0. \quad (60)$$

Решением уравнения (60) является экспоненциальная функция

$$f_0(\varepsilon) = Ce^{-\mathcal{F}(\varepsilon)}, \quad (61)$$

где

$$\mathcal{F}(\varepsilon) = \frac{1}{T} \int \frac{d\varepsilon}{1 + \frac{1}{6} \left(\frac{m^*}{T} \right)^2 \left(\frac{F}{F_0} \right)^2 \left(\frac{d\varepsilon}{dp} \right)^4 \ln^{-1} \left(\frac{2p}{\hbar \omega_0} \frac{d\varepsilon}{dp} \right)}. \quad (62)$$

В слабом поле вторым слагаемым в знаменателе подынтегрального выражения (62) можно пренебречь при любом законе дисперсии. Тогда $\mathcal{F}(\varepsilon) \cong \frac{\varepsilon}{T}$. Таким образом, в слабом поле функция $f_0(\varepsilon)$ получается максвелловской с температурой решетки, как и должно быть. Эта функция уже была использована в предыдущих параграфах данной главы.

С ростом поля $\mathcal{F}(\varepsilon)$ все в большей мере отклоняется от $\frac{\varepsilon}{T}$ и вместе с тем увеличивается отличие $f_0(\varepsilon)$ от максвелловского распределения. Чтобы функция $f_0(\varepsilon)$ (61) оставалась все же нормируемой, необходимо условие конечности интеграла I :

$$I = \int_0^\infty p^2(\varepsilon) \frac{dp}{d\varepsilon} e^{-\mathcal{F}(\varepsilon)} d\varepsilon. \quad (63)$$

Конечность этого интеграла определяется поведением его подынтегрального выражения при $\varepsilon \rightarrow \infty$. Для быстрых электронов произвольный закон дисперсии в достаточно общем виде можно представить как $\varepsilon \approx \lambda p^\nu$, где λ и ν — положительные константы. По виду формулы (62) легко установить, что интеграл I получается конечным, если показатель ν удовлетворяет условию $\nu < \frac{4}{3}$.

Такое условие не удовлетворяется при параболическом законе дисперсии (где $\nu = 2$). Поэтому параболический закон в полярных кристаллах при учете одного только рассеяния электронов на полярных фононах приводит к эффекту «убегания электронов» и

необходимости обрезания функции распределения на больших энергиях (как это сделано в первых работах [179, 185]). В InSb закон дисперсии (1.118) соответствует для быстрых электронов значению $v = 1$. Поэтому функция распределения электронов в InSb и вообще в полупроводниках $A_{III}B_V$ нормируема даже в сильных полях, что снимает возможность появления эффекта «убегания»⁷¹.

Обратимся к конкретному закону дисперсии в InSb и подставим его в формулу (62). В безразмерных переменных

$$u = \frac{\varepsilon}{T} \quad (64)$$

функция $\mathcal{F}(\varepsilon)$ будет такой:

$$\mathcal{F}(u) = \int \frac{(1 + 2gu)^4 du}{(1 + 2gu)^4 + bu^2(1 + gu)^2}, \quad (65)$$

где

$$g = \frac{T}{\varepsilon_g}, \quad b = \frac{2}{3} \left(\frac{\mathcal{F}}{F_0} \right)^2 \ln^{-1} \left(\frac{4T}{\hbar\omega_0} u \frac{1 + gu}{1 + 2gu} \right). \quad (66)$$

При больших энергиях электрона функция $\mathcal{F}(u)$ ведет себя как

$$\mathcal{F}(u) \approx \text{const} + \frac{u}{1 + \frac{b}{16g^2}}. \quad (67)$$

Такое выражение $\mathcal{F}(u)$ позволяет согласно (61) приближенно трактовать распределение быстрых электронов как максвелловское с эффективной температурой

$$T_{\text{эф}} = T \left(1 + \frac{b}{16g^2} \right), \quad (68)$$

квадратично зависящий от поля и медленно изменяющийся с энергией ε .

Перейдем к случаю, когда электронную температуру можно приписать не только быстрым электронам, но и электронному газу в целом. Пусть концентрация электронов $n \gg n^{(e)}$ и функция $f_0(\varepsilon)$ — максвелловская:

$$f_0(\varepsilon) = C_0 e^{-\varepsilon/T_e}. \quad (69)$$

Электронная температура T_e находится из уравнения баланса мощности (2.15), которое здесь представим в виде

$$eF \int \varepsilon \frac{\partial f}{\partial p} d^3p = \int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{p_0} \varepsilon d^3p. \quad (70)$$

⁷¹ Сказанное, разумеется, не исключает возможности пробоя в сильном поле, связанного с размножением носителей путем ударной ионизации. Оно не исключает также возможности значительного изменения электронной температуры в определенной области напряженности поля.

Слагаемые этого уравнения после подстановки в него выражений (53), (56), (58) и (59), (69) имеют вид

$$\int \varepsilon \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{po}} d^3 \mathbf{p} = -2a (2\pi m^* \hbar \omega_0)^2 \times \\ \times C_0 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_e} \right) \int_0^\infty \left(1 + \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_g} \right)^2 e^{-\varepsilon/T_e} \ln \left(\frac{2p}{\hbar \omega_0} \frac{d\varepsilon}{dp} \right) d\varepsilon, \quad (71)$$

$$eF \int \varepsilon \frac{\partial f}{\partial p} d^3 \mathbf{p} = -\frac{4}{3} \frac{(eF)^2}{aT_e} C_0 \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2 \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right)^2}{\left(1 + \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_g} \right)^2} e^{-\frac{\varepsilon}{T_e}} d\varepsilon. \quad (72)$$

Чтобы не усложнять вычислений, мы приняли, что рассматриваемые условия задачи позволяют не учитывать изменения импульса из-за межэлектронного рассеяния и рассеяния на примесях ($n \ll n^{(p)}$). Асимметричная часть функции распределения задается поэтому, как и выше, формулой (59).

Определим интегралы формул (71), (72). Интеграл (71) сводится к табулированному. Он выражается через функцию Ei и константу Эйлера C . Однако использование точного выражения интеграла значительно усложнит последующие вычисления и их анализ. Целесообразно поэтому ограничиться более удобным, хотя и приближенным, вычислением интеграла (71). Поскольку в актуальной области его подынтегрального выражения логарифмическая функция считается плавной, вынесем ее за знак интеграла при некотором среднем значении. Тогда имеем

$$\int \varepsilon \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{po}} d^3 \mathbf{p} = -2aC_0 (2\pi m^* \hbar \omega_0)^2 \times \\ \times \overline{\ln \left(\frac{2p}{\hbar \omega_0} \frac{d\varepsilon}{dp} \right)} \left[1 + \frac{4T_e}{\varepsilon_g} + 8 \left(\frac{T_e}{\varepsilon_g} \right)^2 \right] \left(\frac{T_e}{T} - 1 \right). \quad (73)$$

В интеграле (72) перейдем к безразмерной энергии u и безразмерной электронной температуре τ :

$$u = \frac{\varepsilon}{T_e}, \quad \tau = \frac{T_e}{T}, \quad (74)$$

после чего он примет вид

$$eF \int \varepsilon \frac{\partial f}{\partial p} d^3 \mathbf{p} = -\frac{8}{3} \frac{(eFT_e)^2}{a} C_0 \varphi(g\tau), \quad (75)$$

где

$$\varphi(g\tau) = \frac{1}{2} \int_0^\infty u^2 y(u) e^{-u} du, \quad (76)$$

$$y(u) = \left(\frac{1 + g\tau u}{1 + 2g\tau u} \right)^2, \quad (77)$$

g — константа при фиксированной температуре решетки, определенная в (66).

Интеграл типа (76) хорошо изучен [201]. Он может быть представлен в виде

$$\varphi(g\tau) = A_1 y(u_1) + A_2 y(u_2) + A_3 y(u_3) + \dots \quad (78)$$

Уже двухчленная аппроксимация (при $u_1 = 2$, $u_2 = 6$)

$$\varphi(g\tau) = 0,75 \left(\frac{1 + 2g\tau}{1 + 4g\tau} \right)^2 + 0,25 \left(\frac{1 + 6g\tau}{1 + 12g\tau} \right)^2 \quad (79)$$

дает погрешность интеграла порядка 2—3%. Достаточно ею ограничиться.

Подставим выражения (73) и (75) в уравнение баланса (70):

$$\left(\frac{F}{F_0} \right)^2 = \frac{3}{4} \frac{\tau - 1}{\tau^2} (1 + 4g\tau + 8g^2\tau^2) \frac{\psi(\tau)}{\varphi(g\tau)}. \quad (80)$$

Здесь

$$\psi(\tau) = \ln \left(\frac{2p}{\hbar\omega_0} \frac{de}{dp} \right) \cong \ln \left(\frac{4T}{\hbar\omega_0} \tau \frac{1 + g\tau}{1 + 2g\tau} \right). \quad (81)$$

Уравнение (80) определяет связь между напряженностью поля F и относительным разогревом τ . При параболическом законе дисперсии ($g = 0$) оно имеет два положительных корня τ для каждого значения поля F . Это как раз соответствует двум ветвям решений, о которых ранее шла речь. На рис. 36 эти ветви представлены штриховой кривой и видно, что при поле $F > F^*$ (в InSb, например, при $T = 300$ К поле $F^* \cong 0,66F_0$) уравнение (80) не имеет действительных положительных корней. Основываясь на этом уравнении, поле F^* при $g = 0$ следовало бы рассматривать как предельное в смысле, указанном в работе [113].

Легко убедиться, что отличие g от нуля радикально изменяет зависимость τ от поля F . Простой анализ уравнения (80) показывает, что возрастание g от нуля даже на бесконечно малую величину увеличивает предельный разогрев τ , при котором смыкаются обе ветви решений. Более того, можно показать в общем виде, что при g , большем некоторого g_0 , вообще получается монотонная зависимость τ от F . По очень грубой аналитической оценке $g_0 \ll \ll \frac{1}{8}$. На самом деле у InSb, как показали более точные численные вычисления, уже при $g > 0,01$ неустойчивая ветвь решения исчезает и τ становится монотонно растущей функцией во всем интервале изменения поля. Это иллюстрируется кривыми 1—3 рис. 36, где представлена зависимость $\tau = \tau(F)$ в InSb при трех температурах $T > \hbar\omega_0$.

Отсутствие бесконечной производной на кривых $\tau(F)$ требует пересмотра представления о тепловом пробое в полярных полупроводниках. Поле F^* лишается того смысла, который ему приписывался. Пробой, если он имеет место, связан с причинами, не учтенными в уравнении (80). Одновременно и проводимость полу-

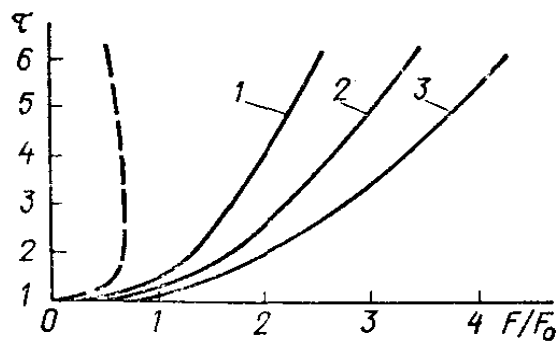


Рис. 36. Зависимость относительного разогрева электронов $\tau = \frac{T_e}{T}$ в InSb от напряженности поля. Температура: 1 — 300 К; 2 — 400 К; 3 — 500 К. Штриховая кривая соответствует параболическому закону энергии.

проводника получается другой, чем при параболическом законе дисперсии. Она, к примеру, не претерпевает резкого скачка в точке $F = F^*$.

Проводимость σ вычисляется по формуле

$$\sigma = \frac{4\pi e}{3F} \int_0^{\infty} f_1(\epsilon) p^2(\epsilon) d\epsilon. \quad (82)$$

Сюда следует подставить (59), (69) с явно записанным значением константы C_0 , которая находится из условия нормировки. Она пропорциональна интегралу I и после подстановки в (75) $\mathcal{F}(\epsilon) = \frac{\epsilon}{T_e}$ получается равной:

$$C_0 = \frac{n}{(2\pi m^* T_e)^{3/2}} \cdot \frac{(\pi g \tau)^{1/2}}{\exp\left(\frac{1}{2g\tau}\right) K_2\left(\frac{1}{2g\tau}\right)}, \quad (83)$$

где K_2 — модифицированная функция Ганкеля⁷²: $K_2(x) = K_0(x) + \frac{2}{x} K_1(x)$.

Из (82) и (83) находим

$$\sigma = \frac{\tau^{1/2} \varphi(g\tau)}{\left(\frac{1}{\pi g \tau}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{1}{2g\tau}\right) K_2\left(\frac{1}{2g\tau}\right)} \sigma_0. \quad (84)$$

Здесь σ_0 — омическая проводимость при параболическом законе дисперсии, когда $T \gg \hbar \omega_0$ (см. (34)):

$$\sigma_0 = \frac{4}{3} \cdot \frac{en}{F_0} \left(\frac{2T}{\pi m^*}\right)^{1/2} \frac{\hbar \omega_0}{T}. \quad (85)$$

Когда $g \rightarrow 0$, правая часть формулы (84) стремится к $\tau^{1/2} \sigma_0$. Следовательно, при параболическом законе (и $T \gg \hbar \omega_0$) проводимость несобственного полупроводника растет с полем пропорционально корню квадратному из относительного разогрева. Так же изменяется и подвижность. Конечность g изменяет характер зависимости $\sigma(\tau)$. Это видно из кривых рис. 37, вычисленных для

⁷² Распределение быстрых электронов при $n > n^{(e)}$ здесь тоже отличается от распределения (69). Тем не менее вкладом этих электронов в нормировку можно пренебречь, поскольку интеграл I конечен, а функция (69) быстро убывает с ϵ .

Рис. 37. Зависимость относительной проводимости от напряженности поля. Номера кривых соответствуют тем же температурам, что на рис. 36.

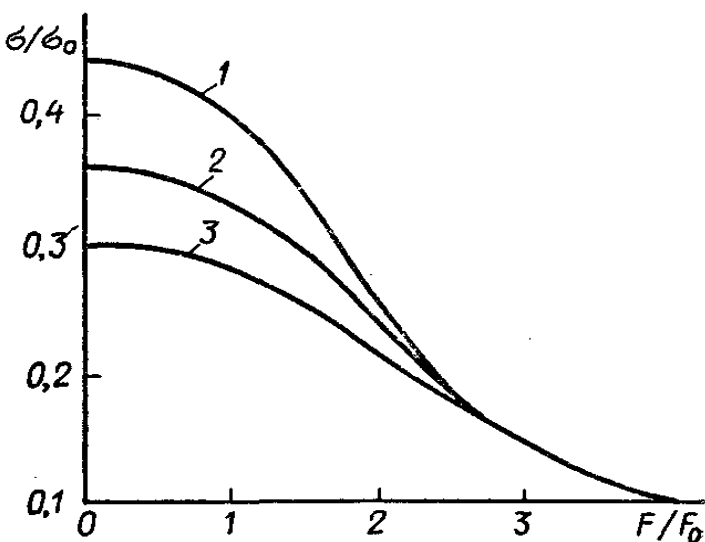
InSb при тех же температурах решетки, что и на рис. 36.

На рис. 37 обратим прежде всего внимание на заметное уменьшение омической проводимости $(\sigma)_{F=0}$ по сравнению с σ_0 и уменьшение отношения $\sigma_{F=0}/\sigma_0$ с ростом температуры T . В слабых полях проводимость, как и ранее было видно, изменяется весьма незначительно, но заметно уменьшается с температурой решетки. Так как концентрация электронов в примесном полупроводнике в рассматриваемом интервале T и F , по предположению, не зависит ни от температуры, ни от напряженности поля, то уменьшение проводимости связано исключительно с уменьшением подвижности.

Можно дать следующую наглядную интерпретацию уменьшению подвижности с ростом T и F . Закон дисперсии (1.118) в полупроводниках $A_{III}B_V$ и более общий закон, который для быстрых электронов был сформулирован в виде $\epsilon \sim \lambda p^v$ с $v < \frac{4}{3}$, эквивалентен параболическому закону с эффективной массой, растущей с энергией. Нагрев решетки или увеличение поля повышают среднюю энергию электронов, а значит, и их среднюю массу. Это, естественно, уменьшает подвижность по сравнению с той, какая была бы при постоянной эффективной массе. Как видно из рис. 37, в полярных полупроводниках непараболический закон дисперсии качественно приводит к такой же зависимости σ и μ от T и F при рассеянии электронов на полярных фононах, какую дает рассеяние на акустических фононах электронов с постоянной эффективной массой. Это затрудняет разделение на эксперименте влияния акустических и оптических фононов на проводимость.

Указанное затруднение усугубляется при низких температурах решетки, при которых рассеяние на акустических фононах вообще уже может оказаться важным. В работе [202] (при использовании сдвинутой максвелловской функции) даже было получено, что изменение с полем эффективности оптического и акустического механизмов рассеяния вместе с непараболическим законом дисперсии может при низких температурах создать условия возникновения отрицательного дифференциального сопротивления полупроводника.

Хотя приведенные выше результаты получены в предположении $T \gg \hbar\omega_0$, они могут быть обобщены на случай, когда $T \lesssim \hbar\omega_0$, но средняя энергия электрона из-за разогрева в поле становится $\bar{\epsilon} \gg \hbar\omega_0$. В этом случае в формуле (53) нельзя пользоваться разложением N_0 и e^{α_0} и вместо (56), (57) следует интегралы столкнове-



ний записать так:

$$\left(\frac{\partial f_0}{\partial t}\right)_{po} = \frac{2\pi a}{N_0} \frac{\hbar\omega_0}{p^2} \frac{d\varepsilon}{dp} \times \\ \times \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \left(p \frac{dp}{d\varepsilon}\right)^2 \ln \left(\frac{2p}{\hbar\omega_0} \frac{d\varepsilon}{dp}\right) \left[f_0(\varepsilon) + \hbar\omega_0 \left(N_0 + \frac{1}{2}\right) \frac{df_0}{d\varepsilon} \right] \right\}, \quad (86)$$

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{po} = -\frac{2\pi a}{N_0} (2N_0 + 1) \frac{dp}{d\varepsilon} f_1(\varepsilon). \quad (87)$$

Воспользовавшись выражениями (86), (87), можно убедиться, что $f_0(\varepsilon)$ при доминирующем механизме рассеяния на оптических фононах снова получается в виде (61), но с функцией

$$\mathcal{F}(\varepsilon) = \int \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega_0 \left(N_0 + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{6} m^{*2} \left(\frac{F}{F_0}\right)^2 \left(\frac{d\varepsilon}{dp}\right)^4} \times \\ \times \left[\hbar\omega_0 \left(N_0 + \frac{1}{2}\right) \ln \left(\frac{2p}{\hbar\omega_0} \frac{d\varepsilon}{dp}\right) \right]^{-1}. \quad (88)$$

При $T \gg \hbar\omega_0$ функция (88) переходит в (62).

§ 5. ЭФФЕКТ ХОЛЛА И МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ГОРЯЧИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Остановимся коротко на влиянии непараболичности и электрического поля на эффект Холла и магнетосопротивление в полярных полупроводниках. Исследованию гальваномагнитных эффектов в этих полупроводниках посвящено много работ (см., например, [203]). Сосредоточим поэтому свое внимание на определении влияния непараболичности энергии электронов и их разогрева на указанные эффекты.

В § 5 было показано, что при $T \gg \hbar\omega_0$ непараболичность даже в сравнительно слабом поле уменьшает омическую подвижность. В сильном поле непараболичность обеспечивает устойчивость решения кинетического уравнения и стабилизирует состояния электронов при весьма больших средних энергиях [204]. Тем самым она устраняет возможность пробоя при поле, большем F^* . Известные из литературы экспериментальные данные, по-видимому, подтверждают отсутствие такого пробоя. Так, например, в работе [205] в импульсных условиях были достигнуты в InSb токи при полях, превышающих 500 В/см. Такие поля намного больше поля F^* , при котором параболическая зависимость энергии от импульса должна была привести к пробоям.

Кроме устранения «теплового» пробоя, непараболичность, согласно расчету в § 5, уменьшает подвижность электронов. Поэтому представляется важным изучить ее влияние на кинетические эффекты при одновременном наличии электрического и магнитного полей.

Применительно к таким полупроводникам, как InSb, нужно еще иметь в виду следующее обстоятельство, связанное с относительно небольшой шириной запрещенной зоны: возможность размножения носителей в электрическом поле путем ударной ионизации. Авторы работы [206] даже связали полученное ими уменьшение подвижности электронов в InSb, качественно подобное приведенному в § 5, с рассеянием их на дырках, образующихся вместе со вторичными электронами. Ясно, однако, что размножение носителей в сильном поле приводит к настолько резкому росту тока, что относительно небольшое уменьшение подвижности не может быть замечено (оно, кстати, в работе [205] действительно не было замечено). Поэтому, чтобы выделить влияние поля на подвижность, нужно устранить все эффекты, связанные с ударной ионизацией. В известной степени этого можно добиться, измеряя в электрическом поле магнетосопротивление. Интересно также определение изменения коэффициента Холла с электрическим и магнитным полями. Ниже приводятся в общих чертах соответствующие вычисления.

Итак, пусть на электроны в однородном полярном полупроводнике с непараболическим законом дисперсии их энергии действуют постоянное электрическое $\mathbf{F}$ и магнитное $\mathbf{H}$ поля. Сохраняя те же предположения, что и раньше, представим функцию распределения $f(\mathbf{p})$ в виде (2.16), ограничившись диффузионным приближением

$$f(\mathbf{p}) = f_0(\epsilon) + \frac{1}{p} (\mathbf{f}_1, \mathbf{p}). \quad (89)$$

Кинетическое уравнение задачи (2.13) при наличии электрического и магнитного полей имеет следующий вид:

$$e\mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \frac{e}{m_2 c} [\mathbf{p} \mathbf{H}] \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c. \quad (90)$$

Здесь c — скорость света в вакууме, m_2 — встречавшаяся в § 4 эффективная масса электрона $m_2(\epsilon)$, равная отношению импульса к скорости. При законе Кейна (1.118) она вычисляется по формуле

$$m_2 = \frac{p}{v} = p \frac{dp}{d\epsilon} = m^* \left(1 + \frac{2\epsilon}{\epsilon_g} \right). \quad (91)$$

Если рассеяние электронов можно описать с помощью времени релаксации, зависящего от одной лишь энергии, то после подстановки функции (89) в уравнение (90) получится следующая система уравнений, определяющих функции $f_0(\epsilon)$ и $\mathbf{f}_1(\epsilon)$:

$$\frac{e}{3p^2} \frac{d}{dp} [p^2 (\mathbf{F} \mathbf{f}_1)] = \left(\frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_c, \quad (92)$$

$$e\mathbf{F} \frac{df_0}{dp} - \frac{e}{m_2 c} [\mathbf{f}_1 \mathbf{H}] = -v(\epsilon) \mathbf{f}_1(\epsilon). \quad (93)$$

Из (93) находим

$$f_1(\varepsilon) = -\frac{e}{v} \frac{df_0}{dp} \frac{F + \frac{e}{m_2 c v} [FH] + \left(\frac{e}{m_2 c v}\right)^2 (FH) H}{1 + \left(\frac{eH}{m_2 c v}\right)^2} \quad (94)$$

$\nu(\varepsilon)$ — частота столкновений, равная $\tau^{-1}(\varepsilon)$. Отсюда плотность тока j имеет вид

$$j = -\frac{4\pi}{3} e^2 \int \frac{p^3}{m_2 v} \frac{df_0}{dp} \frac{F + \frac{e}{m_2 c v} [FH] + \left(\frac{e}{m_2 c v}\right)^2 (FH) H}{1 + \left(\frac{eH}{m_2 c v}\right)^2} dp. \quad (95)$$

В приведенной записи пока не конкретизированы зависимости $p(\varepsilon)$, $m_2(\varepsilon)$ и $v(\varepsilon)$. Плотность тока j выражена в самом общем виде для всех полупроводников с изотропной энергией носителей при их взаимодействии с решеткой и примесями, описываемом временем релаксации. Из (92) — (95) видно, что магнитное поле совершенно не влияет на величину электрического тока и вообще на функцию распределения электронов (а значит, и на все гальваномагнитные эффекты), если оно параллельно приложенному электрическому полю ⁷³. Поэтому далее будем считать, что поле H перпендикулярно полю F . Не ограничивая общности, примем, что оно направлено по оси OZ . Введем следующие обозначения:

$$I_1 = \int_0^\infty \frac{p^3}{m_2 v} \cdot \frac{df_0}{d\varepsilon} \cdot \frac{d\varepsilon}{1 + \left(\frac{eH}{m_2 c v}\right)^2}, \quad (96)$$

$$I_2 = \int_0^\infty \frac{p^3}{m_2^2 v^2} \frac{df_0}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{1 + \left(\frac{eH}{m_2 c v}\right)^2}. \quad (97)$$

В этих обозначениях составляющие плотности тока (95) имеют вид

$$j_x = -\frac{4\pi e^2}{3} \left(F_x I_1 + \frac{eH}{c} F_y I_2 \right), \quad (98)$$

$$j_y = -\frac{4\pi e^2}{3} \left(F_y I_1 - \frac{eH}{c} F_x I_2 \right). \quad (99)$$

Если первоначально приложенное поле было направлено по оси x и ток течет только в этом направлении ($j_y=0$), то возникающее холловское поле в направлении y , согласно (99), получается равным

$$F_y = \frac{eH}{c} \cdot \frac{I_2}{I_1} F_x, \quad (100)$$

⁷³ Этот вывод относится только к условиям, принятым в данной задаче. В квантующем поле или при анизотропном законе дисперсии поле H влияет на гальваномагнитные эффекты.

а коэффициент Холла

$$R = \frac{F_y}{j_x H} = - \frac{3}{4\pi e c} \cdot \frac{I_2}{I_1^2 + \left(\frac{eH}{c}\right)^2 I_2^2}. \quad (101)$$

В слабых полях F и H (функция $f_0(\epsilon)$ — максвелловская) при параболическом законе дисперсии и $v = \text{const}$ формула (101) дает известное выражение $R = \frac{1}{e n c}$. При рассеянии на акустических фононах с временем релаксации (2.89) получается близкое значение $R = \frac{3\pi}{8 e n c}$. Посмотрим, как влияет на коэффициент Холла непараболичность и рассеяние на полярных оптических фононах.

Решать поставленную задачу будем (см. [207]) в предположении электронной концентрации $n \gg n_{po}^{(e)}$, но $n \ll n_{po}^{(p)}$. Это позволит нам считать функцию $f_0(\epsilon)$ максвелловской и одновременно пренебречь кулоновскими механизмами рассеяния. Частоту столкновений на оптических фононах возьмем согласно (2.107) и (13) в виде

$$v(\epsilon) = \frac{2eF_0}{p} \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{2\epsilon}{\epsilon_g} \right). \quad (102)$$

При такой частоте столкновений, используя (91), (100), определим из системы уравнений (98), (99) ток j . Далее из уравнения баланса мощности, аналогичного (70), найдем электронную температуру в зависимости от F_x и H . Процедура вычислений здесь такая же, как и в предыдущих параграфах, поэтому повторять ее не будем. Как и следовало ожидать, вычисления подтвердили, что магнитное поле весьма слабо влияет на электронную температуру.

Кривые зависимости относительного разогрева $\tau = \frac{T_e}{T}$ от F_x с ростом H только несколько снижаются, сохраняя примерно такой же вид, как на рис. 36. Мы их также здесь не приводим и обратимся к кривым зависимости коэффициента Холла и магнетосопротивления от напряженности приложенного электрического поля F_x при разных значениях H .

Удельное сопротивление полупроводника в магнитном поле из (98), (100) и (101) получается таким:

$$\rho_H = \frac{c}{e} R \frac{I_1}{I_2}, \quad (103)$$

в то время как при $H = 0$ удельное сопротивление равно

$$\rho = - \frac{3}{4\pi e^2 I_1^{(0)}}, \quad (104)$$

где $I_1^{(0)}$ — значение интеграла (96) при отсутствии магнитного поля.

Формулы (101), (103) и (104) являются достаточно общими для полупроводников с изотропным законом дисперсии. Они несколько упрощаются при максвелловского вида функции $f_0(\epsilon)$. В этом случае целесообразно в интегралы (96), (97) подставить явные выражения (69), (91), (102) и вынести из-под знаков интегралов все постоянные. Обозначив затем

$$I_3 = \frac{\pi e H_0}{n c \tau g^{1/2}} e^{\frac{1}{2g\tau}} K_2\left(\frac{1}{2g\tau}\right) I_1 =$$

$$= \int_0^\infty x^2 e^{-x} \frac{(1 + g\tau x)^2 (1 + 2g\tau x)^2 dx}{(1 + 2g\tau x)^4 + \tau x (1 + g\tau x) \left(\frac{H}{H_0}\right)^2}, \quad (105)$$

$$I_4 = \frac{\pi (e H_0)^2}{n c^2 \tau (g\tau)^{1/2}} e^{\frac{1}{2g\tau}} K_2\left(\frac{1}{2g\tau}\right) I_2 =$$

$$= \int_0^\infty x^{3/2} e^{-x} \frac{(1 + g\tau x)^{3/2} dx}{(1 + 2g\tau x)^4 + \tau x (1 + g\tau x) \left(\frac{H}{H_0}\right)^2}, \quad (106)$$

запишем коэффициент Холла (101) и сопротивление (103) в следующем виде:

$$R = \frac{3}{4 (g\tau)^{1/2}} \cdot \frac{\exp\left(\frac{1}{2g\tau}\right) K_2\left(\frac{1}{2g\tau}\right)}{I_3^2 + \left(\frac{H}{H_0}\right)^2 \tau I_4^2} \cdot \frac{I_4}{e n c}, \quad (107)$$

$$\rho_H = \frac{H_0}{\tau^{1/2}} \cdot \frac{I_3}{I_4} R. \quad (108)$$

По аналогии с полем F_0 (13) мы ввели здесь характерное для данного полупроводника при постоянной температуре магнитное поле H_0 :

$$H_0 = c F_0 \left(N_0 + \frac{1}{2} \right) \left(\frac{2m^*}{T} \right)^{1/2}. \quad (109)$$

На рис. 38 представлены в условных единицах зависимости R и относительного изменения магнетосопротивления $\frac{\Delta\rho}{\rho} \equiv \frac{\rho_H - \rho}{\rho}$ от напряженности электрического поля при нескольких значениях магнитного поля. Для иллюстрации влияния непараболичности на эффект Холла и магнетосопротивление на рис. 39 даны аналогичные зависимости, вычисленные при параболическом законе дисперсии в области электрических полей, соответствующих устойчивому решению.

На рисунках обращает на себя внимание качественно разный ход кривых при параболическом и непараболическом законах дисперсии. Коэффициент Холла при непараболическом законе растет

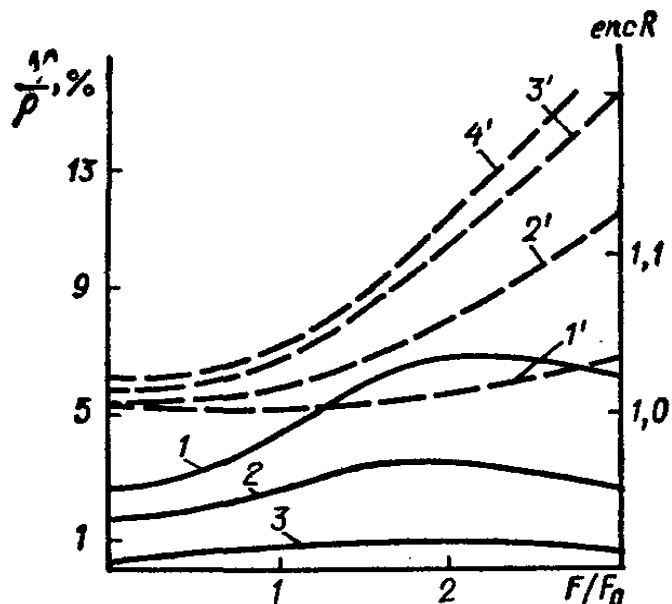


Рис. 38. Зависимость магнетосопротивления (сплошные линии) и коэффициента Холла (штриховые линии) от напряженности электрического поля; $T = 400$ К;

$$\frac{H}{H_0};$$

1 и 1' — 10; 2 и 2' — 3; 3 и 3' — 1; 4' — 0.

с полем F_x сперва медленно, а затем более быстро. Он и его производная $\frac{dR}{dF_x}$ увеличиваются с увеличением магнитного поля.

Характерен максимум $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ на рис. 38. Его положение очень незначительно изменяется при изменении напряженности магнитного поля или температуры решетки. Сама величина $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ в максимуме тоже мало меняется с температурой решетки.

Изменение сопротивления в магнитном поле является монотонной функцией F и H . В слабом магнитном поле $\Delta\rho$ квадратично (как и при параболической энергии) растет с H . В слабом электрическом поле рост ρ_n получается более быстрым, чем рост ρ . Начиная, однако, с некоторых полей F_x температура и эффективная масса электронов настолько увеличиваются, что изменение $\Delta\rho$ уже оказывается более медленным, чем изменение ρ . Это и приводит к появлению максимума на кривых зависимости $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ от F_x .

Из сопоставления кривых рис. 38 и 39 можно увидеть, что абсолютное значение $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ при непараболическом законе дисперсии энергии в несколько раз меньше, чем при параболическом. Это вместе с приведенным ходом зависимостей $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ и R может служить дополнительным критерием при установлении закона дисперсии в полупроводнике и должно приниматься во внимание при интерпретации экспериментальных данных.

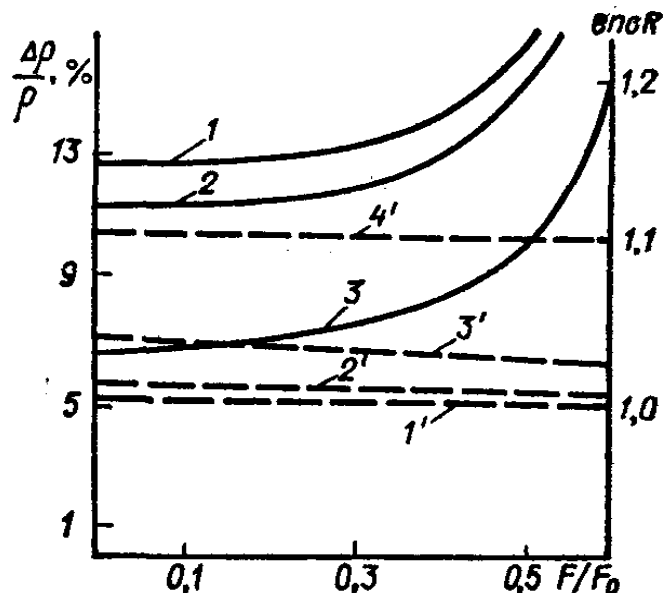


Рис. 39. Зависимость магнетосопротивления (сплошные линии) и коэффициента Холла (штриховые линии) от напряженности электрического поля при параболической энергии. Номера кривых такие же, как на рис. 38.

§ 6. ЗАВИСИМОСТЬ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ОТ НАПРАВЛЕНИЯ ДРЕЙФА НОСИТЕЛЕЙ

В настоящем параграфе рассмотрим влияние электрического и магнитного полей на некоторые оптические явления в полупроводниках. Хорошо известна теория формы края полосы собственного поглощения [208—212]. Известны также работы по влиянию постоянного поля на положение края собственного поглощения [208, 209, 213—218]. Мы же остановимся только на некоторых электрооптических и магнетооптических эффектах, непосредственно связанных с наличием свободных носителей.

Интерес к указанным эффектам возрос после открытия мощных источников излучения — квантовых генераторов. При опытах с таким излучением стали заметно проявляться нелинейные явления и неустойчивости. За сравнительно короткое время в этом направлении уже выполнено очень большое количество работ [219—226].

В большом кругу нелинейных эффектов имеется весьма актуальная область, которая пока еще привлекла к себе недостаточное внимание.

Мы имеем в виду явления в полупроводниках при одновременном воздействии на них электромагнитной волны и постоянных во времени электрических и магнитных полей. Именно такие явления должны быть особенно многообразными и интересными в полупроводниках, поскольку к ним можно приложить достаточно сильное стационарное электрическое поле и изменять в широких пределах концентрацию носителей.

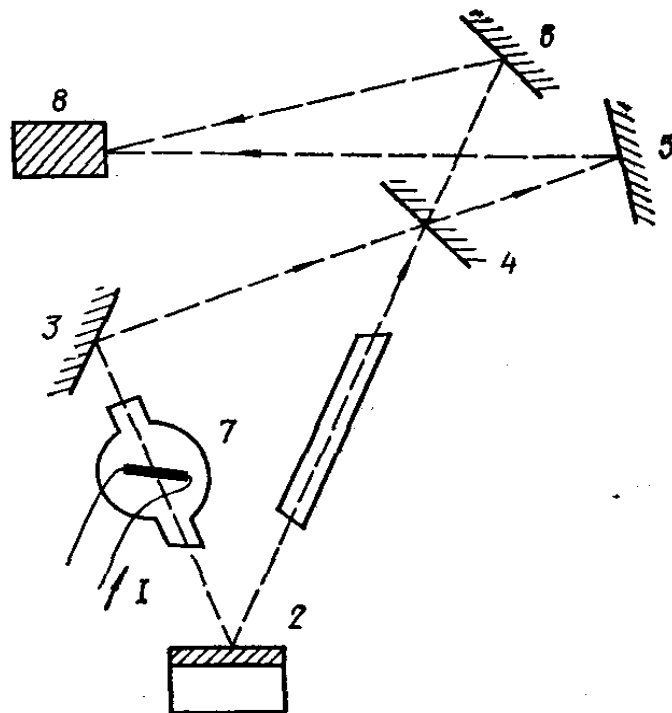
Кроме того, полупроводники предоставляют возможность сравнительно широкого выбора различных законов дисперсии энергии носителей. Поэтому можно надеяться, что электрическое поле явится удобным «инструментом», с помощью которого удастся в определенных пределах влиять на электрооптические явления в полупроводниках.

Моссу с соавторами [227] в изящном и поразительном по точности эксперименте удалось обнаружить различие скорости распространения электромагнитных волн, движущихся в полупроводнике вдоль и против направления тока. Принципиальная схема опыта Мосса представлена на рис. 40. Полупрозрачные зеркала направляли в противоположных направлениях лучи гелий-неонового лазера (длина волны $\lambda = 3,39$ мк) на полупроводник n — InAs и затем сводили эти лучи вместе в приемнике излучения (8). Концентрация электронов равнялась $5,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Полупроводник охлаждался до температуры 77 К, при которой он был достаточно прозрачным для лазерных лучей.

После того как через полупроводник пропусклся ток, параллельный направлению распространения одного из лучей, в приемнике излучения появлялись биения, свидетельствовавшие о воз-

Рис. 40. Принципиальная схема опыта Мосса:

1 — гелий-неоновый лазер; 2 — 6 — зеркала (4 — полупрозрачное), 7 — n — [nAs, 8 — приемник излучения; I — ток через полупроводник.



никновении разности хода между лучами. Частота биений росла линейно с ростом тока.

Возникшая разность хода между лучами обязана влиянию дрейфа носителей на скорость распространения электромагнитной волны в полупроводнике, т. е. влиянию дрейфа на показатель преломления. Хотя это влияние в опыте оказалось относительно небольшим, тем не менее оно имеет принципиальное значение и указывает на возможность изменения показателя преломления с помощью электрического поля.

С точки зрения теории изменение показателя преломления можно объяснить следующим образом. Дрейф носителей в поле F при существенной роли пространственной дисперсии приводит к тому, что тензор диэлектрической проницаемости среды $\kappa_{\mu\nu}(\omega, k)$ (ω — частота, k — волновой вектор) не удовлетворяет соотношению Онзагера [228, 229], т. е. $\kappa_{\mu\nu}(\omega, k) \neq \kappa_{\nu\mu}(\omega, -k)$. Уже при слабой пространственной дисперсии тензор $\kappa_{\mu\nu}(\omega, k)$, разложенный по степеням k , в присутствии поля F содержит линейные по k слагаемые [230]. Наличие этих слагаемых отражает различие условий распространения электромагнитных волн в полупроводнике, даже с кубической симметрией решетки, при различных ориентациях волнового вектора относительно направления поля F .

Для количественного описания указанного эффекта рассмотрим [231] полупроводник, к которому приложено постоянное и однородное электрическое поле напряженности F и для общности — еще и постоянное однородное магнитное поле напряженности H_0 . Пусть в полупроводнике распространяется электромагнитная волна

$$E(r, t) = E(\omega, k) e^{i(kr - \omega t)}, \quad H(r, t) = H(\omega, k) e^{i(kr - \omega t)}. \quad (110)$$

Нас будет интересовать линейный отклик газа носителей полупроводника (для определенности — электронного газа) на возмущение, вызванное электромагнитной волной при, вообще говоря, нелинейной зависимости этого отклика от напряженности постоянного поля F . Поэтому, считая функцию распределения носителей $f(p)$ в стационарных полях известной, запишем линеаризованное кинетическое уравнение для добавки $\varphi(r, p, t) =$

$= \varphi(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$ к функции $f(\mathbf{p})$. Это уравнение, линейное по переменным полям, имеет следующий вид:

$$[i(\mathbf{k}\mathbf{v} - \omega) - I] \varphi(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}) + \left(e\mathbf{F} + \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}_0] \right) \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{p}} = - \left[e\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) + \frac{e}{\omega} \mathbf{k}(\mathbf{v}\mathbf{E}) - \frac{e}{\omega} \mathbf{E}(\mathbf{k}\mathbf{v}) \right] \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}. \quad (111)$$

Здесь e — заряд электрона; $\mathbf{v}$ — его скорость; $I\varphi$ — интеграл столкновений; напряженность магнитного поля волны $\mathbf{H}(k, \omega)$ выражена через $\mathbf{E}(k, \omega)$:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{c}{\omega} [\mathbf{k}\mathbf{E}]. \quad (112)$$

Члены, пропорциональные $\mathbf{k}$ в уравнении (111), связаны с пространственной дисперсией. Ограничимся слабой пространственной дисперсией и примем

$$\frac{|\mathbf{k}\mathbf{v}|}{\omega} \ll 1. \quad (113)$$

Кроме того, будем еще считать, что частота волны ω значительно превышает циклотронную частоту и обратные времена релаксации по энергии и импульсу

$$|\varphi\omega| \gg |I\varphi|, \quad \omega\tau \gg 1. \quad (114)$$

Опираясь на указанные неравенства, представим решение уравнения (110) в виде ⁷⁴

$$\varphi(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{p}) = \varphi_0(\omega, \mathbf{p}) + \Delta\varphi(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{p}), \quad (115)$$

где $\varphi_0(\omega, \mathbf{p})$ — функция, являющаяся решением уравнения (110) при пренебрежении пространственной дисперсией. По общему методу, изложенному во второй главе, представим ее рядом по нормированным сферическим функциям $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ до значений $l = 2$:

$$\varphi_0(\omega, \mathbf{p}) = \varphi_{00}(\omega, p) + \left(\varphi_1 \frac{\mathbf{p}}{p} \right) + \sum_{m=-2}^2 \varphi_{2m}(\omega, p) Y_{2m}(\vartheta, \varphi). \quad (116)$$

Так же разложим и функцию $f(\mathbf{p})$ в стационарных полях:

$$f(\mathbf{p}) = f_0(p) + \left(f_1 \frac{\mathbf{p}}{p} \right) + \sum_{m=-2}^2 f_{2m}(p) Y_{2m}(\vartheta, \varphi). \quad (117)$$

Ограничение решения значением $l = 2$ означает наложение верхнего предела на величину поля F . Это поле, как и при диффу-

⁷⁴ Неравенства (113), (114) не представляют искусственного ограничения задачи. Они отражают ситуации, имеющие как теоретический интерес, так и интерес с точки зрения опыта.

вионном приближении, должно быть таким, чтобы дрейфовая скорость была значительно меньше хаотической, а коэффициенты разложения в (116), (117) удовлетворяли неравенствам

$$|f_0| \gg |f_1| \gg |f_{2m}|; \quad |\varphi_{00}| \gg |\varphi_1| \gg |\varphi_{2m}|, \quad (118)$$

Эти коэффициенты находятся из уравнений:

$$\left(e\mathbf{F} + \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}_0] \right) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} - If(\mathbf{p}) = 0, \\ \frac{\partial \varphi_0}{\partial \mathbf{p}} \left(e\mathbf{F} + \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}_0] \right) - (i\omega + I) \varphi_0(\omega, \mathbf{p}) = -e\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}. \quad (119)$$

Решение аналогичных уравнений уже встречалось в главе 3. Умножим их последовательно на $p \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ и $Y_{2m}^*(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ ($m = 0, +1, +2$) и проинтегрируем по всем углам:

$$\mathbf{v}_1 \mathbf{f}_1 - [\omega_c \mathbf{f}_1] = -e\mathbf{F} \frac{df_0}{dp}, \quad (120a)$$

$$(\mathbf{v}_2 + im\omega_c) f_{2m} = - \int Y_{2m}^*(\vartheta, \varphi) \left(e\mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) \left(\mathbf{f}_1 \frac{\mathbf{p}}{p} \right) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi, \quad (120b)$$

$$(\mathbf{v}_1 - i\omega) \varphi_1 - [\omega_c \varphi_1] + e\mathbf{F} \frac{d\varphi_{00}}{dp} + \mathbf{B}(\varphi_{2m}) = -e\mathbf{E} \frac{df_0}{dp} - \mathbf{D}(p), \quad (121a)$$

$$[\mathbf{v}_2 - i(\omega - m\omega_c)] \varphi_{2m} + A_{2m}(\varphi_1) = -C_{2m}(p). \quad (121b)$$

Здесь принято, что полярная ось (ось oz) направлена по $\mathbf{H}_0$, и введены обозначения:

$$\omega_c(\varepsilon) = - \frac{e\mathbf{H}_0}{m(\varepsilon)c}, \quad m(\varepsilon) = p \frac{dp}{d\varepsilon}, \quad (122)$$

$$A_{2m}(\varphi_1) = \int Y_{2m}^*(\vartheta, \varphi) \left(e\mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) \left(\varphi_1 \frac{\mathbf{p}}{p} \right) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi, \quad (123)$$

$$\mathbf{B}(\varphi_{2m}) = \frac{3}{4\pi} \int \frac{\mathbf{p}}{p} \left(e\mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) \sum_{m=-2}^2 \varphi_{2m}(p) Y_{2m}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi, \quad (124)$$

$$C_{2m}(p) = \int Y_{2m}^*(\vartheta, \varphi) \left(e\mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) \left(\mathbf{f}_1 \frac{\mathbf{p}}{p} \right) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi, \quad (125)$$

$$\mathbf{D}_{2m}(p) = \frac{3}{4\pi} \int \frac{\mathbf{p}}{p} \left(e\mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) \sum_{m=-2}^2 f_{2m}(p) Y_{2m}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (126)$$

К приведенным уравнениям (120), (121) добавим еще уравнение

$$\frac{e}{3p^2} \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (p^2 \varphi_1) - (i\omega + I) \varphi_{00}(\omega, p) = - \frac{1}{3p^2} e\mathbf{E}(\omega, k) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (p^2 \mathbf{f}_1), \quad (127)$$

которое получается после интегрирования (119) по углам ϑ, φ ⁷⁵.

⁷⁵ При выбранном направлении оси oz и изотропном законе дисперсии $\frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}_0] \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} = \omega_c(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

Из уравнений (120а), (120б) можно выразить f_1 и f_{2m} через f_0

$$f_1(p) = - \frac{v_1}{v_1^2 + \omega_0^2} \left\{ eF + \frac{1}{v_1} [\omega_0 eF] + \frac{\omega_0}{v_1^2} (\omega_0 eF) \right\} \frac{df_0}{dp}, \quad (128)$$

$$f_{20} = \left(\frac{4\pi}{45} \right)^{1/2} \frac{e^2}{v_2(\varepsilon)} p \frac{d}{dp} \left[\left(\frac{2}{v_1(\varepsilon)} F_z^2 - \frac{v_1(\varepsilon)}{v_1^2 + \omega_0^2} F_+ F_- \right) \frac{1}{p} \frac{df_0}{dp} \right], \quad (129)$$

$$f_{21} = \left(\frac{2\pi}{15} \right)^{1/2} \frac{e^2}{v_2 + i\omega_0} F_z F_- p \frac{d}{dp} \left[\left(\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_1 + i\omega_0} \right) \frac{1}{p} \frac{df_0}{dp} \right] = f_{2,-1}^*, \quad (130)$$

$$f_{22} = \left(\frac{2\pi}{15} \right)^{1/2} \frac{e^2}{v_2 + 2i\omega_0} F_-^2 p \frac{d}{dp} \left[\frac{1}{v_1 + i\omega_0} \frac{1}{p} \frac{df_0}{dp} \right] = f_{2,-2}^*, \quad (131)$$

$v_1(\varepsilon)$ и $v_2(\varepsilon)$ — частоты, равные обратным временам, релаксации, введенным во второй главе ⁷⁶.

Здесь F_+ , F_- , F_z — циркулярные компоненты поля F :

$$F_+ = F_x + iF_y, \quad F_- = F_x - iF_y. \quad (132)$$

Формулы (128) — (131) в приближении (117) полностью определяют функцию распределения в стационарных полях, если известна в этих полях ее сферически симметричная часть $f_0(p)$. Сложнее найти решение системы (121а), (121б) и (127). Будем искать его в виде ряда по степеням поля F . В нулевом приближении из (121а) следует ⁷⁷:

$$\begin{aligned} \varphi_1^{(0)} = & - \frac{v_1 - i\omega}{(v_1 - i\omega)^2 + \omega_0^2} \left\{ eE + \frac{1}{v_1 - i\omega} [\omega_0 eE] + \right. \\ & \left. + \frac{\omega_0}{(v_1 - i\omega)^2} (\omega_0 eE) \right\} \frac{df_0}{dp}. \end{aligned} \quad (133)$$

Это выражение подставим в уравнение (121б). В первом приближении функция φ_{2m} получится такой:

$$\varphi_{2m}^{(1)} = - \frac{C_{2m}(p) + A_{2m}(\varphi_1^{(0)})}{i(m\omega_0 - \omega) + v_2}. \quad (134)$$

Дальнейшая подстановка в (121а) дает

$$\varphi_1^{(1)} = - \frac{v_1 - i\omega}{(v_1 - i\omega)^2 + \omega_0^2} \left\{ L + \frac{1}{v_1 - i\omega} [\omega_0 L] + \frac{\omega_0}{(v_1 - i\omega)^2} (\omega_0 L) \right\}. \quad (135)$$

⁷⁶ Здесь учтено, что при изотропной энергии, характерной для полупроводников $A_{III}B_V$, и в частности для n — InAs (с которым была выполнена работа [227]), имеет место (2.79) и (2.17).

⁷⁷ Разложение по степеням F следует понимать в смысле явного выделения в функциях φ_{00} , φ_1 , φ_{2m} зависимости от степени F . Нужно, однако, иметь в виду, что функция f_0 , через которую эти функции выражаются, сама может зависеть (и даже нелинейно) от поля F .

Мы обозначили

$$L = eF \frac{d\varphi_{00}}{dp} + B(\varphi_{2m}^{(1)}) + D(p). \quad (136)$$

Функция φ_{00} может быть определена из уравнения (127) после подстановки в него $\varphi_1^{(0)}$ из (133).

Выполненная процедура определения функции $\varphi_0(\omega, p)$ позволяет перейти к нахождению функции $\Delta\varphi(\mathbf{k}, \omega, p)$, ответственной за эффект работы [227]. В силу неравенства (113) она должна быть решением уравнения (111) после подстановки в него функции (115) и линеаризации уравнения по волновому вектору $\mathbf{k}$. Уравнение при учете того, что $\varphi_0(\omega, p)$ является решением (119), примет вид

$$\begin{aligned} & \left(eF + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}_0] \right) \frac{\partial \Delta\varphi}{\partial p} - (i\omega + I) \Delta\varphi = \\ & = -i(\mathbf{k} \mathbf{v}) \varphi_0 - \frac{e}{\omega} [\mathbf{k} (\mathbf{v} \mathbf{E}) - \mathbf{E} (\mathbf{k} \mathbf{v})] \frac{\partial f}{\partial p}. \end{aligned} \quad (137)$$

Решение этого уравнения будем искать в аналогичном (116) виде

$$\Delta\varphi(\mathbf{k}, \omega, p) = \Delta\varphi_0(\mathbf{k}, \omega, p) + \left(\Delta\varphi_1 \frac{p}{p} \right) + \sum_{m=-2}^2 \Delta\varphi_{2m} Y_{2m}(\vartheta, \varphi). \quad (138)$$

Коэффициенты ряда (138) тогда по аналогии с (120), (121) определяются уравнениями

$$(i\omega + I) \Delta\varphi_0 = \frac{i}{3} v(\mathbf{k} \varphi_1), \quad (139a)$$

$$\begin{aligned} & (v_1 - i\omega) \Delta\varphi_1 - [\omega_0 \Delta\varphi_1] + eF \frac{d\Delta\varphi_0}{dp} + B(\Delta\varphi_{2m}) = \\ & = -ikv\varphi_{00} + \frac{e}{m(\varepsilon)\omega} [\mathbf{k} (\mathbf{E} \mathbf{f}_1) - \mathbf{E} (\mathbf{k} \mathbf{f}_1)] - G(\varphi_{2m}), \end{aligned} \quad (139б)$$

$$[i(m\omega_0 - \omega) + v_2] \Delta\varphi_{2m} = \mathcal{E}_{2m}(\varphi_1), \quad (139в)$$

где

$$G(\varphi_{2m}) = \frac{3i}{4\pi} \int \frac{p}{p} (\mathbf{k} \mathbf{v}) \sum_{m=-2}^2 \varphi_{2m}(\omega, p) Y_{2m}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi, \quad (140)$$

$$\mathcal{E}_{2m}(\varphi_1) = -i \int (\mathbf{k} \mathbf{v}) \left(\varphi_1 \frac{p}{p} \right) Y_{2m}^*(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (141)$$

Уравнение (139б) совпадает по форме с уравнением (121а). Поэтому сразу можно написать выражение $\Delta\varphi_1$ по аналогии с (128)

$$\Delta\varphi_1 = - \frac{v_1 - i\omega}{(v_1 - i\omega)^2 + \omega_0^2} \left\{ M + \frac{1}{v_1 - i\omega} [\omega_0 M] + \frac{\omega_c}{(v_1 - i\omega)^2} (\omega_c M) \right\}. \quad (142)$$

Введенный здесь вектор $\mathbf{M}$ по определению равен:

$$\mathbf{M} = ikv\varphi_{00} + \mathbf{B}(\Delta\varphi_{2m}) + \mathbf{G}(\varphi_{2m}) - \frac{e}{m(e)\omega} [\mathbf{k}(\mathbf{E}\mathbf{f}_1) - \mathbf{E}(\mathbf{k}\mathbf{f}_1)] + e\mathbf{F} \frac{d\Delta\varphi_0}{dp}. \quad (143)$$

В ответе опущены члены более высокого порядка, чем $k_i F_j$.

Функции $\mathbf{f}_1(p)$ и $\mathbf{G}(\varphi_{2m})$ в (143) были определены выше. Функции $\varphi_{00}(p)$ и $\Delta\varphi_{2m}$ могут быть найдены с требуемой точностью из уравнений (139а), (139в). Поэтому вектор $\mathbf{M}$ в формуле (142) является известной функцией импульса p . Отсюда $\Delta\varphi_1$ — тоже известная функция. Детальная запись ее слишком громоздка, и мы ее не приводим. Ниже по мере надобности будут даны лишь частные значения $\Delta\varphi_1$ и связанного с ней значения (в линейном по $\mathbf{k}$ приближении) переменного тока $\Delta\mathbf{j}$. Эти частные значения будут относиться к поперечным волнам ($(\mathbf{k}\mathbf{E}) = 0$), к определенным ориентациям векторов $\mathbf{F}$, $\mathbf{H}_0$, $\mathbf{k}$ и $\mathbf{E}$ и к частотам, удовлетворяющим неравенствам (114).

Амплитуда $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$ электромагнитной волны (110), волновой вектор $\mathbf{k}$ и частота ω связаны друг с другом волновым уравнением Максвелла

$$\begin{aligned} k^2 \mathbf{E} - \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{E}) &= \frac{\omega^2}{c^2} \kappa_0 \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) + \frac{4\pi i \omega}{c^2} \mathbf{j}_E(\omega, \mathbf{k}) = \\ &= \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\kappa}(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}), \end{aligned} \quad (144)$$

где $\mathbf{j}_E(\omega, \mathbf{k})$ — Фурье-компонента плотности переменного тока;

$$\mathbf{j}_E = e \int \mathbf{v} \left(\varphi_1 + \Delta\varphi_1, \frac{\mathbf{p}}{p} \right) d^3 p, \quad (145)$$

$\hat{\kappa}(\omega, \mathbf{k})$ — тензор диэлектрической проницаемости среды. Известно, что в присутствии постоянного электрического поля, даже в пространственно однородных кубических полупроводниках со свободными носителями, разложение этого тензора по волновому вектору начинается с линейных по k членов [232]. Из общих соображений у кристаллов с кубической симметрией решетки компоненты $\hat{\kappa}(\omega, \mathbf{k})$ можно представить в виде

$$\kappa_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \kappa_0 \delta_{ij} + \kappa_{ij}(\omega) + \alpha_{ij, i' j'} F_{i'} k_{j'} + \beta_{ij, i' j' k'} k_{i'} k_{j'} + \dots \quad (146)$$

Здесь, как и ранее, κ_0 — скалярная диэлектрическая проницаемость без учета вклада в нее свободных носителей. Этот вклад учитывается остальными членами ряда (146). Влияние пространственной дисперсии отражено в (146) последними двумя слагаемыми⁷⁸.

⁷⁸ Разложение (146) предполагает, конечно, наличие членов более высокого порядка и по $\mathbf{F}$, и по $\mathbf{k}$ (например, $F_{i'} F_{j'} F_{k'} k_{l'}$, $F_{i'} F_{j'} k_{k'} k_{l'}$ и т. д.). Мы ими

Из уравнения (144) получаем следующее дисперсионное уравнение, которым будем пользоваться для определения зависимости волнового вектора $\mathbf{k}$ от частоты волны ω :

$$\text{Det} \left\| \kappa_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \frac{c^2}{\omega^2} k^2 \delta_{ij} \right\| = 0. \quad (147)$$

Рассмотрим следующие взаимные ориентации векторов $\mathbf{F}$, $\mathbf{H}_0$, $\mathbf{E}$, $\mathbf{k}$, при которых поперечные электромагнитные волны не перепутываются с продольными.

1. С л у ч а й $\mathbf{F} \perp \mathbf{H}_0$, $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}_0$. При такой ориентации векторов проекции плотности тока $\mathbf{j}_E$ на плоскость, перпендикулярную $\mathbf{H}_0$, согласно (133), (135), (142) и (145) линейно зависят только от составляющих поля волны E_x и E_y , но не зависят от E_z . Проекция же $\mathbf{j}_E$ на ось z пропорциональна E_z и не зависит от E_x и E_y . Поэтому $\kappa_{iz}(\omega, \mathbf{k}) = \kappa_{zi}(\omega, \mathbf{k}) = 0$ ($i = x, y$). Тем самым дисперсионное уравнение (147) распадается на два уравнения:

$$\kappa_{zz}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{c^2}{\omega^2} k^2, \quad (148a)$$

и

$$\begin{vmatrix} \kappa_{xx}(\omega, \mathbf{k}) - \frac{c^2}{\omega^2} k^2 & \kappa_{xy}(\omega, \mathbf{k}) \\ \kappa_{yx}(\omega, \mathbf{k}) & \kappa_{yy}(\omega, \mathbf{k}) - \frac{c^2}{\omega^2} k^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (148b)$$

Когда удовлетворяется уравнение (148a), компоненты поля E_x и E_y могут равняться нулю, но $E_z \neq 0$. Это соответствует распространению поперечной электромагнитной волны с поляризацией $\mathbf{E} \parallel \mathbf{H}_0$. Дисперсия такой волны определяется компонентой тензора $\kappa_{zz}(\omega, \mathbf{k})$, которую целесообразно для выяснения влияния постоянного поля на скорость распространения волны представить в виде $\kappa_{zz}(\omega, \mathbf{k}) = \kappa_{zz}^{(0)}(\omega) + \kappa_{zz}^{(1)}(\omega, \mathbf{k})$. Можно показать, что зависящая от волнового вектора часть $\kappa_{zz}(\omega, \mathbf{k})$ равна:

$$\kappa_{zz}^{(1)}(\omega, \mathbf{k}) = (\mathbf{k} \mathbf{R}), \quad (149)$$

где $\mathbf{R}$ — двумерный вектор, составляющие которого имеют вид

$$\mathbf{R} \equiv \mathbf{R}(\mathbf{F}) \equiv \left\{ \hat{\gamma} \frac{v_1^2 F_x - \omega_c v_1 F_y}{\omega_o^2 + v_1^2}, \hat{\gamma} \frac{\omega_c v_1 F_x + v_1^2 F_y}{\omega_c^2 + v_1^2} \right\}, \quad (150)$$

пренебрегаем в силу неравенств (113), (118), позволяющих также в (142), (143) ограничиться членами первого порядка по $\mathbf{F}$ (т. е. выражениями, содержащими f_1 , $\varphi_1^{(1)}$ и $\varphi_{2m}^{(1)}$).

$\hat{\gamma}$ — интегральный оператор. Его действие на произвольную функцию $\psi(\varepsilon)$ определяется следующим образом:

$$\hat{\gamma}\psi(\varepsilon) = - \frac{32\pi^2 e^3}{15\omega^3} \int \psi(\varepsilon) \frac{df_0}{d\varepsilon} \frac{p^5(\varepsilon)}{v_1 m^4(\varepsilon)} \left(\frac{d\varepsilon}{dm(\varepsilon)} \right)^{-1} d\varepsilon. \quad (151)$$

Из (151) видно, что в случае параболического закона дисперсии $\left(\frac{dm}{d\varepsilon} = 0 \right) \hat{\gamma}\psi(\varepsilon) = 0$ при любой функции $\psi(\varepsilon)$. Отсюда $\kappa_{zz}^{(1)}(\omega, \mathbf{k}) = 0$, и, значит, скорость распространения волны при постоянной массе носителя не зависит от направления постоянного поля $\mathbf{F}$.

При непараболическом законе дисперсии компонента $\kappa_{zz}^{(1)}(\omega, \mathbf{k}) \neq 0$. Для ее вычисления введем угол Холла φ_H , тангенс которого (считая внешнее поле параллельным оси x) определяется интегралами:

$$\operatorname{tg} \varphi_H = \frac{F_y}{F_x} = - \int \frac{p^3 \omega_c}{m(\varepsilon) (\omega_c^2 + v_1^2)} \frac{df_0}{d\varepsilon} d\varepsilon / \int \frac{v_1 p^3}{m(\varepsilon) (\omega_c^2 + v_1^2)} \frac{df_0}{d\varepsilon} d\varepsilon. \quad (152)$$

Обозначим $\operatorname{tg} \varphi_H = - \left(\frac{\overline{\omega}_c}{v_1} \right) = - (\overline{\omega}_c \tau)$, где $\tau = v_1^{-1}$.

После этого (150) приобретает более удобный вид

$$R(F) = F_x \left\{ \hat{\gamma} \frac{1 + \omega_c \tau (\overline{\omega}_c \tau)}{1 + (\omega_c \tau)^2}, \hat{\gamma} \frac{\omega_c \tau - (\overline{\omega}_c \tau)}{1 + (\omega_c \tau)^2} \right\}. \quad (153)$$

Подставим далее (153) в уравнение (148а) и решим его относительно $\mathbf{k}$, учтя при этом неравенства (113). Приведем ответ для показателя преломления $n = \frac{c}{\omega} k$

$$n = n(s) = \sqrt{\kappa_{zz}^{(0)}(\omega)} + \frac{\omega}{2c} (sR), \quad \left(s \equiv \frac{\mathbf{k}}{k}, s \perp \mathbf{H}_0 \right). \quad (154)$$

Отсюда разность показателей преломления волн, распространяющихся в противоположных направлениях, равна

$$\Delta n = n(s) - n(-s) = \frac{\omega}{c} (sR). \quad (155)$$

Если постоянное магнитное поле отсутствует, то $R = \hat{\gamma}\mathbf{F}$ и

$$|\Delta n| = \left| \frac{\omega}{c} \hat{\gamma}(s\mathbf{F}) \right| = \left| \frac{32\pi^2 e^3}{15\omega^2 c} (s\mathbf{F}) \int \frac{p^5 \tau}{m^4(\varepsilon)} \frac{dm}{d\varepsilon} \frac{df_0}{d\varepsilon} d\varepsilon \right|. \quad (156)$$

Отсюда видно, что при отсутствии магнитного поля ($H_0 = 0$) разность показателей преломления максимальна, когда $\mathbf{k} \parallel \mathbf{F}$, и равна нулю при $\mathbf{k} \perp \mathbf{F}$.

При $H_0 \neq 0$ возникающее поле Холла отклоняет направление результирующего электрического поля от приложенного $\mathbf{F}$ (и от направления постоянного тока). Вследствие этого минимальное значение Δn будет не при $\mathbf{k} \perp \mathbf{J}_0$, а при $\mathbf{k} \perp \mathbf{R}$. Так как направление $\mathbf{R}$ согласно (150), (153) зависит от величины напряженности магнитного поля $\mathbf{H}_0$, то Δn зависит от H_0 . По формуле (155) Δn зависит

также от угла между направлением распространения волны и направлением тока j_0 .

Приведенный вывод изменится, если электронный газ в полупроводнике предельно вырожден. В этом случае функция $f_0(\epsilon)$ является функцией Ферми, она практически равна нулю при $\epsilon > \epsilon_F$. Производная этой функции по энергии $\left(\frac{df_0}{d\epsilon}\right)_{\epsilon=\epsilon_F}$ с той же точностью пропорциональна $\delta(\epsilon - \epsilon_F)$, и поэтому все интегралы (151), (152) пропорциональны коэффициентам подынтегральных выражений при $\frac{df_0}{d\epsilon}$, взятым при $\epsilon = \epsilon_F$. Отсюда $\hat{\gamma}(\omega_c\tau - \overline{\omega_c\tau}) = 0$, составляющая $R_y(F)$ согласно (153) обращается в нуль, и магнитное поле в $R_x(F)$ выпадает. Таким образом, магнитное поле в случае вырожденного электронного газа не влияет на Δn . Интегрируя (156), получаем

$$|\Delta n| = \left| (sj_0) \frac{8\pi e^2(\epsilon)}{5\omega^2 cm^3(\epsilon)} \frac{dm(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=\epsilon_F}. \quad (157)$$

Здесь j_0 — плотность постоянного тока при отсутствии магнитного поля. Она вычисляется по формулам главы 2 и в диффузионном приближении для вырожденного электронного газа равна

$$j_0 \cong \frac{4\pi}{3} eF\tau(\epsilon) \frac{p^3(\epsilon)}{m(\epsilon)} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F}. \quad (158)$$

2. Конфигурация Фарадея: $\mathbf{k} \parallel \mathbf{F} \parallel \mathbf{H}_0$. Как и выше, представим тензор диэлектрической проницаемости в виде $\hat{\kappa}(\omega, \mathbf{k}) = \hat{\kappa}^{(0)}(\omega) + \hat{\kappa}^{(1)}(\omega, \mathbf{k})$. Тензор $\kappa^{(0)}(\omega)$, согласно (144) и значению тока $j_E(\omega)$ (133), (135) и (145), имеет вид

$$\hat{\kappa}^{(0)}(\omega) = \begin{pmatrix} \kappa_1^{(0)}(\omega), & -\kappa_2^{(0)}(\omega), & 0 \\ \kappa_2^{(0)}(\omega), & \kappa_1^{(0)}(\omega), & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_3^{(0)}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (159a)$$

Аналогичный вид имеет и тензор $\hat{\kappa}^{(1)}(\omega, \mathbf{k})$:

$$\hat{\kappa}^{(1)}(\omega, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} (\mathbf{kF}) a_1(\omega), & -(\mathbf{kF}) b_1(\omega), & 0 \\ (\mathbf{kF}) b_1(\omega), & (\mathbf{kF}) a_1(\omega), & 0 \\ 0, & 0, & \kappa_{zz}^{(1)}(\omega, \mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (159b)$$

Дисперсионное уравнение (147) для поперечной волны при конфигурации Фарадея ($E_z = 0$) с точностью до линейных по $(\mathbf{kF})$ членов согласно (159a), (159b) можно записать в виде двух множителей:

$$\det \left\| \kappa_{ij}(\omega, \mathbf{k}) - \frac{c^2}{\omega^2} k^2 \delta_{ij} \right\| \cong \left[\frac{c^2}{\omega^2} k^2 - (a_1 + ib_1)(\mathbf{kF}) - (\kappa_1^{(0)} + i\kappa_2^{(0)}) \right] \times \\ \times \left[\frac{c^2}{\omega^2} k^2 - (a_1 - ib_1)(\mathbf{kF}) - (\kappa_1^{(0)} - i\kappa_2^{(0)}) \right] = 0. \quad (160)$$

Приравняв нулю каждую квадратную скобку (160), получим значения $k = k(\omega)$ для двух волн. Легко убедиться, что эти волны циркулярно поляризованы с противоположными направлениями вращения вектора E . Связь между компонентами E_x и E_y волны, определяемой первой квадратной скобкой, следующая: $E_y = -iE_x$. Назовем условно эту волну правополяризованной и обозначим ее амплитуду $E^{(+)}$. Вторую волну, в которой $E_y = iE_x$, назовем левополяризованной и ее амплитуду обозначим $E^{(-)}$.

Показатели преломления двух волн (160), вычисленные с той же точностью, что и ранее, равны:

$$n^{(\pm)}(s) \cong (\kappa_1^{(0)} \pm i\kappa_2^{(0)})^{1/2} + \frac{\omega}{2c} (a_1 \pm ib_1) (sF). \quad (161)$$

В эту формулу нужно подставить явные выражения входящих в нее величин, для чего следует при конфигурации Фарадея определить тензор $\hat{\kappa}(\omega, k)$. Мы, однако, делать этого не будем и приведем лишь для иллюстрации значение разности показателей преломления лево- и правополяризованных волн, распространяющихся в противоположных направлениях:

$$\Delta n = n^{(-)}(s) - n^{(+)}(-s) = \frac{2c}{\omega} \Theta_0 - \frac{32\pi^2 e^3}{15\omega^2 c} F \int \frac{p^5 \tau}{m^4(e)} \frac{dm(e)}{de} \frac{df_0}{de} de, \quad (162)$$

где Θ_0 — удельный угол вращения Фарадея. Он отличен от нуля и при отсутствии постоянного поля F , и пропорционален разности показателей преломления двух циркулярно поляризованных волн в замагниченной плазме.

Второе слагаемое в (162) непосредственным образом связано с наличием поля F и дрейфом носителей. Это слагаемое, по существу, определяется тем же интегралом (156), что и Δn при $F \perp H_0$, $k \perp H_0$. Как и там, оно обращается в нуль при параболическом законе дисперсии. В случае вырожденного электронного газа численное значение этого слагаемого (с учетом того, что здесь $s \parallel j_0$) совпадает с (157).

Оценим по формуле (157) величину Δn , соответствующую параметрам эксперимента [227]. Подставим в (157) зависимость $m(e)$ от e по закону Кейна (который справедлив для $n - \text{InAs}$). Найдем

$$\Delta n \approx 1,55 \cdot 10^{-11} j_0 \text{ см}^2/\text{А}. \quad (163)$$

Это значение примерно в 2,5 раза меньше полученного в опыте. По-видимому, такое расхождение в основном связано с тем, что энергия кванта электромагнитной волны в работе [227] $\hbar\omega = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ при $\lambda = 3,39 \text{ мк}$ уже близка к ширине запрещенной зоны InAs ($\epsilon_g \approx 0,4 \text{ эВ}$). Эта близость приводит к тому, что начинают заметным образом проявляться виртуальные межзонные переходы [233]. Обобщение теории показало, что виртуальные переходы вносят аддитивный вклад в значение Δn . Их учет [234] приблизил теоре-

тический результат к опытному. Нужно, впрочем, заметить, что сопоставление теории с единственным пока опытом вообще затруднительно, поскольку в работе [227] не приведено всех деталей эксперимента, и в частности не указана поляризация волны. Целесообразно в дальнейшем выполнение аналогичных опытов. Их интерпретация может принести полезную информацию о структуре и параметрах энергетических зон.

Обобщив приведенные формулы, можно описать электрооптические эффекты (и в том числе нелинейные по переменному полю), связанные с горячими носителями в полупроводнике. Объем книги не позволяет остановиться на этих эффектах, и мы ограничимся ссылками на литературу [235—285].

ФЛУКТУАЦИИ И МЕТОДЫ ИХ ОПИСАНИЯ

§ 1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Свойства микросистем в физике обычно описывают заданием набора макроскопических величин, представляющих собой статистически средние значения от соответствующих микроскопических величин. Примером таких величин могут служить плотности тока и заряда, электрические и магнитные поля в среде и т. п. Статистически средний смысл имеют также одночастичные функции распределения электронов, дырок, фононов и любых других квазичастиц.

Макроскопические величины, естественно, могут испытывать отклонения от своих средних значений, или, как говорят, флуктуировать. Флуктуации физических величин обуславливают широкий круг явлений, и их изучение представляет большой научный интерес.

С практической точки зрения интерес к флуктуационным явлениям вызван прежде всего тем обстоятельством, что флуктуации напряжения или тока в любой измерительной аппаратуре определяют нижний предел чувствительности прибора. Чтобы знать этот предел и достичь его, надо изучать источники и характер различных шумов и уметь минимизировать отношение шума к сигналу. Слово «шум» — это другое название флуктуационных явлений, возникшее из-за того, что флуктуационное напряжение или ток, поданные из усилителя низкой частоты на громкоговоритель, вызывают шипящие звуки. Отсюда и произошло название «шум». Основными типами шумов в полупроводниках являются: тепловой, дробовой, генерационно-рекомбинационный, междолинный, модуляционный [286].

Тепловой шум, называемый также шумом Джонсона, возникает вследствие случайного характера теплового движения свободных носителей и проявляется как флуктуация напряжения на разомкнутых контактах.

Под дробовым шумом в узком смысле слова понимают флуктуации, связанные со статистикой прихода носителей в кристалл из внешней цепи и ухода из него. Он становится существенным

в полупроводниковых приборах с запорными слоями. Дробовой шум обусловлен дискретной природой заряда, переносимого отдельными носителями, и аналогичен дробовым шумам, возникающим в электровакуумных лампах.

К шумам этого же типа относятся генерационно-рекомбинационный и междолинный шум. Генерационно-рекомбинационный шум связан со случайным характером генерации (теплового заброса электронов в зону проводимости) и рекомбинации.

Междолинный шум вызван флуктуациями числа переходов между неэквивалентными минимумами в многодолинных полупроводниках. Носители в разных долинах дают разный вклад в ток, поэтому флуктуации их населенностей вызывают флуктуации тока, если к полупроводнику приложено напряжение.

Модуляционный шум называют еще фликер-шумом или $1/f$ -шумом. Природа этого шума еще не полностью понята. Не исключено, что данный тип шумов обусловлен многими механизмами. Название $1/f$ -шум связано с тем, что спектральная плотность этого шума обратно пропорциональна частоте (f). Низкочастотные флуктуации такого типа могут превосходить другие типы шумов. Поэтому $1/f$ -шумы называют иногда избыточными шумами.

До недавнего времени одним из наиболее убедительных механизмов, ответственных за $1/f$ -шум, считался механизм, связывающий упомянутый тип шумов с наличием в слое поверхностного окисла ловушек с широким набором постоянных времен жизни носителей [287]. Позже, однако (см., например, [288—289]), был сделан вывод, что $1/f$ -шум является объемным эффектом и не связан с поверхностью образца.

В последнее время появился ряд работ, в которых фликер-шум объясняется локальными флуктуациями температуры образца [290—294].

Некоторые исследователи считают, что фликер-шум вообще не связан со стационарными процессами, а вызывается процессами старения образца, диффузионным размытием $p-n$ -переходов и т. п. [295—299].

Состояние дел по экспериментальному исследованию шумов освещено также в обзоре [300]. Различные виды шумов в полупроводниках в термодинамическом равновесии описаны, например, в работе [286].

Следует заметить, что теория флуктуаций как в термодинамически равновесных, так и в неравновесных системах может быть развита в едином подходе на базе кинетического уравнения. Исторически, однако, ситуация сложилась так, что построение теории шумов в термодинамическом равновесии (начатое задолго до появления первых работ по неравновесным системам) пошло другим путем. Дело в том, что в случае термодинамического равновесия существует довольно общая (так называемая флуктуационно-диссипативная) теорема, устанавливающая связь между характеристиками шумов и соответствующими кинетическими коэффициентами.

Она и служит основой для исследования флуктуационных явлений. В неравновесных системах, какими являются горячие электроны в полупроводниках, такая теорема несправедлива.

За последнее десятилетие в многочисленных работах было показано, что рассмотрение шумов в неравновесных ситуациях может быть последовательно проведено только в кинетическом подходе. Работы эти разбросаны по многим журналам, и их результаты не нашли еще отражения в существующих монографиях по горячим электронам (экспериментальные достижения в этой области изложены отчасти в [53]).

Задача данной главы — показать, как из первых принципов можно прийти к концепции флуктуаций одночастичных функций квазичастиц (электронов, фононов), как получить уравнения для флуктуирующей части функции распределения при различных механизмах рассеяния и, наконец, как определить статистические свойства входящих в эти уравнения источников флуктуаций. Знание этих основ поможет читателю свободно ориентироваться в текущей литературе или самому работать в этом направлении.

Рассмотрение конкретных эффектов, к сожалению, выходит за рамки данной книги.

§ 2. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Рассмотрим микроскопическую классическую функцию распределения

$$f_m(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_{\alpha=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_\alpha(t)), \quad (1)$$

характеризующую микроскопическое распределение электронов в фазовом пространстве $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. В формуле (1) $\mathbf{r}_\alpha(t)$ — координата, а $\mathbf{p}_\alpha(t)$ — импульс α -го электрона. Суммирование ведется по всем электронам системы.

Использованная до сих пор в предыдущих главах функция распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ представляет собой статистически среднее от микроскопической функции распределения

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \langle f_m(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle. \quad (2)$$

Здесь усреднение производится по распределению различных возможных состояний рассматриваемого статистического ансамбля из N электронов, т. е. по полной функции, зависящей от координат и импульсов всех N частиц $F(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t)$ (называемой еще функцией распределения Лиувилля). Функции $\mathbf{r}_\alpha(t)$ и $\mathbf{p}_\alpha(t)$ зависят от начальных значений координат и импульсов всех частиц. Статистическое усреднение производится по этим начальным значениям.

Микроскопическая функция распределения (1) задана чисто формально, поскольку для фактического ее задания нужно было бы знать временную зависимость координат и импульсов всех час-

тиц, т. е. решить многочастичную задачу. Естественно, решить многочастичную задачу не представляется возможным, но в этом и нет необходимости.

В предыдущих главах был рассмотрен широкий круг явлений, для описания которых достаточным оказалось знание усредненной функции (2). Здесь же мы займемся явлениями, обусловленными малыми отклонениями точной функции (1) от ее среднестатистического значения (2).

Флуктуацию функции распределения определим как разность микроскопического распределения в фазовом пространстве (1) и его среднего значения:

$$\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \equiv f_m(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (3)$$

Флуктуации функции распределения определяют флуктуации других макроскопических величин, имеющих среднестатистический смысл. Например, флуктуации плотности тока можно записать в виде

$$\delta j(\mathbf{r}, t) = e \int \mathbf{v} \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3 \mathbf{p}. \quad (4)$$

Аналогично для флуктуации плотности заряда имеем

$$\delta \rho(\mathbf{r}, t) = e \int \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3 \mathbf{p}. \quad (5)$$

Флуктуации электрических и магнитных полей связаны посредством уравнений Максвелла с флуктуационными плотностями тока и заряда, а тем самым связаны и с флуктуацией функции распределения.

По самому определению флуктуаций

$$\langle \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle = 0,$$

т. е. среднее от флуктуирующей величины равно нулю.

Средние же от произведения флуктуирующих величин, например $\langle \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \delta f(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t') \rangle$ или $\langle \delta j_i(\mathbf{r}, t) \delta j_k(\mathbf{r}', t') \rangle$, уже не равны нулю и могут служить характеристикой флуктуационного процесса. Такие средние называются пространственно-временными корреляционными функциями.

Если исследуемая система в среднем пространственно однородна и стационарна, то пространственно-временные корреляционные функции могут зависеть только от абсолютного интервала времени и относительного расстояния между точками, например,

$$\langle j_i(\mathbf{r}_1, t_1) j_k(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle \equiv \langle j_i j_k \rangle_{\mathbf{r}, t}, \quad (6)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, $t = t_2 - t_1$.

Заметим, еще, что для стационарных процессов, обладающих свойством эргодичности (подробнее см., например [301]), статистическое усреднение можно заменить усреднением по времени, записав

$$\langle j_i(\mathbf{r}_1, t) j_k(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} j_i(\mathbf{r}_1, t) j_k(\mathbf{r}_2, t + s) ds. \quad (7)$$

Корреляционные функции не только удобные математические характеристики случайного процесса, но и имеют прямой физический смысл. В частности, через квадратичные корреляционные функции выражаются плотность энергии, плотность потока флуктуирующих электромагнитных полей, поглощаемая джоулевая мощность, коэффициент диффузии и другие физические величины.

Кроме квадратичных корреляционных функций, о которых шла речь выше, могут представлять физический интерес и корреляционные функции более высоких порядков. Например, корреляторы интенсивности света (характеризующие уровень шумов в лазерах) представляют собой средние от произведения четырех случайных величин (компонент поля). В большинстве же случаев флуктуационные явления достаточно полно количественно отображаются квадратичными корреляторами.

При изучении флуктуационных явлений удобно пользоваться спектральными представлениями корреляционных функций

$$\langle j_i j_j \rangle_{k, \omega} = \int \langle j_i j_j \rangle_{r, t} \cdot \exp [i (k r - \omega t)] dr dt. \quad (8)$$

Эту величину еще называют спектральным распределением или спектральной плотностью флуктуаций.

Если определить преобразование Фурье некоторой векторной функции $A(r, t)$ с помощью соотношений

$$A(r, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int A(k, \omega) \exp [-i (k r - \omega t)] d^3 k d\omega, \quad (9)$$

$$A(k, \omega) = \int A(r, t) \exp [i (k r - \omega t)] d^3 r dt,$$

то легко показать, что среднее от произведения компонент Фурье случайных величин связано со спектральным распределением флуктуации следующим образом:

$$\langle j_i^* (k, \omega) j_j (k', \omega') \rangle = (2\pi)^4 \langle j_i j_j \rangle_{k, \omega} \delta(k - k') \delta(\omega - \omega'). \quad (10)$$

Здесь символ * означает комплексное сопряжение (в квантовом случае — эрмитово сопряжение).

Кроме общих пространственно-временных корреляционных функций часто используют также временные корреляционные функции либо пространственные корреляционные функции. Среднее значение произведения флуктуирующих величин в одной и той же точке пространства в различные моменты времени называются временной корреляционной функцией

$$\langle j_i(r, t_1) j_j(r, t_2) \rangle \equiv \langle j_i j_j \rangle_t. \quad (11)$$

При этом легко проверить, что

$$\langle j_i j_j \rangle_\omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \langle j_i j_j \rangle_{k, \omega} d^3 k. \quad (12)$$

Среднее значение произведения флуктуирующих величин в различных точках пространства в один и тот же момент времени

называют пространственной корреляционной функцией

$$\langle j_i(\mathbf{r}_1, t) j_j(\mathbf{r}_2, t) \rangle \equiv \langle j_i j_j \rangle_{\mathbf{r}}. \quad (13)$$

При этом

$$\langle j_i j_j \rangle_{\mathbf{r}} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle j_i j_j \rangle_{\mathbf{r}, \omega} d\omega. \quad (14)$$

До сих пор, говоря о флуктуациях, мы ограничивались чисто классическим их описанием. Однако иногда более удобно, а иногда просто необходимо квантостатистическое рассмотрение. Например, при температурах, ниже температуры Дебая, решеточные колебания, а следовательно, и флуктуации, связанные с участием фононной системы, требуют квантостатистического описания. При квантовом подходе в корреляторах усреднение производится как по квантовомеханическому состоянию системы, так и по статистическому распределению ее различных квантовомеханических состояний. Введению понятия матрицы плотности посвящен следующий параграф.

§ 3. МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ (СТАТИСТИЧЕСКИЙ ОПЕРАТОР)

В квантовой механике состояние динамической системы характеризуется волновой функцией $\psi(x, t)$, удовлетворяющей уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \quad (15)$$

Под x мы понимаем совокупность координат (а если необходимо, то и спинов) всех частиц $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$. В формуле (15) $\hat{H}$ — самосопряженный оператор (гамильтониан), действующий на волновую функцию ψ .

Напомним, что динамические переменные (например, импульс) в квантовой механике не являются функциями состояния, а представляются линейными операторами, действующими в пространстве волновых функций.

С помощью волновой функции можно вычислить среднее значение любой динамической переменной, представляемой оператором $\hat{A}$, в состоянии ψ :

$$\bar{A} = (\psi^*, \hat{A}\psi), \quad (\psi^*, \psi) = 1. \quad (16)$$

Скалярное произведение функций, как обычно, определено в гильбертовом пространстве соотношением

$$(\psi^*, \Phi) \equiv \int \psi^*(x) \Phi(x) dx. \quad (17)$$

Состояние, которое можно описать волновой функцией, называется чистым состоянием. Чистое состояние дает полную, максимально возможную информацию о квантовомеханической системе.

Большое число невзаимодействующих идентичных систем (обладающих одинаковыми гамильтонианами), находящихся в данном квантовом состоянии, называется чистым ансамблем. Обычно, когда речь идет о системе многих тел, нам известно микроскопическое состояние системы лишь частично, а именно можно определить только вероятность w_k нахождения системы в каком-то одном $\psi_k(x)$ состоянии из числа многих возможных. В этом случае говорят, что система находится в смешанном состоянии.

При этом среднее значение любой физической величины, представляемой оператором $\hat{A}$, определяется в отличие от чистого состояния уже не формулой (10), а соотношением вида

$$\langle A \rangle = \sum_k w_k (\psi_k^*, \hat{A} \psi_k), \quad (18)$$

причем

$$\sum_k w_k = 1, \quad w_k \geq 0. \quad (19)$$

Если бы система описывалась волновой функцией, представляющей собой суперпозицию всех состояний ψ_k , то в выражении для средних (16) присутствовали бы также перекрестные интерференционные слагаемые, связывающие различные квантовые состояния. Однако в (18) таких перекрестных членов нет. Поэтому смешанное состояние можно трактовать как некогерентную смесь чистых состояний ψ_k со статистическим весом w_k .

Большое число тождественных невзаимодействующих копий данной системы (т. е. обладающих одинаковыми гамильтонианами), которые могут находиться в различных квантовых состояниях, называется смешанным ансамблем. Другими словами, в смешанном ансамбле имеются частицы в различных состояниях, описываемых различными волновыми функциями $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$. Кроме того, заданы вероятности $w_1, w_2, w_3, \dots$ каждого из таких состояний.

Для характеристики смешанного ансамбля удобно ввести матрицу плотности

$$\rho(x, x') = \sum_k w_k \psi_k(x) \psi_k^*(x'). \quad (20)$$

При этом среднее значение любой физической величины, представляемой оператором $\hat{A}$, в соответствии с (18) и (20) запишем в виде

$$\langle A \rangle = \int A(x, x') \rho(x', x) dx dx' \equiv \text{Sp}(\hat{A} \hat{\rho}). \quad (21)$$

Здесь мы воспользовались x -представлением оператора $\hat{A}$, определив его с помощью матричных элементов

$$\hat{A}\psi(x) = \int A(x, x') \psi(x') dx'. \quad (22)$$

Матрица плотности была введена впервые Ландау [302] и Нейманом [303].

С учетом (19) легко показать, что матрица плотности удовлетворяет условию нормировки

$$\text{Sp } \hat{\rho} = \int \rho(x, x) dx = \sum_k w_k (\psi_k^*, \psi_k) = 1. \quad (23)$$

Так как под x мы понимаем совокупность координат всех частиц $r_1, r_2, \dots, r_N$, из определения (20) заключаем, что матрица плотности зависит от $6N$ переменных.

Для ансамбля частиц с гамильтонианом $\hat{H}$, зависящим от времени, матрица плотности имеет прежний вид (20), но теперь ψ_k тоже зависит от времени:

$$\rho(x, x', t) = \sum_k w_k \psi_k(x, t) \psi_k^*(x', t). \quad (24)$$

Здесь w_k не зависят от t , а функция $\psi_k(x, t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера, которое (с учетом (22)) запишем в матричном виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_k(x, t) = \int H(x, x') \psi_k(x') dx', \quad (25)$$

при этом $\psi_k(x, t)|_{t=0} = \psi_k(x)$.

Дифференцируя по t (24) и используя (25), а также свойство эрмитовости гамильтониана $H^*(x, x') = H(x', x)$, получим уравнение для матрицы плотности

$$i\hbar \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = \int \{H(x, x'') \rho(x'', x', t) - \rho(x, x'', t) H(x'', x')\} dx''. \quad (26)$$

Уравнение (26) записано в x -представлении. Более удобный вид оно приобретает в операторной форме

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (27)$$

Здесь

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] = \frac{1}{i\hbar} \{\hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}\} \quad (28)$$

означают квантовые скобки Пуассона.

Соответствующий матрице плотности оператор $\hat{\rho}$ называют статистическим оператором или просто матрицей плотности.

В условиях статистического равновесия для гибсового ансамбля, т. е. большого числа тождественных, не взаимодействующих между собой динамических систем, находящихся в контакте с термостатом, статистический оператор имеет вид [228]

$$\hat{\rho}_0 = \exp\left(\frac{F' - \hat{H}}{T}\right). \quad (29)$$

Здесь F' — свободная энергия.

Вид (29) для статистического оператора справедлив при условии, что число частиц в ансамбле, а также занимаемый объем постоянны, и единым аддитивным интегралом является энергия (система как целое покоится).

Теперь можно вернуться к вопросу об определении корреляционных функций в квантовой механике. Обычно временную корреляционную функцию в квантовой механике для двух физических величин, представляемых операторами $\hat{A}$ и $\hat{B}$, определяют следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle AB \rangle_t^s &= \text{Sp } \hat{\rho} \left\{ \frac{1}{2} [\hat{A}(t_1) \hat{B}(t_1 + t) + \hat{B}(t_1) \hat{A}(t_1 + t)] \right\} = \\ &= \text{Sp } \hat{\rho} \left\{ \frac{1}{2} [\hat{A}(0) \hat{B}(t) + \hat{B}(0) \hat{A}(t)] \right\}, \end{aligned} \quad (30)$$

где индекс s означает симметризацию по операторам $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Симметризованное произведение при определении корреляционной функции удобно брать ввиду некоммутативности операторов (даже если $\hat{A} = \hat{B}$, то они в разные моменты времени не коммутируют). В формуле (30)

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (31)$$

Следует оговориться, что если быть строгим, то выражение (30) не является точной корреляционной функцией для двух наборов значений $\hat{A}$ и $\hat{B}$, полученных в результате их фактического измерения в различные моменты времени, поскольку в (30) не учтены возмущения, вносимые процессом наблюдения.

Однако для макроскопических систем и макроскопических наблюдений это возмущение обычно несущественно, и для таких систем (30) описывают действительную корреляцию.

Чтобы закончить с матрицей плотности, заметим еще, что в случае квантовой статистики изложение, максимально близкое к классическому, получается, если использовать статистический оператор в так называемом смешанном представлении, предложенном Вигнером [304]:

$$f(r_1, r_2, \dots, r_N, p_1, p_2, \dots, p_N) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^N} \int \rho \left(\mathbf{r}_1 + \frac{\hbar \boldsymbol{\tau}_1}{2}, \dots, \mathbf{r}_N + \frac{\hbar \boldsymbol{\tau}_N}{2}; \mathbf{r}_1 - \frac{\hbar \boldsymbol{\tau}_1}{2}, \dots, \mathbf{r}_N - \frac{\hbar \boldsymbol{\tau}_N}{2} \right) e^{i \sum_j \mathbf{p}_j \cdot \boldsymbol{\tau}_j} d\boldsymbol{\tau}_1 \dots d\boldsymbol{\tau}_N. \quad (32)$$

Интегралы от (32) по всем $\mathbf{x} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ либо по всем $\mathbf{p} \equiv (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ имеют вид диагональных элементов матрицы плотности, соответственно в импульсном и координатном представлении:

$$\int f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} = \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}), \quad \int f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{x} = \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}). \quad (33)$$

При этом, в отличие от классического случая, только интегралы (33) от функции $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ дают функции распределения координат и импульсов, в то время как сама функция $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ может даже менять знак (и, следовательно, не имеет смысла плотность вероятности).

§ 4. ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАТИВНАЯ ТЕОРЕМА

Флуктуации различных физических величин возможны на фоне как термодинамически равновесного, так и неравновесного состояний. Мы будем рассматривать шумы в стационарных, но преимущественно неравновесных системах. Примером таких неравновесных систем могут служить горячие электроны, взаимодействующие с равновесной фононной подсистемой. В зависимости от того, является ли система равновесной или нет, характер шумов также существенно меняется. Более того, в неравновесном случае могут возникать новые типы шумов. Так, в случае горячих электронов новым является так называемый конвективный шум.

Он обусловлен флуктуацией средней энергии горячих электронов (электронной температуры). Сущность этого шума заключается в следующем [305—308]. Подвижность горячих носителей зависит, как правило, от их средней энергии. Флуктуации этой энергии приводят к флуктуации подвижности и, в конечном счете, к токовым шумам.

Различаются обычно и методы теоретического описания флуктуаций в равновесных и неравновесных системах. Теория флуктуаций в равновесном состоянии в настоящее время хорошо разработана и достаточно полно изложена в учебниках и монографиях [309—312].

Задача теории флуктуаций состоит в нахождении корреляционных функций. В термодинамически равновесных системах имеет место довольно общая флуктуационно-диссипативная теорема (ФДТ), устанавливающая связь между характеристиками диссипативных процессов (например, тензор проводимости) и спектраль-

ной плотностью флуктуаций соответствующих физических величин.

В термодинамически неравновесных системах такой общей теоремы не существует и теория флуктуаций в неравновесном стационарном состоянии, вообще говоря, не может быть сведена к теории отклика неравновесных систем на внешнее воздействие. Чтобы более четко уяснить, в чем состоит различие в подходе к описанию флуктуационных процессов в равновесных и неравновесных системах, приведем ниже вывод флуктуационно-диссипативной теоремы.

Первая теорема такого рода в частном случае была установлена Найквистом [313] при исследовании шумов в электрических цепях. Общая форма ФДТ была получена Калленом и Вельтоном [314].

Рассмотрим реакцию квантового статистического ансамбля, характеризуемого не зависящим от времени гамильтонианом $\hat{H}$, на включение внешнего возмущения $\hat{H}_i^{(1)}$, зависящего от времени.

Полный гамильтониан

$$\hat{H}_T = \hat{H} + \hat{H}_i^{(1)}. \quad (34)$$

Предположим, что возмущение $H_i^{(1)}$ можно представить в виде

$$H_i^{(1)} = -\hat{A}g(t), \quad (35)$$

где $\hat{A}$ — оператор, а $g(t)$ — заданная функция от времени (не оператор). Для определенности примем, что

$$g(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} g e^{-i\omega t + \varepsilon t}. \quad (36)$$

Здесь g — константа, а ε — введено для обеспечения адиабатического включения (оно обеспечивает сходимость интегралов). При таком выборе $g(t)$ имеем

$$H_i^{(1)}|_{t=-\infty} = 0.$$

Будем исходить из уравнения для статистического оператора

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}_T, \hat{\rho}] \quad (37)$$

и начальных условий

$$\hat{\rho}|_{t=-\infty} = \hat{\rho}_0 = \exp\left(\frac{F' - \hat{H}}{T}\right). \quad (38)$$

Введем теперь вместо $\hat{\rho}$ новый оператор с помощью канонического преобразования:

$$\hat{\rho}_1 = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\rho} e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (39)$$

Дифференцируя (39) по t и используя (37), получим для $\hat{\rho}_1$ следующее уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_1}{\partial t} = [\hat{H}_t^{(1)}(t), \hat{\rho}_1]. \quad (40)$$

Здесь

$$\hat{H}_t^{(1)}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{H}_t^{(1)} e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (41)$$

Как следует из (38) и (39), начальное условие для $\hat{\rho}$ запишется в виде

$$\hat{\rho}_1|_{t=-\infty} = \hat{\rho}_0. \quad (42)$$

Используя (42), можно уравнение (40) привести к интегральной форме

$$\hat{\rho}_1(t) = \rho_0 + \int_{-\infty}^t \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{t'}^{(1)}(t'), \hat{\rho}_1(t')] dt'.$$

Возвращаясь с помощью (39) к оператору $\hat{\rho}$, получим уравнение для $\hat{\rho}$ в виде

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \int_{-\infty}^t \frac{1}{i\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t-t')} [\hat{H}_{t'}^{(1)}, \hat{\rho}] e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t-t')} dt'. \quad (43)$$

Уравнение (43) является пока точным. Если считать $\hat{H}_t^{(1)}$ слабым возмущением, то в первом приближении можно подставить под интеграл вместо $\hat{\rho}$ оператор $\hat{\rho}_0$. При этом

$$\hat{\rho} \simeq \hat{\rho}_0 + \int_{-\infty}^t \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{t'}^{(1)}(t-t'), \hat{\rho}_0] dt. \quad (44)$$

Пусть $\hat{B}$ — оператор некоторой динамической величины, среднее значение которой для равновесной системы равно $\langle \hat{B} \rangle^0$. Вычислим теперь отклонение среднего значения $\langle \hat{B} \rangle$ в момент t (от его равновесного значения), обусловленное воздействием на систему возмущения $\hat{H}_t^{(1)}$.

Используя (44), получим

$$\begin{aligned} \langle \Delta \hat{B}(t) \rangle &\equiv \langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \rangle^0 = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' g(t') \text{Sp} \{ [\hat{A}(t-t'), \hat{\rho}_0] \hat{B} \} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' g(t') \text{Sp} \{ \hat{B}(t-t') [\hat{\rho}_0, \hat{A}] \}. \end{aligned} \quad (45)$$

Соотношения для линейной реакции системы на включение внешнего возмущения типа (45) называются формулами Кубо [315—316]. Эти соотношения выражают неравновесные свойства системы в виде средних по состоянию статистического равновесия и являются весьма общими.

Если теперь ввести так называемую функцию отклика, определяемую соотношением

$$\Phi_{BA}(t) = \frac{1}{i\hbar} \text{Sp}(\hat{B}(t) [\hat{\rho}_0, \hat{A}]), \quad (46)$$

то $\langle \Delta \hat{B}(t) \rangle$ можно записать в форме линейного функционала

$$\langle \Delta \hat{B}(t) \rangle = \int_{-\infty}^t dt' \Phi_{BA}(t-t') g(t'). \quad (47)$$

Наконец, если воспользоваться явным видом $g(t)$ согласно (36), то получим из (47)

$$\langle \Delta \hat{B}(t) \rangle = \chi_{BA}(\omega) g e^{-i\omega t}. \quad (48)$$

Здесь

$$\chi(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega + i\varepsilon)t} \Phi_{BA}(t) \quad (49)$$

имеет смысл обобщенной восприимчивости.

Прежде чем переходить к установлению связи обобщенной восприимчивости с тепловыми флуктуациями, дадим еще более компактную запись функции отклика (46), а также приведем конкретный пример применения общих формул (48), (49).

С этой целью воспользуемся тождеством Кубо

$$[\hat{\rho}_0, \hat{A}] = \int_0^{\beta} d\lambda e^{\lambda \hat{H}} [\hat{A}, \hat{H}] e^{-\lambda \hat{H}}, \quad \beta \equiv 1/T. \quad (50)$$

Это тождество легко доказать, записав

$$[A, e^{-\beta \hat{H}}] = e^{-\beta \hat{H}} \hat{S}(\beta), \quad (51)$$

где $\hat{S}(\beta)$ — искомый оператор.

Дифференцируя (51) по β , получим $\hat{S}(\beta)$ уравнение

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial \beta} = e^{+\beta \hat{H}} [\hat{A}, \hat{H}] e^{-\beta \hat{H}}.$$

Это уравнение следует решать с граничным условием $\hat{S}|_{\beta=0} = 0$, вытекающим из определения (51). В результате получим (50).

Если теперь воспользоваться (50) и учесть, что

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} e^{\lambda \hat{H}} [\hat{A}, \hat{H}] e^{-\lambda \hat{H}} &= \frac{1}{i\hbar} [e^{\lambda \hat{H}} \hat{A} e^{-\lambda \hat{H}}, \hat{H}] = \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A} (-i\hbar\lambda), \hat{H}] = \hat{A} (-i\hbar\lambda), \end{aligned}$$

то функцию линейного отклика можно записать в компактной форме

$$\Phi_{BA}(t) = \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{A}(-i\hbar\lambda) \hat{B}(t) \rangle. \quad (52)$$

В качестве примера рассмотрим случай, когда внешнее возмущение вызвано периодическим во времени электрическим полем $E(t) = E e^{i\omega t}$. При этом гамильтониан возмущения (35) имеет вид

$$\hat{H}_t^{(1)} = - \sum_{(\alpha)} e_\alpha r_\alpha E(t) e^{i\epsilon t}, \quad \epsilon \rightarrow 0, \quad (53)$$

где e_α — заряд, а r_α — радиус-вектор α -й частицы (для электронного газа все e_α , естественно, равны).

Если выбрать теперь в качестве ΔB μ -ю компоненту тока,

$$\Delta \hat{B} \equiv \hat{j}_\mu = \sum_{(\alpha)} e_\alpha \dot{x}_{\alpha\mu}, \quad (54)$$

то реакция на ν -ю компоненту поля определяется функцией отклика вида

$$\Phi_{BA}(t) = \Phi_{\mu\nu}(t) = \int_0^\beta \langle \hat{j}_\nu(-i\hbar\lambda) \hat{j}_\mu(t) \rangle^0 d\lambda. \quad (55)$$

Обобщенная восприимчивость (49) в этом случае (если принять объем системы за единицу) будет не чем иным, как тензором электропроводности

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{i(\omega + i\epsilon)t} \int_0^\beta \langle \hat{j}_\nu(-i\hbar\lambda) \hat{j}_\mu(t) \rangle^0 d\lambda.$$

Вернемся теперь к доказательству флуктуационно-диссипативной теоремы. С этой целью перепишем функцию отклика (46) через матричные элементы входящих в него операторов в представлении, в котором гамильтониан $\hat{H}$ диагонален:

$$\begin{aligned} \Phi_{BA}(\tau) &= \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \{ \hat{B}(\tau) \hat{\rho}_0 \hat{A} - \hat{B}(\tau) \hat{A} \hat{\rho}_0 \} = \frac{1}{i\hbar} \text{Sp} \rho_0 \{ \hat{A} \hat{B}(\tau) - \\ &- \hat{B}(\tau) \hat{A} \} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{n,m} e^{\beta(F' - E_n)} \{ A_{nm} B_{mn} e^{i\omega_{mn}\tau} - B_{nm} A_{mn} e^{i\omega_{nm}\tau} \} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{n,m} e^{\beta(F' - E_n)} (1 - e^{\beta\hbar\omega_{nm}\tau}) A_{nm} B_{mn} e^{i\omega_{mn}\tau}. \end{aligned} \quad (56)$$

Здесь

$$\omega_{nm} = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_m}{\hbar}.$$

Подставляя (56) в (49) и учитывая, что

$$\int_0^{\infty} d\tau e^{i(\omega + i\varepsilon - \omega_{nm})\tau} = -\frac{1}{i(\omega - \omega_{nm}) - \varepsilon} = \frac{i(\omega - \omega_{nm})}{(\omega - \omega_{nm})^2 + \varepsilon^2} +$$

$$+ \frac{\varepsilon}{(\omega - \omega_{nm})^2 + \varepsilon^2},$$

получим при $\varepsilon \rightarrow 0$ для обобщенной восприимчивости следующее выражение:

$$\chi_{BA}^{(\omega)} = \chi'_{BA}(\omega) + i\chi''_{BA}(\omega). \quad (57)$$

Здесь

$$\chi'_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} e^{\beta(F' - \varepsilon_n)} (1 - e^{\beta\hbar\omega_{nm}}) \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \omega_{nm}} \right) A_{nm} B_{mn}, \quad (58)$$

$$\chi''_{BA}(\omega) = -\frac{\pi}{\hbar} (1 - e^{\beta\omega}) \sum_{n,m} e^{\beta(F' - \varepsilon_n)} \delta(\omega - \omega_{nm}) A_{nm} B_{mn} \quad (59)$$

(символ $\mathcal{P}$ в (58) означает, что интеграл от $\chi'(\omega)$ по ω следует брать в смысле главного значения).

Распишем аналогичным образом равновесную временную корреляционную функцию (30):

$$\langle AB \rangle_t^s = \frac{1}{2} \text{Sp} \{ \hat{\rho}_0 [\hat{A} \hat{B}(t) + \hat{B}(t) \hat{A}] \} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n,m} e^{\beta(F' - \varepsilon_n)} (1 + e^{\beta\hbar\omega_{nm}}) A_{nm} B_{mn} e^{-i\omega_{nm}t}. \quad (60)$$

Фурье-образ от (60) имеет вид

$$\langle AB \rangle_{\omega}^s = \frac{1}{2} (1 + e^{\beta\hbar\omega}) 2\pi \sum_{n,m} e^{\beta(F' - \varepsilon_n)} \delta(\omega - \omega_{nm}) A_{nm} B_{mn}. \quad (61)$$

Сравнивая теперь (61) с (59), получаем

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{1 - e^{\beta\hbar\omega}}{1 + e^{\beta\hbar\omega}} \langle AB \rangle_{\omega}^s = \frac{1}{\hbar} \text{th} \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) \langle AB \rangle_{\omega}^s. \quad (62)$$

Формула (59) выражает собой знаменитую флуктуационно-диссипативную теорему, устанавливающую связь между спектральной плотностью флуктуаций и мнимой частью обобщенной восприимчивости. Если в качестве внешнего возмущения взять электрическое поле, а в качестве оператора $\Delta \hat{B}$ — компоненту оператора плотности тока (54), то из (62) при $\omega \rightarrow 0$ следует результат Найквиста [313].

При доказательстве флуктуационно-диссипативной теоремы мы предполагали, что система находится в термодинамическом равновесии, и при статическом усреднении использовали гибсовский статистический оператор (37). В неравновесном случае (например, при разогреве электронов) такое предположение несправедливо. Поэтому ФДТ к таким системам в общем случае неприменима. Возникает вопрос, как найти тогда корреляционные функции.

Ниже будет изложен метод, пригодный для расчета флуктуаций в неравновесных системах. Заметим только, что аналогично тому, как уравнение Больцмана можно вывести многими различными способами, так же по-разному можно получить уравнение, описывающее флуктуации. Мы не будем останавливаться подробно на истории развития теории флуктуаций в неравновесных системах. Коснемся вкратце лишь тех работ, в которых теория флуктуаций строилась, исходя из концепции флуктуации одночастичной функции распределения и без использования каких-либо дополнительных предположений, кроме тех, которые необходимы для вывода уравнения Больцмана.

В 1957 г. Кадомцев [317] предложил подход к исследованию флуктуаций, не основанный на использовании особенностей равновесных систем. Основная его идея состояла в том, чтобы флуктуирующей величиной считать саму функцию распределения, принимая во внимание ее отклонения от среднестатистического значения. В результате для флуктуирующей части функции распределения было записано кинетическое уравнение, содержащее случайные источники, и определена корреляционная функция этих источников.

В дальнейшем теория флуктуаций строилась многими авторами с использованием различных методик. В частности, флуктуации исследовались методом цепочек Боголюбова [318—320], с помощью диаграммной техники [308, 321, 322], методом функций Грина [323].

Применительно к горячим электронам в полупроводниках шумы изучались на основе двух эквивалентных подходов: метода моментов и ланжевеновского подхода. В методе моментов, получившем строгое обоснование в работах [308, 321, 324], исходным для исследования флуктуаций являются уравнения для корреляционных функций с соответствующими начальными условиями. В ланжевеновском подходе в основу кладется уравнение Больцмана, которое рассматривается теперь как уравнение Ланжевена со случайными источниками. При этом задача теории состоит, в первую очередь, в определении статистических характеристик случайных источников [317, 324—326, 329, 330].

Из более ранних работ, в которых хотя и не выводились уравнения для флуктуаций из первых принципов, но которые тем не

менее существенно продвинули понимание флуктуационных явлений в неравновесных системах, следует упомянуть работы [327, 328]. Об аналогичных исследованиях в равновесной и неравновесной газовой плазме дают довольно полное представление монографии [333, 334].

Изложение теории флуктуаций в неравновесных системах будем вести в ланжевеновском подходе. Несколько слов о методе, который используется нами ниже для вывода уравнений, описывающих флуктуации. Мы будем исходить из уравнения движения для квантового аналога микроскопической функции распределения (1). Выбор именно такого метода обусловлен, во-первых, тем, что мы его развивали и, естественно, он нам ближе, а, во-вторых, он наиболее универсален. Этот метод с одинаковым успехом можно применить для описания как квазиклассических [330], так и квантовых [329] флуктуаций. Легко обобщить его и на случай систем, в которых происходит квантование зонного спектра под действием сильного электрического [332] или магнитного [331] полей. В едином подходе можно рассматривать флуктуации электронной и фононной функций распределения.

§ 6. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим электрон-фононную систему со слабым взаимодействием, к которой приложено постоянное внешнее греющее электрическое поле. Исследуемая система предполагается пространственно однородной и стационарной (но неравновесной).

Нашей целью является получение уравнений для флуктуаций функций распределения электронов и фононов, получение явного вида случайных источников в кинетическом уравнении и расчет статистических характеристик последних.

Прежде чем приступить к решению поставленной задачи, сделаем одно замечание. Уже вывод из первых принципов кинетического уравнения для средней функции распределения сопряжен с громоздкими выкладками. Тем более сложен следующий шаг — учет флуктуационных отклонений функции распределения от своего среднего значения. Задача еще больше усложняется, если учитывать флуктуации как электронной, так и фононной одночастичных функций распределения. Дополнительные трудности возникают также при попытке получить из первых принципов экранировку межэлектронных взаимодействий в задаче о флуктуациях.

Основной же результат данной главы прост и понятен. Показано, что малые флуктуации функции распределения описываются кинетическим уравнением с линеаризованным интегралом столкновений, в котором появляются случайные источники. Определены для разных механизмов рассеяния корреляторы случайных источников.

Читателям, которых не интересует строгое обоснование, а лишь конечный результат, рекомендуем прежде всего обратить внимание на то, откуда и по какой причине в кинетическом уравнении возникают случайные источники и какой вид имеют их корреляторы для различных механизмов рассеяния. Большинство выкладок, связанных с получением и обоснованием уравнений для флуктуирующей части функции распределения, можно опустить.

Для простоты изложения ограничимся квазиклассическим приближением

$$\hbar k \ll \bar{p}, \quad \hbar \omega \ll \bar{\epsilon}. \quad (63)$$

Здесь k и ω — соответственно волновой вектор и частота флуктуации; $\bar{p}$ и $\bar{\epsilon}$ — среднее значение импульса и энергии электрона. В рассматриваемом приближении флуктуации функции распределения электронов, как увидим ниже, будут описываться классическим кинетическим уравнением. Однако излагаемый ниже метод легко можно обобщить на случай $\hbar \omega \gtrsim \bar{\epsilon}$, когда флуктуации электронной функции описываются квантовым кинетическим уравнением [329].

Флуктуации функции распределения электронов вызывают флуктуации плотности тока и заряда, а последние приводят к возникновению переменных полей $\delta E(r, t)$, $\delta \mathcal{H}(r, t)$, которые влияют на движение электронов. Поэтому необходимо учитывать влияние самосогласованных полей на электрон-фоонные флуктуации.

Эти флуктуирующие поля также будем считать квазиклассическими. Их удобно описывать с помощью потенциалов $\varphi(r, t)$ и $A(r, t)$, которые связаны с флуктуирующими полями известными соотношениями

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{H}(r, t) &= \text{rot } A(r, t), \\ \delta E(r, t) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial A(r, t)}{\partial t} - \nabla \varphi(r, t), \end{aligned} \quad (64)$$

где c — скорость света.

Будем пользоваться кулоновской калибровкой

$$\text{div } A(r, t) = 0.$$

Это означает, что потенциал $A(r, t)$ описывает только поперечные поля.

Гамильтониан рассматриваемой системы в представлении вторичного квантования запишем в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_p \epsilon_p a_p^+ a_p - \frac{e}{mc} \sum_{p,k} p A_k a_p^+ a_{p+\hbar k} + e \sum_{p,k} \varphi_k a_p^+ a_{p+\hbar k} - \\ &- ieF \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial k} \delta_{k,0} \right) \sum_p a_{p+\hbar k}^+ a_p + \sum_q \hbar \omega_q b_q^+ b_q + \\ &+ \sum_{q,p} C_q (b_q + b_{-q}^+) a_{p+\hbar q} a_p. \end{aligned} \quad (65)$$

Здесь

$$A_k = \frac{1}{V} \int e^{ikr} A(r, t) d^3r; \quad \varphi_k = \frac{1}{V} \int e^{ikr} \varphi(r, t) d^3r. \quad (66)$$

В формуле (65) первый член — гамильтониан свободных электронов, второй и третий — гамильтониан взаимодействия электронов с поперечными и продольными флуктуационными полями, четвертый — взаимодействие с внешним полем, пятый — гамильтониан свободных фононов и последний — взаимодействие электронов с фононами. Кроме того, в (65) V — объем системы, а a_p^+ и a_p — операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии p . Операторы b_q^+ и b_q имеют аналогичный смысл для фононов. Энергия электронов равна ϵ_p , а фононов — $\hbar\omega_q$.

Функция C_q характеризует электрон-фононную связь.

В (65) мы предполагаем простой изотропный параболический закон дисперсии (с эффективной массой m). Последнее предположение не принципиально и делается лишь с целью упрощения выкладок.

Операторы рождения и уничтожения частиц удовлетворяют обычным коммутационным соотношениям:

$$\begin{aligned} a_p a_{p'}^+ + a_{p'}^+ a_p &= \delta_{p,p'}, \\ b_q b_{q'}^+ - b_{q'}^+ b_q &= \delta_{q,q'}. \end{aligned} \quad (67)$$

Для описания флуктуаций в классическом случае вводится микроскопическая функция распределения (1).

В квантовых системах используем соответствующий функции (1) оператор:

$$f(r, p, t) = \frac{\hbar^3}{V} \sum_{\alpha} \int d\tau \delta\left(r - r_{\alpha} - \frac{\hbar\tau}{2}\right) e^{-i\tau(p - \hat{\mathcal{P}}_{\alpha})}. \quad (68)$$

Сумма по α ведется по всем электронам. Кроме того, в (68)

$$\hat{\mathcal{P}}_{\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_{\alpha}} - \frac{e}{c} A(r_{\alpha}, t). \quad (69)$$

Объясним, как можно получить явный вид оператора (68), исходя из классического аналога (1), где r_{α} и $\mathcal{P}_{\alpha}$ — динамические переменные, характеризующие координаты и импульс α -й частицы. В квантовой механике им соответствуют операторы, которые между собой не коммутируют.

Для двух некоммутирующих операторов $\hat{X}$ и $\hat{Y}$, классическими аналогами которых являются x и y , имеют место следующие правила соответствия:

$$\begin{aligned} x^n &\leftrightarrow \hat{X}^n, \\ y^n &\leftrightarrow \hat{Y}^n, \\ ax + by &= a\hat{X} + b\hat{Y}. \end{aligned} \quad (70)$$

Исходя из этих правил, в [335] показано, как построить квантовый аналог для любой функции $g(x, y)$.

Здесь поступим проще. Для этого используем интегральное представление δ -функции

$$\sum_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{\alpha}) = \sum_{\alpha} \int \frac{d\tau_1 d\tau_2}{(2\pi)^6} e^{-i\tau_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})} e^{-i\tau_2(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{\alpha})}. \quad (71)$$

В это выражение динамические переменные $\mathbf{r}_{\alpha}$ и $\mathbf{p}_{\alpha}$ входят в сумме: $i\tau_1 \mathbf{r}_{\alpha} + i\tau_2 \mathbf{p}_{\alpha}$.

Поэтому можем сразу же, воспользовавшись последним правилом из (70), заменить $\mathbf{r}_{\alpha}$ и $\mathbf{p}_{\alpha}$ соответствующими операторами. Затем с помощью тождества Вейля (справедливого, если коммутатор двух произвольных операторов $\hat{F}$ и $\hat{M}$ коммутирует с каждым из них, (см., например) [336], стр. 612)

$$\exp(a\hat{F} + b\hat{M}) = \exp(b\hat{M}) \exp(a\hat{F}) \exp\left(-\frac{1}{2}[\hat{F}, \hat{M}]\right)$$

получим

$$\exp(i\tau_1 \mathbf{r}_{\alpha} + i\tau_2 \hat{\mathbf{p}}_{\alpha}) = \exp\left(i\tau_1 \left(\mathbf{r}_{\alpha} - \frac{\hbar \tau_2}{2}\right)\right) \exp(i\tau_2 \hat{\mathbf{p}}_{\alpha}). \quad (72)$$

Подстановка (72) в (71) и интеграция по τ_1 приведет нас к оператору (68) с тем лишь отличием, что перед суммой вместо $\hbar^3/V$ будет стоять $1/(2\pi)^3$. Отличие в множителях обусловлено тем, что мы теперь изменили нормировку. В квантовом случае удобнее использовать следующую нормировку:

$$\int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = N. \quad (73)$$

В классическом случае было удобнее считать $\mathbf{p}$ непрерывным и заменять суммирование интегрированием.

Из (68) следует, что

$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{r} = \sum_{\alpha} \delta_{0, \mathbf{p} - \mathbf{p}_{\alpha}}, \quad (74)$$

$$\sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}).$$

Флуктуации будем считать малыми и ограничимся линейной теорией. Разложим (68) в ряд по A с точностью до линейных членов. С учетом некоммутативности операторов в экспоненте запишем

$$\begin{aligned} & \exp\left\{\hbar\tau \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}} - i\tau \frac{e}{c} A(\mathbf{r}_{\alpha}, t)\right\} \approx \\ & \approx \left[1 - i\tau \frac{e}{c} \int_0^1 ds e^{s\hbar\tau \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}} A(\mathbf{r}_{\alpha}, t) e^{-s\hbar\tau \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}}\right] e^{\hbar\tau \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}} = \\ & = \left[1 - i\tau \frac{e}{c} \int_0^1 ds A(\mathbf{r}_{\alpha} + \hbar\tau s)\right] e^{\hbar\tau \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}}. \end{aligned}$$

После подстановки этого разложения в (68) получим

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \approx \frac{\hbar^3}{V} \int d\tau \sum_{\alpha} \left[1 + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \frac{e}{c} \int_0^1 ds \mathbf{A}(\mathbf{r} + \hbar \tau (s - 1/2)) \right] \times \\ \times \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha} - \frac{\hbar \tau}{2}\right) e^{-i\tau(\mathbf{p} - \hat{\mathcal{P}}_{\alpha}^0)}, \quad (75)$$

где $\hat{\mathcal{P}}_{\alpha}^0 \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\alpha}}$.

Раскладывая теперь $\mathbf{A}$ в ряд по $\hbar \tau$, получим

$$\int_0^1 \mathbf{A}(\mathbf{r} + \hbar \tau (s - 1/2)) ds \approx \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \int_0^1 ds \left(s - \frac{1}{2}\right) \hbar \tau \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}).$$

Из (75) видно, что актуальная область значений $\hbar \tau$ будет по порядку величины $\hbar/\bar{p}$. В квазиклассическом приближении $\mathbf{A}$ слабо изменяется на таких длинах. Это и оправдывает проведенное выше разложение.

В результате из (75) находим

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cong \left(1 + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) \frac{\hbar^3}{V} \sum_{\alpha} \int d\tau \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha} - \frac{\hbar \tau}{2}\right) \times \\ \times e^{-i\tau(\mathbf{p} - \hat{\mathcal{P}}_{\alpha}^0)}. \quad (76)$$

Переходя в (76) к представлению вторичного квантования, запишем

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \left[1 + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right] f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (77)$$

Здесь

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k}/2}. \quad (78)$$

В пространственно однородной системе статистически среднее значение от $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ не должно зависеть от $\mathbf{r}$. Отсюда сразу же следует, с учетом явного вида (78), что $\langle a_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k}/2}^+ \rangle$ отличны от нуля только при $\mathbf{k} = 0$. Другими словами, в пространственно однородной системе

$$\langle a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}'} \rangle = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \langle a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \rangle \equiv \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_p. \quad (79)$$

Здесь f_p — средняя одночастичная функция распределения. Флуктуация функции распределения по определению равна:

$$\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \langle f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \frac{f_p}{V}. \quad (80)$$

Обычно, говоря о флуктуациях, имеют в виду малые отклонения случайных величин от своего среднего значения. Мы уже выше оговаривали, что тоже будем считать флуктуации малыми. Однако легко показать, что среднеквадратичное значение $\delta f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$

значительно превосходит квадрат функции распределения f_p/V , и, следовательно, нельзя считать δf малой величиной. Поэтому функцию (80) нужно «огрубить» как в координатном, так и в импульсном пространстве, т. е. ее необходимо усреднить по физически малому фазовому пространству, в котором, однако, имеется достаточно много электронов. Обозначим сглаженную функцию индексом «с». Запишем

$$\delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{\Delta V_r \Delta V_p} \sum_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'| \leq \Delta p} \int_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \leq \Delta r} d\mathbf{r}' \delta f(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t), \quad (81)$$

где ΔV_r и ΔV_p — объемы в координатном и импульсном пространствах, по которым производится усреднение⁷⁹.

В частности, применяя эту операцию «огрубления» к (78), получим

$$f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\Delta V_p} \sum_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'| \leq \Delta p} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \prod_{j=1}^3 \frac{\sin\left(\frac{k_j \Delta x_j}{2}\right)}{k_j \Delta x_j / 2} a_{\mathbf{p}'+\hbar\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}'-\hbar\mathbf{k}/2} \quad (82)$$

Здесь $\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3 = \Delta x \Delta y \Delta z = \Delta V_r$.

Для оценки фазового объема, по которому следует усреднить, чтобы флуктуации $\delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ можно было считать малыми, вычислим среднеквадратичное значение $\delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$:

$$\begin{aligned} \langle \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle &= \frac{1}{V^2} \left\{ \frac{1}{(\Delta V_p)^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}_1| \leq \Delta p} \sum_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}_2| \leq \Delta p} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r}} \times \right. \\ &\times \prod_{j=1}^3 \frac{\sin\left(k_j \frac{\Delta x_j}{2}\right)}{(k_j \Delta x_j / 2)} \frac{\sin\left(k'_j \frac{\Delta x_j}{2}\right)}{(k'_j \Delta x_j / 2)} \langle a_{\mathbf{p}_1+\frac{\hbar\mathbf{k}}{2}}^+ a_{\mathbf{p}_1-\frac{\hbar\mathbf{k}}{2}} a_{\mathbf{p}_2+\frac{\hbar\mathbf{k}'}{2}}^+ a_{\mathbf{p}_2-\frac{\hbar\mathbf{k}'}{2}} \rangle - f_p^2 \Big\}. \end{aligned} \quad (83)$$

Поскольку вычисления носят оценочный характер, мы при определении $\langle a_{\mathbf{p}_1+\hbar\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}_1-\hbar\mathbf{k}/2} a_{\mathbf{p}_2+\hbar\mathbf{k}'/2}^+ a_{\mathbf{p}_2-\hbar\mathbf{k}'/2} \rangle$ будем пренебрегать взаимодействием электронов с фононами и полями (и считать, что матрица плотности ρ имеет мультипликативный вид).

Поскольку по определению $\langle a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \dots \rangle = \text{Sp} \{ \hat{\rho} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \dots \}$, то отличный от нуля вклад в $\langle a_{\mathbf{p}_1+\hbar\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}_1-\hbar\mathbf{k}/2} a_{\mathbf{p}_2+\hbar\mathbf{k}'/2}^+ a_{\mathbf{p}_2-\hbar\mathbf{k}'/2} \rangle$ дают лишь диагональные элементы, содержащие две пары операторов $a_{\mathbf{p}}^+$, $a_{\mathbf{p}}$ с одинаковыми индексами. В рассматриваемом нами случае такое возможно только при а) $\mathbf{k} = \mathbf{k}' = 0$ и б) $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2$ (в первом случае вся фигурная скобка в (83) зануляется).

⁷⁹ Поскольку $\mathbf{p}$ — дискретная величина, по которой ведется суммирование, то ΔV_p — безразмерная величина, означающая число состояний в промежутке $|\mathbf{p} - \mathbf{p}'| \leq \Delta p$.

Учитывая, что частицы, находящиеся в различных квантовых состояниях, ведут себя независимо, и используя определение (79), получим

$$\langle a_{\mathbf{p}_1 + \hbar \mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k}/2} a_{\mathbf{p}_2 + \hbar \mathbf{k}'/2}^+ a_{\mathbf{p}_2 - \hbar \mathbf{k}'/2} \rangle = \begin{cases} f_{\mathbf{p}_1} f_{\mathbf{p}_2}, & \mathbf{k} = \mathbf{k}' = 0, \\ f_{\mathbf{p}_1 + \hbar \mathbf{k}/2} (1 - f_{\mathbf{p}_1 - \hbar \mathbf{k}/2}); & \mathbf{k} = -\mathbf{k}' \\ & \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 \end{cases}.$$

После подстановки этого выражения в (83) находим

$$\begin{aligned} \langle \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle &\simeq \\ &\simeq \frac{1}{V^2} \frac{1}{\Delta V_p} \sum_{\mathbf{k}} \prod_{j=1}^3 \left(\frac{\left(\sin \frac{k_j \Delta x_j}{2} \right)^2}{(k_j \Delta x_j / 2)^2} \right) f_{\mathbf{p} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{2}} (1 - f_{\mathbf{p} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{2}}). \end{aligned} \quad (84)$$

Поскольку функция $\frac{\sin^2 \frac{k_j \Delta x_j}{2}}{(k_j \Delta x_j / 2)^2}$ резко уменьшает вклад в сумму от слагаемых $k_j > 2/\Delta x_j \equiv k_{0j}$, то в (84) можно без заметной погрешности ограничить суммирование по $\mathbf{k}$, считая $k \leq k_0$. Вспоминая теперь, что мы рассматриваем квазиклассические флуктуации, для которых справедливо неравенство $\hbar k_0 \ll \bar{p}$ (см. (63)), получим из (84)

$$\langle \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle \approx \frac{f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p}})}{V \pi^3} \left(\frac{k_{0x} k_{0y} k_{0z}}{\Delta V_p} \right) \approx \frac{f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p}})}{V \Delta V_p \Delta V_r}. \quad (85)$$

Учитывая, что в соответствии с определением (80) $\langle f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle = \frac{f_{\mathbf{p}}}{V}$, перепишем (85) в виде

$$\frac{\langle \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle}{\langle f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle^2} \simeq \frac{(1 - f_{\mathbf{p}}) V}{f_{\mathbf{p}} \Delta V_p \Delta V_r}. \quad (86)$$

Из (86) ясно видно, что $\frac{\langle (\delta f_0^c)^2 \rangle}{\langle f_0 \rangle^2} \ll 1$ при условии, когда $\frac{1}{V} \times \times f_{\mathbf{p}} \Delta V_p \Delta V_r \gg 1$. Последнее неравенство⁸⁰ означает, что число частиц в объеме $\Delta V_p \Delta V_r$, по которому усредняется функция f^c , должно быть велико.

Таким образом, видим, что флуктуации функции δf^c будут малыми при усреднении по достаточно большому объему $\Delta V_p \Delta V_r$. Из сказанного выше следует также, что усреднение («огрубление») в координатном пространстве эквивалентно обрыву суммирования по $\mathbf{k}$ в (78) на некотором максимальном k_0 . В дальнейшем более удобным оказывается использовать ограничение по $\mathbf{k}$, что мы и будем делать.

Усредним теперь по $\Delta V_p \Delta V_r$ операторную функцию (77). Учитывая, что $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ есть малая флуктуационная величина, с точ-

⁸⁰ Приведенный здесь способ вывода критерия малости флуктуаций предложил А. А. Чумак.

ностью до линейных слагаемых по флуктуирующим величинам можем записать $A(r, t) f^c(r, p, t) = A(r, t) [\langle f_0^c(r, p, t) \rangle + \delta f^c(r, p, t)] \approx A(r, t) f_p \cdot \frac{1}{V}$.

В результате из (77) получим

$$f^c(r, p, t) \simeq f_0^c(r, p, t) + \frac{e}{cV} A(r, t) \frac{\partial f_p}{\partial p}. \quad (87)$$

Приступим теперь к выводу уравнения, из которого должна находиться функция $f^c(r, p, t)$.

§ 7. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Запишем уравнение движения для $f^c(r, p, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{df^c}{dt} = \frac{\partial f^c}{\partial t} - i[f^c, \hat{H}] = -i \sum_{|k| < k_0} e^{-ikr} [a_{p+k/2}^+ a_{p-k/2}, \hat{H}]^c + \\ + \frac{e}{c} \frac{\partial A}{\partial t} \frac{\partial f_p}{\partial p} \end{aligned} \quad (88)$$

(индекс «с» сверху у коммутатора означает сглаживание в импульсном пространстве).

Здесь и дальше везде, где это не должно привести к недоразумению, будем полагать $\hbar = 1$, $V = 1$ ⁸¹.

Начнем с определения коммутатора f^c с $\hat{H}$, который с учетом (87) совпадает с $[f_0^c, \hat{H}]$. Сравнительно просто проверить, используя правила коммутации (67), что

$$\begin{aligned} i \left[f_0^c(r, p, t), \sum_p \left\{ \varepsilon_p a_p^+ a_p - ieF \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial k} \delta_{k,0} \right) a_{p+k}^+ a_p + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_q \omega_q b_q^+ b_q + \sum_q C_q (b_q + b_{-q}^+) a_{p+q}^+ a_p \right\} \right] = \\ = \left(\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p} \frac{\partial}{\partial r} + eF \frac{\partial}{\partial p} \right) f_0^c(r, p, t) + \\ + i \sum_{|k| < k_0, q} C_q e^{-ikr} (b_q + b_{-q}^+) (a_{p+\frac{k}{2}}^+ a_{p-q-k/2} - a_{p+q+k/2}^+ a_{p-k/2})^c. \end{aligned} \quad (89)$$

При получении (89) мы, учитывая (63), сделали следующее упрощение:

$$\begin{aligned} \sum_k e^{-ikr} a_{p+k/2}^+ a_{p-k/2} [\varepsilon_{p+k/2} - \varepsilon_{p-k/2}] \approx \\ \approx \sum_k e^{-ikr} a_{p+k/2}^+ a_{p-k/2} \left(\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p} \right) k = iv \frac{\partial}{\partial r} f_0(r, p, t). \end{aligned}$$

⁸¹ Критерии законности используемых в дальнейшем приближений, однако, будем приводить в обычных единицах.

Коммутатор $f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ со вторым слагаемым в гамильтониане (65) можно привести к виду

$$\left[f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \sum_{\mathbf{p}', \mathbf{k}} \frac{e}{mc} \mathbf{p}' A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}} \right] = \frac{e}{mc} \sum_{|\mathbf{k}| < k_0} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \times \\ \times \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ \left(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}'}{2} \right) a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}'/2} - \left(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2} \right) a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}'/2} a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}/2} \right\}^0 A_{\mathbf{k}/2+\mathbf{k}'/2}.$$

Поскольку мы линеаризуем все слагаемые по флуктуирующим величинам, то произведение операторов рождения и уничтожения, стоящих при флуктуирующих Фурье-компонентах потенциала $A_{\mathbf{k}/2+\mathbf{k}'/2}$, следует заменить их средними значениями.

Учитывая, кроме того, что $f_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2} \approx f_{\mathbf{p}} + \frac{\mathbf{k}}{2} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}}$ и $\mathbf{k} A_{\mathbf{k}} = 0$ (по условию калибровки), получим

$$\left[f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \frac{e}{mc} \mathbf{p}' A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}} \right] = \frac{e}{mc} \sum_{|\mathbf{k}| < k_0} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\mathbf{p} A_{\mathbf{k}}) \mathbf{k} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \\ = \frac{e}{mc} \sum_{|\mathbf{k}| < k_0} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \{ [\mathbf{p} \times [\mathbf{k} \times A_{\mathbf{k}}]] + A_{\mathbf{k}} (\mathbf{p} \mathbf{k}) \} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = \\ = \frac{ie}{c} \left\{ [\mathbf{v} \times \delta \mathbf{H} + \left(\mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{A}] \right\} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}}. \quad (90)$$

Аналогичным способом вычисляется коммутатор $f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ с третьим слагаемым в гамильтониане (63).

В результате из (88) с учетом (89) и (90) находим

$$\frac{df_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{dt} = -\mathbf{v} \frac{\partial f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{F} \frac{\partial f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} - \\ - \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[\frac{e}{c} \mathbf{A} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} \right] - \left\{ \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \delta \mathbf{H}] + e\delta \mathbf{E} \right\} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} + \\ + (-i) \sum_{\mathbf{q}, |\mathbf{k}| > k_0} C_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) (a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k}/2} - \\ - a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}/2})^c. \quad (91)$$

Разобьем сумму по $\mathbf{q}$ в (91) на две: $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| < k_0$ и $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| > k_0$. Сумму с ограничением $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| < k_0$ можно сразу же выразить через Фурье-компоненты функции $f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$:

$$(-i) \sum_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}| < k_0} C_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) \{ f_0^c(\mathbf{q} + \mathbf{k}, \mathbf{p} - \mathbf{q}/2, t) - \\ - f_0^c(\mathbf{q} + \mathbf{k}, \mathbf{p} + \mathbf{q}/2, t) \}. \quad (92)$$

Здесь в соответствии с (78) использовано следующее обозначение для Фурье-компоненты функции $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$:

$$f_0(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t) \equiv a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\mathbf{k}/2}. \quad (93)$$

Если линеаризовать (92) по флуктуирующим величинам, то с учетом того, что для пространственно однородных систем средние смещения решетки равны нулю (а следовательно, $\langle b_q \rangle$ и $\langle b_q^+ \rangle$ тоже равны нулю), получим из (92)

$$(-i) \sum_{|q+k| < k_0, |k| < k_0} C_q e^{-ikr} (b_q + b_{-q}^+) (f_{p+k/2} - f_{p-k/2}) \delta_{q,-k} \cong \cong \frac{\partial U}{\partial r} \frac{\partial f_p}{\partial p}. \quad (94)$$

Мы ввели здесь следующее обозначение:

$$U(r) = \sum_{|k| < k_0} C_{-k} e^{-ikr} (b_{-k} + b_k^+). \quad (95)$$

Из полученных соотношений видно, что ∇U будет представлять собой некоторую макроскопическую силу, подобную δE и δH , действующую на электроны со стороны решетки. Она характеризует изменение флуктуирующих электромагнитных полей вследствие поляризации решетки. В дальнейшем будем ею пренебрегать. Отметим только, что она может играть существенную роль в тех случаях, когда матричный элемент C_q стремится к бесконечности при $q \rightarrow 0$ (например, в пьезоэлектриках или в случае взаимодействия с полярными оптическими фононами).

Таким образом, в (91) будем учитывать при суммировании по q только слагаемые с $|q + k| > k_0$.

В правой части (91) можно объединить первый и третий члены

$$v \frac{\partial f_0^c(r, p, t)}{\partial r} + v \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{e}{c} A \frac{\partial f_p}{\partial p} \right) = v \frac{\partial f^c(r, p, t)}{\partial r}. \quad (96)$$

В (91) входят тройные произведения операторов a_p и b_q . Чтобы получить замкнутое уравнение для $f^c(r, p, t)$, нужно выразить эти тройные произведения через $f^c(r, p, t)$. С этой целью запишем уравнения движения для тройных произведений операторов:

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{\partial}{\partial t} - i(\varepsilon_{p+k/2} - \varepsilon_{p-q-k/2} - \omega_q) + \right. \\ & \left. + e(F + \delta E_{\parallel}) \frac{\partial}{\partial p} \right\} b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q-k/2} = \\ & = \frac{ie}{mc} \sum_{k'} A_{k/2+k'/2} \{ (p-q-k/2) b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q+k'/2} - \\ & - p b_q a_{p-k'/2}^+ a_{p-q-k/2} \} - i \sum_{k'} \{ C_{-q} a_{p-q+k'/2}^+ a_{p-q-k/2} a_{p+k'/2}^+ a_{p+k/2} - \\ & - C_{-q-k/2-k'/2} b_q (b_{-q-k/2-k'/2} + b_{p+k/2+k'/2}^+) \times \\ & \times [a_{p-q-k'/2}^+ a_{p-q-k/2} - a_{p+k/2}^+ a_{p+k'/2}] \}. \end{aligned} \quad (97)$$

Здесь $\delta E_{\parallel}$ — продольная составляющая поля δE .

Произведение трех операторов $b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q-k/2}$ описывает процесс столкновения электрона с фононами, в результате которого исчезает электрон с импульсом $p - q - k/2$, фотон с импульсом q и рождается электрон с импульсом $p + k/2$ (закон сохранения импульса выполняется здесь с точностью до волнового вектора флуктуации k). Если электрическое поле F не слишком большое и за время столкновения (равное по порядку величины $\hbar/\epsilon_p$) не изменит существенно импульса электрона, им можно в (87) пренебречь. Соответствующий критерий имеет вид

$$\frac{eF}{\bar{p}} \ll \bar{\epsilon}_p/\hbar.$$

Он может нарушаться лишь в сверхсильных электрических полях.

Флуктуирующим полем $\delta E_{\parallel}$ в (97) тоже можно пренебречь, исходя из того что его воздействие на $\delta f^c(r, p, t)$ за время столкновения $\hbar/\bar{\epsilon}_p$ гораздо меньше, чем за характерные времена изменения δf^c (см. условие квазиклассичности).

Первый член в правой части (97) не выражается непосредственно через поля δE и $\delta \mathcal{H}$, поэтому к нему не применимы приведенные выше соображения. Однако его не трудно будет учесть, подставив (в линейном по флуктуирующим величинам приближении) вместо произведения трех операторов их среднестатистические значения.

С учетом всего сказанного решение (97) принимает вид

$$\begin{aligned} b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q-k/2} &= \exp \{i (\epsilon_{p+k/2} - \epsilon_{p-q-k/2} - \omega_q) (t - t_0)\} \times \\ &\times b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q-k/2} |_{t=t_0} + \\ &+ \int_{t_0}^t \exp \{i (\epsilon_{p+k/2} - \epsilon_{p-q-k/2} - \omega_q) (t - t')\} \psi(t') dt'. \end{aligned} \quad (98)$$

Здесь $\psi(t')$ — правая часть уравнения (97).

Сгладим произведение трех операторов в выражении (98) по импульсам p и q . Заметим, что интервал сглаживания (Δq) по q должен быть меньше характерных значений $\bar{q}$, на которых заметно изменяется C_q .

Из-за малости интервалов усреднения Δp и Δq можно пренебречь малым разбросом значений экспонент во втором слагаемом в (98). Тогда сглаженную функцию $\psi(t')$ можно выразить через функцию распределения и ее малые флуктуации. Для примера распишем второе слагаемое, входящее в $\psi(t')$ (см. правую часть (97)):

$$\sum_{k'} (a_{p-q+k'/2}^+ a_{p-q-k/2})^c (a_{p+k'/2}^+ a_{p+k/2}^+)^c. \quad (99)$$

Здесь в первой скобке усреднение производится по q (в интервале Δq), а во второй — по p (в интервале Δp).

Выделим в выписанной сумме по k' область, где $|k'/2 \pm k/2| < k_0$. В этой области значений k' произведения пар операторов рождения и уничтожения выражаются через f_p и пространственные Фурье-компоненты малых флуктуаций δf_0^c :

$$(a_{p+k'/2} a_{p+k/2}^+)^c = (1 - f_{p+k/2}) \delta_{k,k'} - \delta f_0^c \left(\frac{k-k'}{2}, p + \frac{k+k'}{4}, t \right),$$

$$(a_{p-q+k'/2}^+ a_{p-q-k/2})^c =$$

$$= f_{p-q-k/2} \delta_{k,-k'} + \delta f_0^c \left(\frac{k+k'}{2}, p-q + \frac{k'-k}{4}, t \right).$$

При этом выделенная часть суммы (99) в линейном приближении по δf_0^c равна:

$$(1 - f_p) f_{p-q} \delta_{k,0} - \delta f_0^c(k, p, t) f_{p-q-k/2} + (1 - f_{p+k/2}) \delta f_0^c(k, p-q, t) \approx$$

$$\approx (1 - f_p) f_{p-q} \delta_{k,0} - \delta f_0^c(k, p, t) f_{p-q} + (1 - f_p) \delta f_0^c(k, p-q, t).$$

Подобную процедуру можно провести и с остальными слагаемыми, входящими в $\psi(t')$.

С этой целью удобно ввести квантовую функцию распределения для фононов $|N^c(r, q, t)|$ аналогично f_0^c :

$$N^c(r, q, t) = \sum_{|k| < k_0} (b_{q+k/2}^+ b_{q-k/2})^c e^{-ikr}. \quad (100)$$

Так же, как раньше для δf^c , можно показать, что флуктуации функции распределения фононов $\delta N^c \equiv N^c - \langle N \rangle$ будут малы по сравнению с ее средним значением при условии

$$N_q \left(\frac{\Delta q_x \Delta q_y \Delta q_z}{k_{0x} k_{0y} k_{0z}} \right) \gg N_q + 1$$

(N_q — средняя одночастичная фононная функция распределения).

Распишем теперь последнее слагаемое в правой части в (97) (содержащее операторы b_q и b_q^+). Так же, как и раньше, выделим в сумме по k' область значений k' , для которых $|k' \pm k| < 2k_0$. В пределах этих значений k' произведения четырех операторов выражаются через f_p , N_q и пространственные Фурье-компоненты флуктуаций δf^c и δN^c .

В линейном приближении по флуктуациям выделения неравенством $|k' \pm k| < 2k_0$ часть суммы по k' равна:

$$C_{-q} (N_q + 1) (f_{p-q} - f_p) \delta_{k,0} + C_{-q-k} \delta N^c(k, q + k/2, t) \times$$

$$\times (f_{p-q-k/2} - f_{p+k/2}) + C_{-q} (N_q + 1) (\delta f_0^c(k, p-q, t) - \delta f_0^c(k, p, t)) \approx$$

$$\approx C_{-q} [(N_q + 1) (f_{p-q} - f_p) \delta_{k,0} + \delta N^c(k, q, t) (f_{p-q} - f_p) +$$

$$+ (N_q + 1) (\delta f_0^c(k, p-q, t) - \delta f_0^c(k, p, t))].$$

Что же касается произведений четырех операторов, которые входят в выражение для $\psi(t')$ под знаком суммы со значениями

$\mathbf{k}$, удовлетворяющими неравенству $|\mathbf{k}' \pm \mathbf{k}| > 2k_0$, то их можно рассматривать как заданные функции времени. Действительно, если выбрать k_0 таким, чтобы выполнялось неравенство

$$\nu k_0 \gg \bar{\nu} \quad (101)$$

(ν — частота столкновений), то уравнения движений для рассматриваемых произведений операторов будут такими же, как и для свободных частиц с точностью до членов порядка $\bar{\nu}/\nu k_0$. После интегрирования по t' их можно сравнить с первым членом правой части (98) и пренебречь как малыми более высокого порядка по константе электрон-фононного взаимодействия C_q .

Здесь важно отметить, что возможность удовлетворить неравенство (101), наряду с неравенством $\hbar k_0 \ll \bar{p}$ (см. (63)), сводится к требованию выполнения известного критерия существования кинетического уравнения Больцмана

$$\bar{\varepsilon}_p \gg \hbar \bar{\nu}. \quad (102)$$

Только при выполнении (102) можно удовлетворить условию (101).

Таким образом, в результате отмеченных выше упрощений получим

$$\begin{aligned} \psi^c(t') \simeq & (-i) \frac{e}{mc} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{A}_{\mathbf{k}/2+\mathbf{k}'/2\mathbf{q}} \langle b_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}+\mathbf{k}'/2} \rangle + \\ & + (-i) C_{-\mathbf{q}} [(N_{\mathbf{q}} + 1) f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) - N_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} (1 - f_{\mathbf{p}})] \delta_{\mathbf{k},0} + \\ & + \delta N^c(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) (f_{\mathbf{p}} - f_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) + \delta f_0^c(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t) (N_{\mathbf{q}} + 1 - f_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) - \\ & - \delta f_0^c(\mathbf{k}, \mathbf{p} - \mathbf{q}, t) (N_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{p}})]. \end{aligned} \quad (103)$$

Зная явный вид $\psi^c(t')$, можно выполнить в (98) интегрирование по t' . Выберем пределы интегрирования таким образом, чтобы

$$\frac{1}{\omega} \gg t - t_0 \gg \hbar/\bar{\varepsilon}_p. \quad (104)$$

Благодаря неравенству (104) подынтегральную функцию $\psi(t')$ можно вынести за знак интеграла и положить равной $\psi(t)$ (заметьте, что в (104) $1/\omega$ — характерное время изменения δf^c и δN^c). Интеграл же от экспоненты при выполнении второй части неравенства (104) равен $i(\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2} - \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k}/2} - \omega_{\mathbf{q}} + i\eta)^{-1}$, где η — бесконечно малая положительная величина.

В результате для произведений (сглаженных) трех операторов получим

$$\begin{aligned} (b_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k}/2})^c = & \{ \exp [i(\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2} - \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k}/2} - \omega_{\mathbf{q}})(t - t_0)] \times \\ & \times (b_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k}/2})|_{t=t_0} \}^c + \frac{i\psi^c(t)}{\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2} - \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k}/2} - \omega_{\mathbf{q}} + i\eta}. \end{aligned} \quad (105)$$

Первый член в (105) описывает влияние начальных условий на асимптотическое поведение (при $t - t_0 \gg \hbar/\bar{\varepsilon}_p$) произведения

трех операторов. При получении кинетического уравнения для средних значений функции распределения (f_p) этими членами пренебрегают (см., например, [337]), предполагая, что при больших интервалах $t - t_0$ зависимость многочастичных функций от времени определяется лишь посредством временной зависимости одночастичной функции $\langle f(r, p, t) \rangle$. Как увидим ниже, именно эти слагаемые обуславливают появление ланжевеновских источников в кинетическом уравнении.

Определим теперь входящее в (103) среднее значение произведения трех операторов $\langle b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q+k/2} \rangle$. Усредняя обе части равенства (105), с учетом (103) получим

$$\langle b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q+k/2} \rangle = C_{-q} \frac{(N_q + 1) f_p (1 - f_{p-q}) - N_q f_{p-q} (1 - f_p)}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p-q} - \omega_q + i\eta} \delta_{k,0}.$$

Подставив это выражение в первый член (103), найдем

$$\begin{aligned} & -i \frac{e}{mc} \sum_{k'} A_{k/2+k'/2} \frac{\langle b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q+k/2} \rangle}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p-q} - \omega_q + i\eta} = \\ & = i \frac{e}{c} A_k C_{-q} [(N_q + 1) f_p (1 - f_{p-q}) - \\ & - N_q f_{p-q} (1 - f_p)] \frac{\partial}{\partial p} \frac{1}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p-q} - \omega_q + i\eta}. \end{aligned} \quad (106)$$

Из (105), (103) и (106) видно, как произведения трех операторов, входящих в правую часть (91), можно выразить через f_p , δf^c , N_q , δN^c и A . После аналогичных преобразований с остальными слагаемыми в (91) получим уравнение для $f^c(r, p, t)$.

Вводя обозначение

$$W_{p,p+q} = 2\pi |C_q|^2 [N_q \delta(\varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p - \omega_q) + (N_{-q} + 1) \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \omega_q)], \quad (107)$$

можно уравнение для $f^c(r, p, t)$ привести к следующему виду:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + e\mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right] f^c(r, p, t) - \frac{e}{c} \left(\mathbf{A} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) e\mathbf{F} \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} = \\ & = K_{ef}(r, p, t) - e \left(\delta \mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \delta \mathbf{H} \right) \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} + \\ & + \sum_q \left\{ f_{p+q} (1 - f_p) \left(1 - \frac{e}{c} \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) W_{p+q,p} - \right. \\ & \quad \left. - f_p (1 - f_{p+q}) \left(1 - \frac{e}{c} \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) W_{p,p+q} \right\} + \\ & + 2\pi \sum_q |C_q|^2 \{ [\delta f_0^c(r, p+q, t) (N_q + 1 - f_p) - \\ & - \delta f_0^c(r, p, t) (N_q + f_{p+q}) + \delta N^c(r, q, t) (f_{p+q} - f_p)] \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \delta(\varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p - \omega_q) + [\delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p} - \mathbf{q}, t)(N_q + f_p) - \\ & - \delta f_0^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)(N_q + 1 - f_{p-q}) + \\ & + \delta N^c(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t)(f_{p-q} - f_p)] \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-q} - \omega_q) \}^{82}. \end{aligned} \quad (108)$$

Через $K_{ef}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ в (108) обозначена сумма, которая по виду совпадает с последним слагаемым (суммой) в (91), только уравнения движения операторов следует брать такими же, как и для свободных частиц, например:

$$b_q a_p^+ a_p \big|_t = \exp \{i(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} - \omega_q)(t - t_0)\} b_q a_p^+ a_p \big|_{t_0}. \quad (109)$$

Как уже отмечалось выше, входящие в K_{ef} слагаемые описывают влияние начальных условий на временную эволюцию произведения операторов, характеризующих взаимодействие электронов с фононами. В теории флуктуации K_{ef} носит название стороннего потока, или ланжевеновского источника флуктуаций. Из вида $K_{ef}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ можно заключить (см. последнее слагаемое в (91) с учетом также (109)), что временная и координатная зависимости стороннего потока полностью определяются экспоненциальными множителями. Последнее обстоятельство существенно упрощает вычисление корреляционных функций сторонних потоков.

Несколько позже мы займемся их вычислением.

Если усреднить (108), то получим обычное стационарное кинетическое уравнение для пространственно однородной системы:

$$eF \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} = -I_{ef} \{f_p, N_q\}, \quad (110)$$

где

$$I_{ef} \{f_p, N_q\} = \sum_q [W_{p,p+q} f_p (1 - f_{p+q}) - W_{p+q,p} f_{p+q} (1 - f_p)]. \quad (111)$$

Упростим теперь уравнение (108). Для этого умножим (111) слева на $\left(1 - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right)$ и сложим со (108). В результате получим

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + eF \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) \delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \\ & = K_{ef}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - e \left(\delta \mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \delta \mathbf{H}\right) \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} + \\ & + \delta \sum_q [W_{p+q,p} f_{p+q} (1 - f_p) - W_{p,p+q} f_p (1 - f_{p+q})]. \end{aligned} \quad (112)$$

Для сокращения записи в (112) введем символ « δ » перед суммой по q . Он означает следующую операцию: необходимо все функции f_p и N_q под суммой заменить соответственно на $f_p + \delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$

⁸² Заметим, что в (108) мы заменили $\frac{d}{dt}$ на $\frac{\partial}{\partial t}$, учитывая то обстоятельство, что $f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ зависит кроме времени еще и от $\mathbf{r}, \mathbf{p}$.

и $N_q + \delta N^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, линеаризовать затем полученное выражение по δf^c и δN^c и оставить только линейные слагаемые по δf^c и δN^c .

Наша цель — получение уравнения для $\delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ — достигнута. Однако одного уравнения (112) недостаточно для описания флуктуаций в электрон-фоонных системах. Помимо δf^c в него входят неизвестные поля δE и $\delta \mathcal{H}$, а также флуктуации фоонной функции распределения δN^c . Что касается полей δE и $\delta \mathcal{H}$, то они связаны уравнениями Максвелла с флуктуациями плотностей заряда $\delta \rho$ и тока δj . Эти уравнения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \epsilon \delta E &= -4\pi \delta \rho, \\ \operatorname{div} \delta \mathcal{H} &= 0, \\ \operatorname{rot} \delta E &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\mu} \delta \mathcal{H}), \\ \operatorname{rot} \delta \mathcal{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon \delta E) + \frac{4\pi}{c} \delta j. \end{aligned} \quad (113)$$

Здесь ϵ и μ — диэлектрическая и магнитная проницаемости решетки (в общем случае тензорные величины).

В свою очередь, флуктуации плотностей заряда и тока связаны с флуктуациями функции распределения δf^c соотношениями:

$$\begin{aligned} \delta \rho &= e \sum_{\mathbf{p}} \delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \\ \delta \mathbf{j} &= e \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v} \delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (114)$$

Таким образом, задача приобретает самосогласованный характер. Если пренебречь в (112) флуктуациями фоонной функции распределения, то оно совпадает с уравнением, которое было впервые получено из физических соображений без строгого вывода в работе [306].

Для того чтобы учесть флуктуации в фоонной системе, поступим так же, как и раньше, т. е. составим уравнение движения для $\delta N^c(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t)$. После преобразований, полностью аналогичных тем, которые делались при выводе (112), получим

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \delta N^c(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) = K_{fe}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) - I'_{fe} \{ \delta N^c, \delta f^c \}. \quad (115)$$

Здесь $K_{fe}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t)$ — фоонный сторонний поток:

$$\begin{aligned} K_{fe}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) &= -i \sum_{\mathbf{p}, |\mathbf{k}| < k_c} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \{ C_{-\mathbf{q}+\mathbf{k}/2} b_{\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}^+ a_{\mathbf{p}} - \\ &\quad - C_{\mathbf{q}+\mathbf{k}/2} b_{\mathbf{q}-\mathbf{k}/2} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k}/2} \}. \end{aligned} \quad (116)$$

Временная зависимость входящих в (116) операторов того же типа, что и в (109).

Кроме того, $I_{fe} \{\delta N^c, \delta f^c\}$ — линейризованный интеграл фон-электронных столкновений:

$$I_{fe} \{\delta N^c, \delta f^c\} = \delta I_{fe} \{N_q, f_p\} = \delta \sum_q [W_{p,p+q}^{(-)} f_p (1 - f_{p+q}) - W_{p+q,p}^{(+)} f_{p+q} (1 - f_p)], \quad (117)$$

$$W_{p+q,p}^{(+)} = 2\pi |C_q|^2 (N_q + 1) \delta(\varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p - \omega_q), \quad (118)$$

$$W_{p,p+q}^{(-)} = 2\pi |C_q|^2 N_q \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} + \omega_q).$$

Символ « δ » перед суммой в (117) имеет тот же смысл, что и в формуле (112).

Система уравнений (112), (113) и (115) полностью описывает флуктуации в рассматриваемой нами системе. Эти уравнения неоднородны. В правых частях (112) и (115) стоят известные функции координат и времени. Из-за линейности уравнений неизвестные функции δf^c и δN^c выразятся линейным образом через ланжевеновские потоки (источники) флуктуаций $K_{ef}(r, p, t)$ и $K_{fe}(r, q, t)$.

Статистические характеристики этих источников легко могут быть рассчитаны, что будет сделано в следующем параграфе.

§ 8. КОРРЕЛЯТОРЫ СТОРОННИХ ПОТОКОВ

Как уже говорилось раньше, физический интерес представляют не сами флуктуации, а их корреляционные функции, которые в конечном итоге можно выразить через корреляторы сторонних потоков. Для примера вычислим среднее от произведения операторов с временной зависимостью типа (109) (считая $|k|, |k'| < k_0$, $|q+k|, |q'+k| > k_0$):

$$\begin{aligned} & \langle (b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q-k/2})^c |_t (b_{-q}^+ a_{p'+q'+k'/2}^+ a_{p'-k'/2})^c |_{t'} \rangle \simeq \\ & \simeq \langle \{b_q a_{p+k/2}^+ a_{p-q-k/2} \exp[i(\varepsilon_{p+k/2} - \varepsilon_{p-q-k/2} - \omega_q)t]\}^c \times \\ & \times \{b_{-q}^+ a_{p'+q'+k'/2}^+ a_{p'-k'/2} \exp[i(\varepsilon_{p+q'+k'/2} - \varepsilon_{p'-k'/2} - \omega_{-q'})t']\}^c \rangle \simeq \\ & \simeq (N_q + 1) f_{p+k/2} (1 - f_{p-q-k/2}) \exp\{i(\varepsilon_{p+k/2} - \varepsilon_{p-q-k/2} - \omega_q)(t - t')\} \delta_{q,-q'} \delta_{p,p'} \delta_{k,-k'} \simeq (N_q + 1) f_p (1 - f_{p-q}) \times \\ & \times \exp\{i(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-q} - \omega_q)(t - t')\} \delta_{q,-q'} \delta_{p,p'} \delta_{k,-k'}. \quad (119) \end{aligned}$$

Вычислим теперь спектральную плотность флуктуаций сторонних потоков. Раньше спектральная плотность была определена формулой (8). В квантовом случае более удобным оказалось считать волновой вектор квазидискретным и вместо интегралов писать сумму. В этом случае несколько иначе записывается и спектральная плотность флуктуаций, а именно вместо (8) имеем

$$\langle j_i j_j \rangle_{k,\omega} = \frac{1}{V} \int \langle j_i j_j \rangle_{r,t} e^{i(kr - \omega t)} dr dt. \quad (120)$$

Учитывая это определение и проделывая (для квазиклассических k и ω) преобразование типа (119) со всеми слагаемыми, входящими в выражение для сторонних потоков, получим

$$\langle K_{ef}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) K_{ef}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t') \rangle_{k, \omega} = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{q}} [W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}+\mathbf{q}} f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \\ + W_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \mathbf{p}} f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} (1 - f_{\mathbf{p}}) - W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p}'} - W_{\mathbf{p}', \mathbf{p}} f_{\mathbf{p}'} (1 - f_{\mathbf{p}}), \quad (121)$$

$$\langle K_{ef}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) K_{fe}(\mathbf{r}', \mathbf{q}, t') \rangle_{k, \omega} = W_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \mathbf{p}}^{(+)} f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} (1 - f_{\mathbf{p}}) + \\ + W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}+\mathbf{q}}^{(-)} f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) - W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}-\mathbf{q}}^{(+)} f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) - W_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \mathbf{p}}^{(-)} f_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} (1 - f_{\mathbf{p}}), \quad (122)$$

$$\langle K_{fe}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) K_{fe}(\mathbf{r}', \mathbf{q}', t') \rangle_{k, \omega} = \\ = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \sum_{\mathbf{p}} [W_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \mathbf{p}}^{(+)} f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} (1 - f_{\mathbf{p}}) + W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}+\mathbf{q}}^{(-)} f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})]. \quad (123)$$

Из (121) и (122) видно, что все корреляторы сторонних потоков не зависят от k и ω . Если проделать обратное преобразование Фурье, то они окажутся пропорциональными произведению $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$, т. е. отличными от нуля в одной и той же точке и в один и тот же момент времени. Еще раз напомним, что этот результат получен в квазиклассическом приближении. На самом деле корреляция может осуществиться на расстояниях порядка $\hbar/\bar{p}$ и в течение времени $\hbar/\varepsilon$.

Выражение для коррелятора (121) было получено в работе [306] в предположении, что флуктуации числа столкновений аналогичны дробовому шуму.

Выше мы убедились в том, что для получения уравнений, описывающих флуктуации функции распределения и корреляторов сторонних потоков, не требуется никаких новых предположений, кроме тех, которые необходимы для вывода кинетического уравнения Больцмана.

§ 9. ФЛУКТУАЦИИ В СИСТЕМЕ С МЕЖЧАСТИЧНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Метод, развитый в предыдущих параграфах, легко обобщить на случай систем с межчастичным взаимодействием, описываемых гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4} V_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4} a_{\mathbf{p}_1}^+ a_{\mathbf{p}_2}^+ a_{\mathbf{p}_3} a_{\mathbf{p}_4} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}. \quad (124)$$

Мы рассмотрим здесь случай Ферми- и Бозе-статистики. Результаты этого параграфа представляют в основном методический интерес. Проведенное рассмотрение позволит лучше понять особенности систем с кулоновским взаимодействием, которому будет посвящен следующий параграф.

Как обычно, процедуру получения замкнутого уравнения для функции $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ (которая в данном случае совпадает с (78)) начнем с нахождения коммутатора $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ с гамильтонианом (124). В результате исходное уравнение для $f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ можно представить в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right) f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = i \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}, |\mathbf{k}| < k_0} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} C_{\mathbf{q}} [(\mathbf{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}/2}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{p}_1} \mathbf{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}/2})^c - (\mathbf{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{p}_1} \mathbf{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}/2})^c], \quad (125)$$

где

$$C_{\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}} + V_{-\mathbf{q}}.$$

Удобно суммы по $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{q}$ разбить на несколько областей: в первой области импульсы $\mathbf{q}$ и $\mathbf{q} + \mathbf{k}$ меньше по модулю k_0 , во второй области $|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{q} \pm \mathbf{k}/2| < k_0$, третья область охватывает остальные части суммы (сильно недиагональные элементы).

В первой и второй областях слагаемые под знаком суммы (по $\mathbf{q}$) выражаются через функцию распределения и ее флуктуации. В линейном приближении по флуктуациям вклад от первой и второй областей в правую часть (125) равен:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left\{ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}_1} C_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1, t) \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} \left[\delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p} + \mathbf{q}, t) \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} - \delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \frac{\partial f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{p}} \right] \right\}. \quad (126)$$

Легко сообразить, что вкладом (126) в уравнение (125) можно пренебречь, если средняя кинетическая энергия частиц $\bar{\epsilon}$ гораздо больше их энергии взаимодействия: $\bar{\epsilon} \gg N C_{\mathbf{q}}$. Если же матричный элемент $C_{\mathbf{q}}$ расходится при малых $\mathbf{q}$, то приведенное неравенство нельзя удовлетворить и необходимо отдельное рассмотрение. Такая ситуация имеет место для кулоновского механизма взаимодействия электронов, для которого $C_{\mathbf{q}} \sim 1/\mathbf{q}^2$. Рассмотрение этого механизма будет проведено в следующем параграфе. Здесь же будем считать, что вкладом (126) в (125) можно пренебречь.

В третьей области, определяемой неравенствами $|\mathbf{q}| > k_0$, $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| > k_0$ и $|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{q} + \mathbf{k}/2| > k_0$, произведение четырех операторов

$$g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{q}) \equiv C_{\mathbf{q}} \mathbf{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{p}_1} \mathbf{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}/2} \quad (127)$$

уже не выражается непосредственно через f^c . Поэтому в первом порядке теории возмущений нельзя получить замкнутое уравнение относительно f^c .

Дальше поступим так же, как и в случае электрон-фоонного взаимодействия, а именно составим уравнения движения для опе-

раторов g_k :

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} - i (\varepsilon_{p+k/2} + \varepsilon_{p_1+q} - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p+q-k/2}) \right\} g_k(p, p_1; q) =$$

$$= (-i) [g_k(p, p_1; q), \hat{W}]. \quad (128)$$

Здесь $\hat{W}$ — второе слагаемое в гамильтониане (124).

Решение (128) будет того же вида, что и (98).

Произведя линеаризацию правой части (128) по малым флуктуациям и отбрасывая сильно недиагональные слагаемые, т. е. действуя по тому же принципу, как мы поступали при выводе (105), получим в низжайшем порядке по теории возмущений $g_k|_t$ как функцию f_p , δf^c и значения оператора g_k в момент времени t_0 .

Подставляя найденные таким образом g_k в (125) и вычитая из него уравнение для f_p , находим замкнутое уравнение для δf^c :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \delta f^c(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = K_{ee}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - I'_{ee} \{ \delta f^c \}, \quad (129)$$

где линеаризованный оператор межчастичных столкновений $I'_{ee} \{ \delta f^c \}$ выражается формулой

$$I'_{ee} \{ \delta f^c \} = \delta \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3) [f_p f_{p_1} (1 \pm f_{p_2}) (1 \pm f_{p_3}) -$$

$$- f_{p_2} f_{p_3} (1 \pm f_p) (1 \pm f_{p_1})]. \quad (130)$$

Вероятность перехода при столкновении двух частиц с импульсами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}_1$ в состояние с импульсами $\mathbf{p}_2$ и $\mathbf{p}_3$ имеет вид

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3) =$$

$$= 2\pi \delta(\varepsilon_p + \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2} - \varepsilon_{p_3}) \delta_{\mathbf{p}+\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2+\mathbf{p}_3} \frac{1}{2} (C_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_2} \pm C_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3})^2. \quad (131)$$

В формулах (130) и (131) знаки $\pm$ определяются типом взаимодействующих частиц: «+» соответствует бозонам, а «-» — фермионам.

Сторонний поток $K_{ee}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ по форме совпадает с правой частью уравнения (128), однако с тем различием, что временная зависимость операторов g_k такая же, как и у частиц без взаимодействия. В квазиклассическом приближении корреляторы сторонних потоков легко вычисляются:

$$\langle K_{ee}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) K_{ee}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t') \rangle_{k, \omega} =$$

$$= \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3) [f_p f_{p_1} (1 \pm f_{p_2}) (1 \pm f_{p_3}) +$$

$$+ f_{p_2} f_{p_3} (1 \pm f_p) (1 \pm f_{p_1})] + \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \times$$

$$\times [f_p f_{p'} (1 \pm f_{p_1}) (1 \pm f_{p_2}) + f_{p_1} f_{p_2} (1 \pm f_p) (1 \pm f_{p'}) -$$

$$- 2 \sum_{p_1, p_2} W(p, p_1; p', p_2) [f_p f_{p_1} (1 \pm f_{p'}) (1 \pm f_{p_2}) + \\ + f_{p'} f_{p_2} (1 \pm f_p) (1 \pm f_{p_1})]. \quad (132)$$

Найденный коррелятор (если в скобках типа $(1 \pm f_p)$ оставлять только единицу) совпадает с результатом работы [306]. В этой работе он был получен так же, как и электрон-фононный коррелятор сторонних потоков, исходя из предполагаемой аналогии между статистическими свойствами флуктуации актов рассеяния и дробовым шумом.

§ 10. НЕРАВНОВЕСНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ В ГАЗЕ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Рассмотрим в этом параграфе подробно важный случай системы частиц с кулоновским взаимодействием. Как отмечалось выше, здесь нельзя больше считать матричный элемент C_q малым при $q \rightarrow 0$, что связано с дальнодействующим характером кулоновских сил.

Так как в радиус действия одной частицы попадает большое число других, то в актах межэлектронных взаимодействий должны проявляться коллективные эффекты. Один из таких эффектов — экранирование взаимодействия двух частиц плазменной средой, — и был учтен в работах [338—339, 75] при получении интеграла столкновений.

Учет экранировки позволил корректно описать процессы рассеяния с малой передачей импульса. При этом отпала необходимость искусственно вводить обрезание по прицельному параметру на далеких расстояниях, как это делалось в известном интеграле столкновений Ландау.

Наша задача — получить кинетическое уравнение для δf^c , а также корреляционные функции сторонних потоков с учетом эффектов экранирования. В предыдущих параграфах было строго показано, что в тех же приближениях, в которых выводится кинетическое уравнение для средней функции распределения, можно получить также уравнение относительно δf^c . При этом важно, что кинетическое уравнение для δf^c характеризуется линеаризованным интегралом столкновений. Этот вывод, полученный ранее для электрон-фононных систем и газа с межчастичным взаимодействием, является общим. Дело в том, что уравнение для δf^c и линеаризованное по малым возмущениям функции распределения (вызванными внешними полями) кинетическое уравнение описывают один и тот же процесс — релаксацию малых отклонений функции распределения от ее среднего значения. Имея это в виду, уравнение для флуктуаций функции распределения данной задачи можем сразу записать, линеаризуя полученный в [75, 338] с учетом

экранировки интеграл столкновений. Поэтому при дальнейшем изложении подробно остановимся лишь на той части вывода, которая касается вида коррелятора сторонних потоков.

Исходный гамильтониан нашей системы имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} - ieF \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, 0} \right) \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{p}} + \hat{W} + \hat{H}_f + \hat{H}_{ef}. \quad (133)$$

Здесь $\hat{W}$ — гамильтониан межэлектронного взаимодействия:

$$\hat{W} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, \mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}_1-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}}, \quad (134)$$

где $C_{\mathbf{q}} = \frac{2\pi e^2}{\kappa q^2}$ при $\mathbf{q} \neq 0$ и $C_{\mathbf{q}} = 0$ при $\mathbf{q} = 0$; $\hat{H}_f$ и $\hat{H}_{ef}$ — гамильтонианы свободного фононного газа и электрон-фононного взаимодействия, их вид приведен в (65).

Как мы уже знаем из предыдущих глав, стационарное состояние в электронной системе во внешнем поле возможно только при наличии термостата, в который отводится мощность, полученная электронами от поля. Таким термостатом служит обычно фононная подсистема. Поэтому мы включили в гамильтониан (133) наряду с электронами также и фононную подсистему.

Однако, имея в виду, что для малых (линейных) флуктуаций все механизмы рассеяния дают аддитивный вклад в интеграл столкновений и сторонние потоки, будем дальше опускать $\hat{H}_f$ и $\hat{H}_{ef}$ (их вклад был подробно проанализирован раньше).

Коммутируя оператор (78) с гамильтонианом (133) (без слагаемых $\hat{H}_f$ и $\hat{H}_{ef}$), легко получаем уравнение для гейзенберговского оператора (78). Записанное в представлении Фурье, оно имеет вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - i\mathbf{k} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} + eF \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f^c(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t) = -i [f^c(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t), \hat{W}]. \quad (135)$$

Коммутатор в правой части (135) можно расписать следующим образом:

$$\begin{aligned} -i [f^c(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t), \hat{W}] = & -i\mathbf{k} \sum_{\mathbf{p}_1} \left\{ C_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} \delta f(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, t) + \right. \\ & \left. + C_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}} \left[\frac{\partial f_{\mathbf{p}_1}}{\partial \mathbf{p}_1} \delta f^c(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t) - \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} \delta f^c(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, t) \right] \right\} - \\ & - i \sum_{\substack{|\mathbf{q}| > k_0 \\ |\mathbf{p}_1-\mathbf{p}| > k_0}} [g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{q}) - g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}; -\mathbf{q})]^c. \end{aligned} \quad (136)$$

Слагаемое в фигурной скобке (136) соответствует выражению (126) (точнее, его Фурье-образу). Мы поступили здесь так же, как и при получении (126). Из суммы слагаемых, состоящих из произведений четырех операторов, были выделены сильно недиагональные элементы (последняя сумма в (136)). Произведение же операторов

ров с близкими индексами были выражены через δf^c . При этом в фигурной скобке (136) произведена линеаризация по δf^c .

Используя явное выражение для C_q и уравнение Пуассона, получим, что первое слагаемое в (136) равно:

$$-ik \sum_{p_1} C_k \frac{\partial f_p}{\partial p} \delta f^c(k, p_1, t) = -e \delta E(k) \frac{\partial f_p}{\partial p}, \quad (137)$$

где $\delta E(k) = \frac{4\pi i}{k} \frac{k}{k^2} e \sum_p \delta f^c(k, p, t)$ — самосогласованное продольное флуктуирующее поле. В гамильтониане (65) такое поле вводилось феноменологически. Здесь же видим, что оно обусловлено длинноволновой частью ($|q| < k_0$) межэлектронного взаимодействия.

В теории бесстолкновительной плазмы ограничиваются лишь этим вкладом кулоновского взаимодействия.

Второе и третье слагаемое в фигурных скобках (136) можно представить в виде

$$-ik \sum_{p_1} C_{p_1-p} \frac{\partial f_{p_1}}{\partial p_1} \delta f^c(k, p, t) = - \frac{\partial (\langle \epsilon'_p \rangle - \epsilon_p)}{\partial p} \left(\frac{\partial}{\partial r} \delta f^c \right)_k, \quad (138)$$

$$ik \sum_{p_1} C_{p_1-p} \frac{\partial f_p}{\partial p} \delta f^c(k, p_1, t) = \left(\frac{\partial \epsilon'_p}{\partial r} \right)_k \frac{\partial f_p}{\partial p}, \quad (139)$$

Здесь $\epsilon'_p \equiv \epsilon_p - \sum_{p_1} C_{p_1-p} f^c(r, p_1, t)$ — перенормированная межэлектронным взаимодействием одночастичная энергия.

Роль слагаемого (138) сводится к перенормировке скорости в круглой скобке левой части (135): $\frac{\partial \epsilon_p}{\partial p}$ необходимо заменить на $\frac{\partial}{\partial p} \langle \epsilon'_p \rangle$. Выражение (139) представляет собой влияние потенциального поля $\epsilon'_p - \epsilon_p$ на движение носителей, причем это поле обусловлено перенормировкой одночастичного спектра. Обычно эффектами перенормировки пренебрегают, так как при слабом взаимодействии они не существенны.

Дальше необходимо, как и раньше, выразить операторы g_k^c через f_p и δf^c . Если средняя потенциальная энергия кулоновского взаимодействия мала по сравнению со средней кинетической (что справедливо при $r_D^3 n \gg 1$, r_D — дебаевский радиус), то из-за дальнего действия кулоновских сил передаваемый при столкновениях импульс будет намного меньше теплового ($\bar{q} \ll \bar{p}$). Это обстоятельство поможет в дальнейшем упростить задачу.

Уравнение для g_k имеет вид

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + eF \left(\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial p'} \right) + i (\Delta_{p+k/2, q-k} - \Delta_{p_1, q}) \right] g_k(p, p_1; q) = -i[g_k(p, p_1; q), \hat{W}]. \quad (140)$$

Здесь $\Delta_{p, q} \equiv \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p$.

Поле F можно пренебречь в (140), когда за время столкновений Δt импульс электрона под действием поля F не успевает существенно измениться. Время Δt по порядку величины равно отношению расстояния, на котором частицы взаимодействуют, к средней скорости. Расстояние, на котором частицы «чувствуют» друг друга, меньше или равно дебаевскому радиусу (r_D). Следовательно, необходимый критерий имеет вид

$$\frac{eFr_D}{\bar{v}} \ll \bar{p}. \quad (141)$$

Напомним, что в случае электрон-фононного взаимодействия аналогичный критерий был несколько иным $\left(eF/\bar{p} \ll \frac{\bar{\varepsilon}_p}{\hbar} \right)$.

Запишем подробно коммутатор g_k с гамильтонианом кулоновского взаимодействия $\hat{W}$:

$$\begin{aligned} [g_k(p, p_1; q), \hat{W}] = & - \sum_{q', p'} C_q C_{q'} [a_{p+q'+k/2}^+ a_{p_1-q'}^+ a_{p_1}^+ a_{p_1+q} a_{p+q-k/2} + \\ & + a_{p+k/2}^+ a_{p_1+q+q'}^+ a_{p_1-q'}^+ a_{p_1} a_{p+q-k/2} - \\ & - a_{p+k/2}^+ a_{p_1+q}^+ a_{p_1}^+ a_{p_1-q'}^+ a_{p_1+q'} a_{p+q-k/2} - \\ & - a_{p+k/2}^+ a_{p_1+q} a_{p_1} a_{p_1-q'}^+ a_{p+q+q'-k/2}]. \end{aligned} \quad (142)$$

До сих пор математическое изложение задачи практически не отличалось от случая парных столкновений, рассмотренного в предыдущем параграфе. Однако в следующем преобразовании будет содержаться элемент нового. В произведении шести операторов в правой части (142) выделим не только флуктуации $\delta f(k, p, t)$, но и флуктуации произведения четырех операторов δg_k . Раньше ими можно было пренебречь, так как правая часть (142) пропорциональна $C_q C_{q'}$. Здесь же C_q не является малым параметром и необходимо учитывать δg_k . Выделим в каждом из слагаемых правой части (142) члены, содержащие f_p и δf^c . Формально это можно сделать путем замены каждой пары операторов $a_p^+ a_{p'}$ на $f_p \delta_{pp'} + \delta f\left(p - p', \frac{p+p'}{2}, t\right)$ при $|p - p'| < k_0$.

Оставшуюся часть в произведении шести операторов запишем в виде $\langle g_k \rangle + \delta g_k$ или же (если индексы близки) через f_p и δf^c .

Хотя на настоящем этапе нельзя линеаризовать по флуктуациям (ибо δf и δg_k не малы, если не проведена операция сглаживания по импульсам), это обстоятельство не вызывает осложнения. Нелинейные по флуктуациям величины ($\hat{O}(\delta f, \delta g_k)$) будем рассматривать как известные функции в уравнении для δg_k . После сглаживания по импульсам решения этого уравнения можно будет пренебречь величинами $\hat{O}(\delta f, \delta g_k)$ как малыми более высокого порядка по флуктуациям.

С учетом сказанного запишем флуктуирующую часть первой суммы в правой части (142) следующим образом:

$$\begin{aligned} & \sum_{q', p_1'} C_q C_{q'} \delta \{ a_{p+q'+k/2}^+ a_{p_1'-q'}^+ a_{p_1'}^+ a_{p_1+q}^+ a_{p_1} a_{p+q-k/2} \} = \\ & = C_q \sum_{p_1'} C_{-k} \delta f(k, p_1, t) \langle a_{p-k/2}^+ a_{p_1+q}^+ a_{p_1} a_{p+q-k/2} \rangle + \\ & + C_q \delta f(k, p+q, t) \langle a_{p_1'-q}^+ a_{p_1'}^+ a_{p_1+q}^+ a_{p_1} \rangle + \\ & + C_{q-k} f_{p+q-k/2} \delta (a_{p_1'-q+k}^+ a_{p_1'}^+ a_{p_1+q}^+ a_{p_1}) \} + \hat{Q}(\delta f, \delta g_k). \end{aligned} \quad (143)$$

При получении (143) мы учли, что в пространственно однородном случае $\langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p_3} a_{p_4} \rangle \sim \delta_{p_1+p_2, p_3+p_4}$. Кроме того, мы оставили только члены с наиболее сингулярными коэффициентами при операторах, т. е. такие, у которых $q' \leq q$. Физически это означает пренебрежение обменными эффектами при соударениях. Ясно, что если бы частицы сближались на расстояния порядка де-бройлевской длины волны, то обменные члены давали бы такой же вклад, как и основные, поскольку в этом случае из-за неопределенности координат частиц за каждой из них невозможно было бы проследить. Однако, ввиду того что основную роль в кинетических процессах играют столкновения с большими прицельными расстояниями, обменные эффекты несущественны (этот вопрос обсуждался в монографии [337]).

В формуле (143) мы отбросили сильно недиагональные произведения шести операторов, т. е. такие, у которых ни одна пара операторов рождения и уничтожения $a_{p_1}^+ a_{p_2}^+$ не может быть записана через f_{p_1} и δf (из-за $|p_1 - p_2| > k_0$). Для таких произведений (которые описывают тройные столкновения), вообще говоря, необходимо было бы записать уравнения движения типа (140) и провести преобразования, аналогичные приведенным выше. Тогда появились бы сильно недиагональные элементы восьми операторов и т. д. Ограничимся лишь уравнением для g_k и отбросим в нем сильно недиагональные произведения шести операторов, что соответствует пренебрежению тройными столкновениями и справедливо для достаточно разреженного газа (когда $r_D^3 n \gg 1$).

В выражение (143) входит флуктуация произведения четырех операторов. Поступая совершенно так же, как и при получении (126), можно выразить флуктуации этого произведения через δf и δg_k :

$$\begin{aligned} \delta (a_{p_1 - q + k}^+ a_{p_1} a_{p_1 + q}^+ a_{p_1}) &\simeq - \delta_{p_1, p_1 + q - k} f_{p_1} \delta f(k, p_1 + q, t) + \\ &+ \delta_{p_1, p_1 + q} (1 - f_{p_1}) \delta f(k, p_1, t) + \frac{1}{C_{-q}} \delta g_k \left(p_1 - q + \frac{k}{2}, p_1, q \right) + \\ &+ \hat{O} \{ \delta f, \delta g_k \} \end{aligned} \quad (144)$$

(напомним, что в (144) речь идет о сильно недиагональных элементах, для которых $|q| > k_0$, $|q - k| > k_0$).

Подставляя в (140) $g_k = \langle g_k \rangle + \delta g_k$, с учетом всех сделанных выше приближений получим для δg_k следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + i (\Delta_{p+k/2, q-k} - \Delta_{p_1, q}) - i C_q h_{p+k/2, q-k} \sum_p^* + i C_q h_{p_1, q} \sum_{p_1}^* \right] \times \\ \times \delta g_k(p, p_1; q) = - e \delta E(k) \left(\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial p_1} \right) \langle g_0(p, p_1; q) \rangle + \\ + i C_q \left\{ \sum_{p_1} \langle g_0(p_1, p_1; q) \rangle \delta h_{p, q} - \langle g_0(p, p_1; q) \rangle \delta h_{p_1, q} + C_q \delta I_{p, p_1, q} + \right. \\ \left. + \hat{O} \{ \delta f, \delta g_k \} \right\}. \end{aligned} \quad (145)$$

Здесь $h_{p, q} \equiv f_{p+q} - f_p$;

$$I_{p, p_1, q} \equiv f_{p+q} f_{p_1} (1 - f_p) (1 - f_{p_1+q}) - f_p f_{p_1+q} (1 - f_{p+q}) (1 - f_{p_1}).$$

Кроме того, $g_0 = g_k$ при $k = 0$.

Символ Σ^* в левой части (145) означает, что во всех функциях, на которые он действует, необходимо заменить p на p'' и просуммировать по всем p'' .

Символ δ перед h и I означает, как и раньше, что все стоящие после него функции f_p необходимо заменить на $f_p + \delta f(k, p, t)$ и оставить только линейные по δf слагаемые.

Первый член в правой части (145) учитывает влияние самосогласованного электрического поля δE . Очевидно, что если рассматривать низкочастотные флуктуации ($\omega \ll \bar{q}v$, $\bar{q}$ — средний передаваемый при соударениях импульс), то за время столкновения флуктуирующая часть функции распределения существенно не изменится под влиянием самосогласованного поля и первый член в правой части (145) может быть отброшен.

Если вместо $\bar{q}$ подставить минимальный передаваемый импульс $q_D = \frac{1}{r_D}$, то приведенный выше критерий, позволяющий пренебречь самосогласованным полем в (145), примет вид $\omega < \omega_p$ (ω_p — плазменная частота).

Полное решение уравнения (145) можно символически записать следующим образом:

$$\delta g_k |t = e^{-\hat{L}_0 \cdot (t-t_0)} \delta g_k |t_0 + \int_{t_0}^t e^{-\hat{L}_0(t-t')} \psi(t') dt', \quad (146)$$

где оператор $\hat{L}_0$ представляет собой сумму второго, третьего и четвертого слагаемых в квадратной скобке левой части (145), а $\psi(t)$ — правая часть (145). Если выбрать промежуток интегрирования $t - t_0$ намного бóльшим, чем длительность акта соударения, то второй член в правой части (146) после подстановки g_k в (136), а затем в (135) дает линеаризованный интеграл столкновений:

$$I_{ee} \{\delta f\} = \delta \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}; \mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}_1) I_{\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, \mathbf{q}}, \quad (147)$$

где

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}; \mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}_1) = 2\pi \frac{|C_q|^2}{|\kappa(\mathbf{q}, \Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}})|^2} \delta(\Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} - \Delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}}),$$

$$\kappa(\mathbf{q}, \omega) = 1 + C_q \sum_{\mathbf{p}} \frac{h_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}}{\omega - \Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} - i\eta}. \quad (148)$$

Именно на этом этапе, при подстановке g_k в (135) и сглаживании функций можно пренебречь нелинейными членами (входящими в выражение для g_k).

Первый член в (146) обозначим через δg_k^0 . Он приводит к появлению в кинетическом уравнении для функции δf^e стороннего потока. Поэтому займемся теперь нахождением его явного вида, чтобы иметь возможность вычислить затем коррелятор стороннего потока.

Легко показать, что δg_k^0 может быть представлена в виде

$$\delta g_k^0(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}', \mathbf{p}'_1} \varphi^{\mathbf{p}'}(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2, \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \times$$

$$\times \varphi^{\mathbf{p}'_1}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}, -\mathbf{q}, t) \delta g_k(\mathbf{p}' - \mathbf{k}/2, \mathbf{p}'_1 - \mathbf{q}, \mathbf{q})|t_0, \quad (149)$$

где функция $\varphi^{\mathbf{p}'}$ удовлетворяет уравнению

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + i\Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} - iC_q h_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}}^* \right] \varphi^{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = 0 \quad (150)$$

и начальному условию $\varphi^{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t_0) = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}$.

Уравнение (150) с указанным начальным условием эквивалентно интегральному уравнению

$$\varphi^{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} e^{-i\Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}(t-t_0)} + iC_q h_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}_1} \int_{t_0}^t e^{-i\Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}(t-t')} \times$$

$$\times \varphi^{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}, t') dt'. \quad (151)$$

Сделаем в (151) замену переменных $t - t' = t''$ и перейдем к пределу $t - t_0 \rightarrow \infty$. Тогда для Фурье-компоненты $\varphi^{p'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega)$ получим следующее уравнение:

$$\varphi^{p'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega) = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} e^{-i\omega t_0} \delta(\omega + \Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}) + C_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \frac{\sum_{\mathbf{p}_1} \varphi^{p'}(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}, \omega)}{\omega + \Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} - i\eta}. \quad (152)$$

Суммируя обе части (152) по $\mathbf{p}$, легко находим

$$\sum_{\mathbf{p}} \varphi^{p'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega) = -i\omega t_0 \frac{\delta(\omega + \Delta_{\mathbf{p}', \mathbf{q}})}{\kappa(-\mathbf{q}, \omega)}. \quad (153)$$

После подстановки (153) в (152) и обратного преобразования Фурье получим выражение для асимптотического ($t - t_0 \gg \bar{\Delta}_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}$) значения $\varphi^{p'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$:

$$\varphi^{p'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(t-t_0)} \hat{R}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega) \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \delta(\omega + \Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}), \quad (154)$$

где

$$\hat{R}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{C_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}}{\kappa(-\mathbf{q}, \omega)} \frac{1}{\omega + \Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} - i\eta} \sum_{\mathbf{p}}^*. \quad (155)$$

Оператор $\hat{R}$ обладает следующим простым свойством:

$$\sum_{\mathbf{p}} \hat{R}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega) \Phi_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\Phi_{\mathbf{p}}}{\kappa(-\mathbf{q}, \omega)}. \quad (156)$$

Формула (154) дает решение уравнения (150) и позволяет с помощью (149) определить $\delta g_{\mathbf{k}}^0$. Сторонний поток $K_{ee}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t)$ связан с $\delta g_{\mathbf{k}}^0$ соотношением

$$K_{ee}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t) = -i \sum [\delta g_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1, \mathbf{q}) - \delta g_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}; -\mathbf{q})]^c. \quad (157)$$

Суммирование в (157) ведется по переменным $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{q}$ в пределах, определяемых неравенствами $|\mathbf{q}| > \mathbf{k}_0$, $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| > \mathbf{k}_0$, $|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{q} \pm \mathbf{k}/2| > \mathbf{k}_0$.

Подставляя в (157) значение $g_{\mathbf{k}}^0$ из (149) и используя (154), (156), получим сторонний ток в виде

$$\begin{aligned} K_{ee}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, t) = & \int_{-\infty}^{\infty} \int d\omega d\omega' \exp[i(\omega + \omega')(t - t_0)] \times \\ & \times \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}_1} \left\{ \frac{\hat{R}(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2, \mathbf{q} - \mathbf{k}, \omega)}{\kappa(\mathbf{q}, \omega')} \delta(\omega + \Delta_{\mathbf{p} + \mathbf{k}/2, \mathbf{q} - \mathbf{k}}) \delta(\omega' - \Delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}}) \times \right. \\ & \times \delta g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1; \mathbf{q})|_{t=t_0} - \frac{\hat{R}(\mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{k}/2, -\mathbf{q} - \mathbf{k}, \omega)}{\kappa(-\mathbf{q}, \omega')} \delta(\omega - \Delta_{\mathbf{p} - \mathbf{k}/2, \mathbf{q}}) \times \\ & \times \delta(\omega' + \Delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}}) \delta g_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}; -\mathbf{q})|_{t=t_0} \Big\}. \quad (158) \end{aligned}$$

Если пренебречь эффектом экранировки кулоновского взаимодействия, т. е. положить $\hat{R} \rightarrow 1$, $\kappa \rightarrow 1$, то сторонний поток (158) будет полностью совпадать с найденным в предыдущем параграфе.

Корреляторы сторонних потоков выражаются, как видно из (158), через одновременные средние $\langle \delta g_k / t=t_0, \delta g_{k'} / t=t_0 \rangle$.

Если пренебречь обменными членами, то в нижайшем порядке по энергии взаимодействия последнее выражение имеет вид

$$\begin{aligned} & \langle \delta g_k (p, p_1; q) | t_0 \delta g_{k'} (p', p'_1; q') | t_0 \rangle \simeq \\ & \simeq C_q C_{q'} f_{p+k/2} f_{p_1+q} (1 - f_{p+q-k/2}) (1 - f_{p_1}) \delta_{k', -k} (\delta_{q', -q} \delta_{p'_1, p_1+q} \delta_{p', p+q} + \\ & + \delta_{q', q-k} \delta_{p', p_1+k/2} \delta_{p'_1, p+k/2}). \end{aligned} \quad (159)$$

Используя (159), легко находим корреляторы сторонних потоков при $\omega \ll \bar{\Delta}_{p,q}$:

$$\begin{aligned} & \langle K_{ee}(r, p, t) K_{ee}(r', p', t') \rangle_{k,\omega} = \sum_{q,p_1} W(p, p_1 + q; p + q, p_1) \times \\ & \times \{ [f_p f_{p_1+q} (1 - f_{p+q}) (1 - f_{p_1}) + f_{p+q} f_{p_1} (1 - f_p) (1 - f_{p_1+q})] \times \\ & \times (\delta_{p,p'} + \delta_{p_1,p'-q} - \delta_{pp'} - \delta_{q,p'-p}) - \\ & - 2\pi \sum_{p_2,p_3} W(p, p_2 + q; p + q, p_2) \delta(\Delta_{p,q} - \Delta_{p_2,q}) \times \\ & \times (\delta_{p_3,p'} - \delta_{p_3,p'-q}) [f_p f_{p_1} f_{p_2+q} f_{p_3+q} (1 - f_{p+q}) (1 - f_{p_1+q}) \times \\ & \times (1 - f_{p_2}) (1 - f_{p_3}) + (p \rightleftharpoons p_3) - (p_1 \rightleftharpoons p_3) - (p \rightleftharpoons p_2)] \}. \end{aligned} \quad (160)$$

Символ $(p \rightleftharpoons p_1)$ обозначает выражение, равно первому слагаемому в последней квадратной скобке (160), с той лишь разницей, что необходимо p заменить на p_1 , а p_1 на p .

Второй член в фигурной скобке (160) содержит дополнительно по сравнению с первым энергию кулоновского взаимодействия, из-за чего он оказывается намного меньше первого. Простая оценка показывает, что их отношение по порядку величины таково: $(r_D \bar{q})^{-4} \ll 1$.

Пренебрегая упомянутым членом, коррелятор стороннего потока запишем в виде

$$\begin{aligned} & \langle K_{ee}(r, p, t) K_{ee}(r', p', t') \rangle_{k,\omega} = \\ & = \sum_{q,p_1} W(p, p_1 + q; p + q, p_1) [f_p f_{p_1+q} (1 - f_{p+q}) (1 - f_{p_1}) + \\ & + f_{p+q} f_{p_1} (1 - f_p) (1 - f_{p_1+q})] (\delta_{p,p'} + \delta_{p_1,p'-q} - \delta_{p_1,p'} - \delta_{q,p'-p}). \end{aligned} \quad (161)$$

Важно подчеркнуть, что при получении (160) мы использовали предположение, что $\kappa(q, \omega) \neq 0$ в нижней полуплоскости комплексной переменной ω . Это предположение соответствует случаю, когда плазма устойчива относительно возмущений потенциального электрического поля (такое же условие считается выпол-

ненным при получении экранированного интеграла столкновений).

Формула (161) отличается от полученной в предыдущем параграфе только тем, что матричный элемент записан без учета обменного эффекта, а в кулоновском взаимодействии учтена экранировка. По этой причине коррелятор стороннего потока не будет иметь расходимостей по передаваемому импульсу q .

Можно легко обобщить (161) на случай нескольких сортов частиц:

$$\begin{aligned} \langle K_{ii'}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) K_{jj'}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t') \rangle_{\mathbf{k}, \omega} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}_1} W^{ii'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}; \mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}_1) \times \\ \times [f_{\mathbf{p}}^i f_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}}^{i'} (1 - f_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}^i) (1 - f_{\mathbf{p}_1}^{j'}) + f_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}^i f_{\mathbf{p}_1}^{i'} (1 - f_{\mathbf{p}}^i) (1 - f_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}}^{j'})] \times \\ \times [\delta_{i,j} \delta_{i',j'} (\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} - \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}}) + \delta_{i,j'} \delta_{i',j} (\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}' - \mathbf{q}} - \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}'})]. \quad (162) \end{aligned}$$

Здесь $K_{ii'}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ — сторонний поток, обусловленный взаимодействием частиц сорта i с частицами сорта i' ; $f_{\mathbf{p}}^i$ — функция распределения частиц сорта i .

Если имеем два типа частиц и масса одного из них равна бесконечности (неподвижные ионизированные примеси и свободные электроны в кристалле), то коррелятор стороннего потока, обусловленного рассеянием легких частиц на тяжелых, можно получить из (162). Он равен:

$$\begin{aligned} \langle K_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) K_{ei}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t') \rangle_{\mathbf{k}, \omega} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{N_i C_{\mathbf{q}}^2}{\kappa(\mathbf{q}, 0)} \delta(\Delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}) (\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} - \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}}) \times \\ \times [f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}) + f_{\mathbf{p} + \mathbf{q}} (1 - f_{\mathbf{p}})], \quad (163) \end{aligned}$$

где N_i — количество тяжелых частиц в объеме ⁸³.

Рассмотренная выше задача о флуктуациях в системе заряженных частиц исследовалась также с помощью диаграммной техники [322].

§ 11. ФЛУКТУАЦИИ ФОНОННОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

В предыдущих параграфах были получены уравнения для δf^c и δN^c . Были найдены сторонние потоки и рассчитаны их корреляторы. Рассмотрено электрон-фононное, электрон-электронное и электрон-примесное рассеяние. Еще один важный механизм столкновений, а именно фонон-фононное рассеяние, нами не исследовался. Между тем фонон-фононные столкновения происходят, как правило, значительно чаще фонон-электронных, и ими определя-

⁸³ Напомним, что мы полагали везде объем $V = 1$. Если этого не делать, то в правой части (163) появится множитель $1/V^2$. Это замечание относится также и к ранее приведенным корреляторам сторонних потоков.

ется релаксация той выделенной группы фононов, с которой взаимодействуют электроны проводимости. Именно фонон-фононное взаимодействие дает обычно основной вклад в теплосоппротивление полупроводников и, следовательно, определяет локальные флуктуации температуры решетки, которые становятся существенными при низких частотах [292]. Поэтому без учета фонон-фононного рассеяния нельзя корректно исследовать флуктуационные процессы в фононной системе.

Приступая к рассмотрению фонон-фононных столкновений, конкретизируем (будем следовать работе [340]) механизм межфононных взаимодействий. Примем, что в разложении гамильтониана кристалла по степеням смещений атомов решетки из положений равновесий помимо гармонических членов существенную роль играют также кубические члены.

В представлении вторичного квантования соответствующий гамильтониан (для кубических слагаемых) имеет вид

$$\hat{W}_f = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}_1} [V(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathbf{q}_1) b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}_1}^+ + \text{к. с.}]. \quad (164)$$

Матричный элемент $V(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathbf{q}_1)$ отличен от нуля, когда $\mathbf{q} + \mathbf{q}' = \mathbf{q}_1 + \mathbf{G}$, где $\mathbf{G}$ — вектор обратной решетки. Здесь необходимо учитывать возможность процессов переброса ($\mathbf{G} \neq 0$) в отличие от межэлектронного взаимодействия в полупроводниках, при котором такие столкновения маловероятны.

Следуя изложенной в § 7 схеме, в борновском приближении по взаимодействию $V(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathbf{q}_1)$, легко получим интеграл фонон-фононных столкновений I_{ff} и коррелятор стороннего потока $K_{ff}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t)$:

$$\begin{aligned} I_{ff} \{N_{\mathbf{q}}\} = 4\pi \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \{ & 2 |V(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1; \mathbf{q}_2)|^2 \delta(\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}_1} - \omega_{\mathbf{q}_2}) \times \\ & \times [N_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}_1} (N_{\mathbf{q}_2} + 1) - (N_{\mathbf{q}} + 1) (N_{\mathbf{q}_1} + 1) N_{\mathbf{q}_2}] + \\ & + |V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; \mathbf{q})|^2 \delta(\omega_{\mathbf{q}_1} + \omega_{\mathbf{q}_2} - \omega_{\mathbf{q}}) [N_{\mathbf{q}} (N_{\mathbf{q}_1} + 1) (N_{\mathbf{q}_2} + 1) - \\ & - (N_{\mathbf{q}} + 1) N_{\mathbf{q}_1} N_{\mathbf{q}_2}] \}, \end{aligned} \quad (165)$$

$$\begin{aligned} \langle K_{ff}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) K_{ff}(\mathbf{r}', \mathbf{q}', t') \rangle_{\mathbf{k}, \omega} = 4\pi \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \{ & |V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; \mathbf{q})|^2 \times \\ & \times \delta(\omega_{\mathbf{q}_1} + \omega_{\mathbf{q}_2} - \omega_{\mathbf{q}}) [N_{\mathbf{q}} (N_{\mathbf{q}_1} + 1) (N_{\mathbf{q}_2} + 1) + (N_{\mathbf{q}} + 1) N_{\mathbf{q}_1} N_{\mathbf{q}_2}] \times \\ & \times (\delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} - 2\delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}'} + 2 |V(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1; \mathbf{q}_2)|^2 \delta(\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}_1} - \omega_{\mathbf{q}_2}) \times \\ & \times [N_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}_1} (N_{\mathbf{q}_2} + 1) + (N_{\mathbf{q}} + 1) (N_{\mathbf{q}_1} + 1) N_{\mathbf{q}_2}] \times \\ & \times (\delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}'} + \delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}'} - \delta_{\mathbf{q}_2, \mathbf{q}'} \}. \end{aligned} \quad (166)$$

В отличие от § 6 условие квазиклассичности по частотам здесь выглядит несколько иначе: $\omega \ll \bar{\omega}_{\mathbf{q}}$ ($\bar{\omega}_{\mathbf{q}}$ — характерные фононные энергии, для акустических фононов $\bar{\omega}_{\mathbf{q}} \sim ps$, s — скорость звука, p — средний импульс электрона).

При низких температурах решетки электроны в основном взаимодействуют с акустическими фононами. Оптические фононы об-

ладают (по сравнению с акустическими) большей энергией, и их количество резко падает с понижением температуры.

Поэтому, интересуясь низкими температурами, имеет смысл ограничиться рассмотрением взаимодействия электронов с акустическими фононами.

Раньше при исследовании явления разогрева электронов (гл. 3) мы отмечали, что электроны взаимодействуют в основном с длинноволновыми фононами, импульс которых $q \sim \bar{p}$.

Большинство акустических фононов обладают энергией, близкой к T (T — температура решетки в энергетических единицах). За исключением случая сверхнизких температур, обычно хорошо выполняется неравенство $T \gg \bar{sp}$. При этом условии длинноволновые фононы составляют малую долю от всей массы фононов. Между тем отводимая от электронов к решетке джоулевая мощность на первом этапе благодаря электрон-фононному взаимодействию поглощается именно длинноволновыми фононами. И уже затем в результате фонон-фононных столкновений отводится к основной группе коротковолновых фононов. Последние служат тепловым резервуаром для длинноволновых фононов. С понижением температуры частота столкновений длинноволновых фононов с коротковолновыми уменьшается. При этом скорость передачи энергии от неравновесных электронов длинноволновым фононам может сравниться со скоростью отвода энергии к основной массе фононного резервуара. Тогда наступит разогрев длинноволновых фононов.

Задача о разогреве длинноволновых фононов представляет для нас здесь особый интерес, и мы остановимся на ней подробнее. Причин для этого несколько. Во-первых, мы не учитывали разогрев фононов при исследовании горячих электронов; во-вторых, учет разогрева фононов, как увидим, приводит к выявлению новых закономерностей в поведении шумовых характеристик; в-третьих, эта задача позволит проиллюстрировать на практике применение полученных выше уравнений для δf^c и δN^c . И, наконец, еще одно соображение. В последние годы наряду с неравновесными носителями все большее внимание привлекают неравновесные фононы, создаваемые как с помощью горячих электронов, так и с помощью лазерной накачки. Развиваемый здесь подход может оказаться весьма удобным для исследования такого рода задач.

Запишем теперь полную систему уравнений для электрон-фононных флуктуаций:

$$\begin{aligned} \left[i(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) + e\mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + I'_{ee} + I'_{ei} \right] \delta f + I'_{ef} \{ \delta f, \delta N \} = \\ = -e\delta E \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} + K_{ee} + K_{ei} + K_{ef}, \end{aligned} \quad (167)$$

$$\left[i \left(\omega - \mathbf{k} \frac{\partial \omega_q}{\partial \mathbf{q}} \right) + I'_{ff} \right] \delta N + I'_{fe} \{ \delta N, \delta f \} = K_{fe} + K_{ff}. \quad (168)$$

В этих уравнениях и ниже мы будем опускать индекс «с» у величин δf и δN . Это не должно привести к недоразумению, поскольку в дальнейшем будем иметь дело только со сглаженными функциями.

В формулах (167) и (168) $I'_{ee}, I'_{ei}, I'_{ef}, I'_{fe}$ и I'_{ff} — линеаризованные интегралы столкновений, соответственно электрон-электронных, электрон-примесных, электрон-фононных, фонон-электронных и фонон-фононных столкновений; K_{ij} — сторонние потоки перечисленных выше механизмов рассеяния. Мы учли только продольное флуктуирующее поле δE , которое определяется первым уравнением Максвелла (113), если известно значение δf .

Поперечная составляющая флуктуирующего поля обычно мала и не играет существенной роли (если не интересоваться особым случаем, когда система неустойчива по отношению к возбуждению поперечных волн).

Как уже упоминалось, при $\bar{s}p \ll T$ длинноволновые фононы составляют малую часть всего фононного резервуара. Поэтому естественно предположить, что именно коротковолновые фононы дают основной вклад в интеграл столкновений длинноволновых фононов $I'_{ff} \{N_q\}$. Предположим также, что коротковолновые фононы представляют собой тепловой резервуар для длинноволновых и не возмущаются последними.

Будем в дальнейшем обозначать буквой q импульс длинноволновых фононов, а коротковолновых — буквами q_1 и q_2 . Удержим теперь в (165) только члены, пропорциональные $\delta \{\omega_q + \omega_{q_1} - \omega_{q_2}\}$, так как в остальных не содержится столкновений с коротковолновыми фононами (это следует из закона сохранения энергии).

При этом

$$I'_{ff} \{\delta N\} = 8\pi \sum_{q_1, q_2} |V(q, q_1; q_2)|^2 \delta(\omega_q + \omega_{q_1} - \omega_{q_2}) \times \\ \times \{\delta N(k, q, \omega)(N_{q_1}^0 - N_{q_2}^0) + N_q [\delta N(k, q_1, \omega) - \delta N(k, q_2, \omega)] - \\ - \delta N(k, q_2, \omega)(N_{q_1}^0 + 1) - N_{q_2}^0 \delta N(k, q_1, \omega)\}. \quad (169)$$

Здесь $N_{q_1}^0$ и $N_{q_2}^0$ — функции распределения коротковолновых фононов (они считаются известными — совпадают с равновесным распределением Планка); N_q — неравновесная функция распределения длинноволновых фононов.

Для нахождения флуктуаций коротковолновых фононов $\delta N(k, q_1, \omega)$ и $\delta N(k, q_2, \omega)$, вообще говоря, необходимо было бы решать уравнение типа (168). Однако ситуация упрощается, когда характерная частота релаксации коротковолновых фононов v_{ff}^h достаточно большая:

$$v_{ff}^h \gg v_{ff}(q), \omega, ks. \quad (170)$$

Здесь $[v_{ff}(\mathbf{q})]^{-1}$ — характерное время релаксации длинноволновых фононов (его вид приводится ниже).

При выполнении неравенства (170) столкновительный член I'_{ff} в уравнении для $\delta N(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega)$ является самым большим (сторонний поток $K_{ff} \sim V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; \mathbf{q}_1')$ и, следовательно, $K_{ff} \sim \sqrt{v_{ff}^k}$). Поэтому в нулевом порядке теории возмущений по параметру $(v_{ff}^k)^{-1}$ решением уравнения для коротковолновых фононов будет функция, которая зануляет интеграл столкновений:

$$I'_{ff} \{\delta N^{(0)}\} = 0. \quad (171)$$

Если пренебречь вкладом в уравнение (171) неравновесных длинноволновых фононов, то оно удовлетворяется следующей функцией:

$$\delta N^{(0)} = \text{const} \frac{\partial N_{\mathbf{q}_1}^0}{\partial T},$$

Легко показать, что const в $\delta N^{(0)}$ равна флуктуации температуры решетки. В самом деле, из определения полной энергии колебаний решетки следует

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \sum_{\mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_1} N_{\mathbf{q}_1}^0, \\ \delta \mathcal{E} &= \sum_{\mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_1} \delta N^{(0)} = \text{const} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_1} N_{\mathbf{q}_1}^0 = \\ &= \text{const} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T} = \text{const} C = C \delta T \end{aligned}$$

(C — теплоемкость решетки).

Подставляя $\delta N^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) = \frac{\partial N_{\mathbf{q}_1}^0}{\partial T} \cdot \delta T$ в уравнение (169), получим

$$\begin{aligned} I'_{ff} \{\delta N\} &= v_{ff}(\mathbf{q}) \left[\delta N(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) - \frac{\partial N_{\mathbf{q}}^0}{\partial T} \cdot \delta T \right] + \\ &+ \frac{\partial v_{ff}(\mathbf{q})}{\partial T} (N_{\mathbf{q}} - N_{\mathbf{q}}^0) \delta T. \end{aligned} \quad (172)$$

Здесь

$$v_{ff}(\mathbf{q}) = 8\pi \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} |V(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1; \mathbf{q}_2)|^2 \delta(\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}_1} - \omega_{\mathbf{q}_2}) (N_{\mathbf{q}_1}^0 - N_{\mathbf{q}_2}^0). \quad (173)$$

В корреляторе сторонних потоков также учтем только столкновения с коротковолновыми фононами. В результате приходим к следующему выражению:

$$\langle K_{ff}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) K_{ff}(\mathbf{r}', \mathbf{q}', t) \rangle_{\mathbf{k}, \omega} = 2\delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} N_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}}^0 v_{ff}(\mathbf{q}). \quad (174)$$

Таким образом, когда справедливы сделанные выше предположения, то корреляционная функция $\langle K_{ff} K_{ff} \rangle$ определяется

так же, как и интеграл фонон-фононных столкновений, параметром $v_{ff}(\mathbf{q})$.

До сих пор речь шла лишь об одном сорте фононов. Все приведенные выше формулы легко обобщить на случай взаимодействия фононов разных ветвей. Для этого необходимо лишь подразумевать формально под импульсом каждого фонона две величины: его импульс и номер ветви.

Флуктуации температуры определяются с помощью уравнения теплопроводности, которое можно получить из (168), пренебрегая в нем длинноволновыми фононами (а значит, и электрон-фононным взаимодействием).

Тогда вместо (168) получим

$$\left[i \left(\omega - \mathbf{k} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial \mathbf{q}_1} \right) + I'_{ff} \right] \delta N(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) = K_{ff}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega). \quad (175)$$

Умножим теперь (175) на $\omega_{\mathbf{q}_1}$ и просуммируем по всем $\mathbf{q}_1$. При этом получаем

$$\sum_{\mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_1} I'_{ff} \{ \delta N \} = 0, \quad (176)$$

$$\sum_{\mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_1} K_{ff}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) = 0, \quad (177)$$

$$i\omega \sum_{\mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_1} \delta N(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) \approx i\omega C \delta T, \quad (178)$$

$$-i\mathbf{k} \sum_{\mathbf{q}_1} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial \mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_1} \delta N(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) \approx -i\mathbf{k} \sum_{\mathbf{q}_1} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial \mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_1} \delta N^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega). \quad (179)$$

Первые два уравнения (176) — (179) являются следствием закона сохранения энергии при фонон-фононных столкновениях. В (178) мы использовали нулевое приближение $\delta N^{(0)}$. В (179) нулевое приближение не дает вклада. Поэтому в правой части (179) мы оставили первый не исчезающий член ряда $\delta N^{(1)}$ в разложении δN по степени $(I'_{ff})^{-1}$. Он равен:

$$\begin{aligned} \delta N^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) &= \\ &= - (I'_{ff})^{-1} \left\{ i \left(\omega - \mathbf{k} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial \mathbf{q}_1} \right) \delta N^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) + K_{ff}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) \right\}. \end{aligned} \quad (180)$$

Из (175) с учетом (176) — (180) следует уравнение для флуктуации температуры δT :

$$\begin{aligned} i\omega C \delta T + \sum_{\mathbf{q}_1} \left(i\mathbf{k} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial \mathbf{q}_1} \right) \omega_{\mathbf{q}_1} (I'_{ff})^{-1} \left\{ i \left(\omega - \mathbf{k} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial \mathbf{q}_1} \right) \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial N_{\mathbf{q}_1}^0}{\partial T} \delta T + K_{ff}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \omega) \right\} = 0. \end{aligned} \quad (181)$$

В фигурных скобках можно пренебречь слагаемым, пропорциональным ω , так как оно мало по сравнению с $i\omega C\delta T$ по параметру итераций.

Без этого слагаемого уравнение (181) в пространственно-временном представлении примет вид

$$\left\{ C \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \hat{\alpha} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right\} \delta T(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{K}_E(\mathbf{r}, t). \quad (182)$$

Здесь $\hat{\alpha}$ — тензор теплопроводности:

$$\alpha_{ij} = \sum_{\mathbf{q}_1} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial q_{1i}} \omega_{\mathbf{q}_1} (I'_{ff})^{-1} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial q_{1j}} \frac{\partial N_{\mathbf{q}_1}^0}{\partial T}, \quad (183)$$

а $\mathbf{K}_E$ — сторонний флуктуационный поток тепла:

$$\mathbf{K}_E(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}_1} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial q_{1i}} \omega_{\mathbf{q}_1} (I'_{ff})^{-1} K_{ff}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_1, t). \quad (184)$$

Его корреляционная функция может быть найдена по известному коррелятору $\langle K_{ff} K_{ff} \rangle$. Вычисления особенно упрощаются в рассматриваемом здесь равновесном (относительно коротковолновых фононов) случае.

Коррелятор сторонних потоков (166) с учетом явного вида линейаризованного интеграла столкновений может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} & \langle K_{ff}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_1, t) K_{ff}(\mathbf{r}', \mathbf{q}'_1, t') \rangle = \\ & = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') [I'_{ff}(\mathbf{q}_1) + I'_{ff}(\mathbf{q}'_1)] \delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}'_1} N_{\mathbf{q}_1} (N_{\mathbf{q}'_1} + 1). \end{aligned} \quad (185)$$

Здесь и ниже $I'_{ff}(\mathbf{q}_1)$ означает линейаризованный фонон-фононный интеграл столкновений, действующий по переменной $\mathbf{q}_1$ на стоящую при нем функцию.

Из (184) и (185) находим

$$\begin{aligned} & \langle K_E^i(\mathbf{r}, t) K_E^j(\mathbf{r}', t') \rangle = \\ & = \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \omega_{\mathbf{q}_1} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_1}}{\partial q_{1i}} \omega_{\mathbf{q}_2} \frac{\partial \omega_{\mathbf{q}_2}}{\partial q_{2j}} (I'_{ff}(\mathbf{q}_1))^{-1} (I'_{ff}(\mathbf{q}_2))^{-1} \times \\ & \times [I'_{ff}(\mathbf{q}_1) + I'_{ff}(\mathbf{q}_2)] \delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} N_{\mathbf{q}_1} (N_{\mathbf{q}_1} + 1). \end{aligned} \quad (186)$$

Учитывая, что операторы $(I'_{ff}(\mathbf{q}_1))^{-1}$ и $(I'_{ff}(\mathbf{q}_2))^{-1}$ коммутируют между собой, и сравнивая (186) с (183), получим

$$\langle K_E^i(\mathbf{r}, t) K_E^j(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') 2T^2 \alpha_{ij}. \quad (187)$$

В обычной системе единиц (напомним, что мы полагали $\hbar = 1$, $V = 1$) в (187) перед δ -функцией стоит коэффициент V — объем кристалла.

Мы видим, что в системе равновесных фононов флуктуации полностью описываются с помощью одного кинетического коэффициента — тензора теплопроводности. (Хотя этот результат можно было получить сразу, используя флуктуационно-диссипативную теорему, представляется тем не менее интересным проследить, как он вытекает из кинетических уравнений для флуктуации одночастичных функций распределения.)

Из (182) следует, что флуктуации температуры незначительны при высоких частотах, таких, как $\omega \gg \frac{\alpha}{c} k^2$, где k^{-1} — характерные длины изменения флуктуаций.

§ 12. КОНВЕКТИВНЫЙ ШУМ В УСЛОВИЯХ РАЗОГРЕВА ДЛИННОВОЛНОВЫХ ФОНОНОВ

Когда по образцу протекает ток, то в направлении электрического поля F может наблюдаться специфический шум, обусловленный флуктуациями средней энергии носителей $\bar{\epsilon}_p$. Этот шум возникает из-за того, что флуктуации $\bar{\epsilon}_p$ вызывают флуктуации подвижности носителей μ (если последняя зависит и от $\bar{\epsilon}_p$). В конечном счете это приводит к флуктуации протекающего тока (или напряжения на концах образца).

Конвективный шум исследовался в ряде работ [307, 341—343]. С учетом влияния неравновесных фононов на характер конвективного шума задача решена в работе [340].

Примем следующие упрощающие предположения:

1) так как разогрев фононов наиболее вероятен при низких температурах, то будем считать, что импульс электронов рассеивается на ионизованных примесях (с частотой ν_{ei}), а энергия — на акустических фононах (в результате квазиупругих столкновений);

2) межэлектронные взаимодействия обуславливают максвелловский вид симметричной части функции распределения электронов $f^s(\epsilon_p)$ (с электронной температурой T_e);

3) асимметричная часть фононной функции распределения значительно меньше симметричной, это так при $v_d \ll s$ (v_d — дрейфовая скорость электронов) или в случае достаточно частых упругих столкновений фононов с примесями [123];

4) расчет будем производить для пространственно однородных флуктуаций (т. е. для случая $\mathbf{k} = 0$).

При принятых допущениях флуктуация симметричной части функции распределения вычисляется по формуле

$$\delta f_s(\epsilon_p) = \frac{\partial f_s}{\partial T_e} \delta T_e.$$

Функция δf_s аналогична $\delta N^{(0)}$. Легко проверить, что функция $\delta f_s / \delta T_e$ удовлетворяет уравнению $I'_{ee} \{ \delta f_s / \delta T_e \} = 0$ и является,

следовательно, нулевой аппроксимацией при разложении в ряд по $(I'_{ee})^{-1}$ флуктуации симметричной части функции распределения электронов.

Флуктуации электронной температуры δT_e определяются из уравнения баланса, которое получим после умножения левой и правой частей (167) на ϵ_p и суммирования по p :

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} i\omega n \delta T_e - \sum_q \omega_q \left[v_{fe} \left(\delta N_s - \frac{\delta T_e}{\omega_q} \right) + \right. \\ \left. + \delta T_e \left(N_s - \frac{T_e}{\omega_q} \right) \frac{\partial v_{fe}}{\partial T_e} \right] = j\delta E + F\delta j + K_{ef}^e. \end{aligned} \quad (188)$$

Здесь и ниже индекс «s» обозначает симметричную часть функции; v_{fe} — частота фонов-электронных столкновений; K_{ef}^e — сторонний поток, связанный с электрон-фононным взаимодействием; δj — флуктуация плотности тока. Названные величины равны соответственно:

$$v_{fe} = n \frac{s V \sqrt{2\pi m}}{T_e^{3/2}} |C_q|^2 \exp\left(-\frac{q^2}{8mT_e}\right), \quad (189)$$

$$K_{ef}^e = \sum_{q_1} \epsilon_{q_1} K_{ef} = - \sum_q \omega_q K_{fe}, \quad (190)$$

$$\delta j = en \left[\mu \delta E + \frac{\partial \mu}{\partial T_e} F \delta T_e \right] + j_{ei}^{ct}, \quad (191)$$

$$j_{ei}^{ct} = e \sum_p \frac{\partial \epsilon_p}{\partial p} v_{ei}^{-1} K_{ei}. \quad (192)$$

Напомним еще раз, что в этой главе мы полагаем объем системы $V = 1$, а также $\hbar = 1$.

Второй член в квадратной скобке (191) учитывает влияние флуктуаций температуры δT_e на флуктуации тока δj .

В уравнение (188) входят флуктуации симметричной части функции распределения длинноволновых фононов δN_s , которая удовлетворяет следующему уравнению:

$$\begin{aligned} (i\omega + v_{fe} + v_{ff}) \delta N_s - \left[\frac{\partial}{\partial T_e} \left(v_{fe} \frac{T_e}{\omega_q} \right) - N_s \frac{\partial}{\partial T_e} v_{fe} \right] \delta T_e = \\ = K_{fe}^s + K_{ff}^s. \end{aligned} \quad (193)$$

Уравнение (193) следует из (168), когда выполняются сделанные выше предположения.

Заметим также, что его можно получить из кинетического уравнения для среднего значения фононной функции распределения,

которое в рассматриваемом случае имеет простой вид [123]:

$$\left(N_s - \frac{T_e}{\omega_q}\right) v_{fe} + v_{ff} (N_s - N_q^0) = 0. \quad (194)$$

Для этого необходимо формально линеаризовать его по малым флуктуациям δN_s и δT_e , добавить в левую часть член, описывающий изменение δN_s во времени, а в первую — соответствующий ланжевенский источник флуктуаций.

Определяя теперь из (188) и (193) δT_e и δN_s , находим следующее выражение для флуктуаций тока в направлении поля F :

$$\begin{aligned} \delta j_F &= en\mu' \delta E_F + \\ &+ \frac{1}{2\mu} \left\{ \frac{\mu' - \mu}{F} \sum_q \omega_q \frac{v_{fe} K_{ff} - (i\omega + v_{ff}) K_{fe}}{i\omega + v_{ff} + v_{fe}} + (\mu' + \mu) (j_{ei}^{ct})_F \right\} \equiv \\ &\equiv en\mu' \delta E_F + \delta j_F^{ct}. \end{aligned} \quad (195)$$

Здесь $en\mu'$ — функция линейного отклика системы на внешнее возмущение:

$$\begin{aligned} \mu' &= \mu \frac{A_\omega + j'F}{A_\omega - j'F}, \quad j' = \frac{\partial j}{\partial T_e}, \quad v = \frac{v_{ff} v_{fe}}{v_{ff} + v_{fe}}, \\ A_\omega &= \frac{3}{2} i\omega n + \sum_q \frac{(i\omega + v_{ff}) (v_{ff} + v_{fe})}{(i\omega + v_{ff} + v_{fe}) v_{ff}} \frac{\partial}{\partial T_e} [(T_e - T) v]. \end{aligned} \quad (196)$$

Не при всяких значениях поля F состояние системы будет устойчивым. Очевидно, что подвижность μ' должна быть конечной при любых частотах. Отсюда получаем, что необходимым условием устойчивости состояния является неравенство

$$\sum_q \frac{\partial}{\partial T_e} [(T_e - T) v] > \frac{\partial}{\partial T_e} jF. \quad (197)$$

Если неравенство (197) переходит в равенство, то наступает перегревная неустойчивость. Подход к границе такой неустойчивости путем увеличения F выразится в существенном возрастании низкочастотного шума.

Когда внешняя цепь является короткозамкнутой по переменной составляющей тока (т. е. $\delta E_F = 0$), тогда $\delta j_F = \delta j_F^{ct}$. Величина δj_F^{ct} — источник флуктуаций тока или напряжения в образце, который, в отличие от δE_F , не зависит от внешней цепи.

Вычислим теперь корреляционную функцию флуктуаций стороннего тока S_ω :

$$\begin{aligned} S_\omega &\equiv \langle \delta j_F^{ct}(t) \delta j_F^{ct}(t') \rangle_\omega = 2T_e \left\{ en \operatorname{Re} \mu' + \frac{(j')^2}{|A_\omega - j'F|^2} \times \right. \\ &\times \sum_q v_{fe} [T_e - v(Tv_{ff} + T_e v_{fe}) \frac{T_e v_{fe} + (2T_e - T) v_{ff}}{T_e v_{ff} [\omega^2 + (v_{ff} + v_{fe})^2]}] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (198)$$

Рис. 41. Качественная зависимость корреляционной функции тока от частоты при разогреве электронов и длинноволновых фононов.

При получении (198) мы использовали определение δj_F^{CT} согласно (195), а также значение корреляторов $\langle K_{ff} K_{ff} \rangle$ из (174) и $\langle K_{fe} K_{fe} \rangle$ из (123).

Несложный анализ формулы (198) показывает, что при $v_{ff} \gg v_{fe}$ спектральная функция S_ω состоит из низкочастотного и высокочастотного плато с переходной областью на частотах порядка частоты релаксации энергии носителей на фононах (поскольку частоты v_{ff} и v_{fe} являются функциями q , то, записывая $v_{ff} \gg v_{fe}$, подразумеваем, что такое неравенство выполняется для актуальных значений $q \propto \bar{p}$):

$$\omega \propto \bar{v}_{fe} = \frac{2}{3n} \sum_q v_{fe}.$$

Условие $v_{ff} \gg v_{fe}$ означает отсутствие разогрева фононов, так как в этом случае отвод энергии от длинноволновых фононов к термостату происходит значительно быстрее, чем подвод ее от разогретых электронов. Формула (198) для короткозамкнутого образца в предельном случае $v_{ff} \gg v_{ff}$ была получена в работе [307].

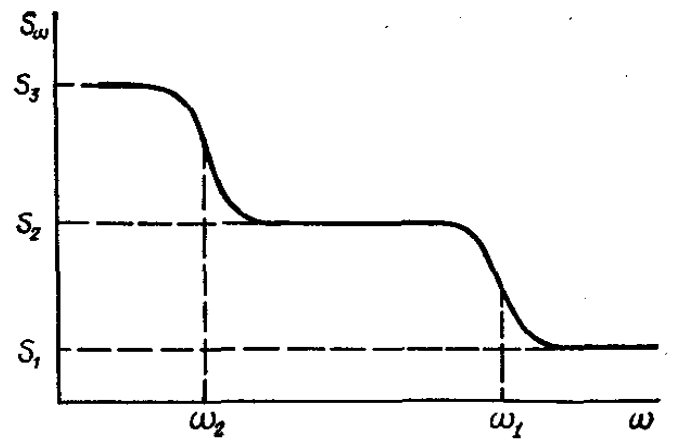
При $v_{ff} \leq v_{fe}$ в S_ω имеются две характерные частоты, вблизи которых наблюдается заметная дисперсия:

$$\omega_1 \propto \frac{2}{3n} \sum_q v, \quad \omega_2 \propto v.$$

Для невырожденных носителей ω_1 по порядку величины равно $\omega_2/f_s(\bar{\epsilon}_p)$, т. е. $\omega_1 \gg \omega_2(f_s(\bar{\epsilon}_p))$ нормирована, как обычно, $\sum_p f(\epsilon_p) = n$). Частота ω_1 , как и раньше, характеризует скорость отвода энергии от электронов к термостату, а v описывает релаксацию длинноволновых фононов. Дополнительная дисперсия на частотах обусловлена флуктуациями фононной функции распределения δN_s . Такая интерпретация следует из того факта, что дополнительная дисперсия исчезает, когда в уравнении (188) положить $\delta N_s = 0$.

Интересно отметить, что в случае сильного неравенства $v_{ff} \ll v_{fe}$ дисперсия на частотах ω_1 исчезает. В этом случае длинноволновые фононы и электроны выступают как одна система с общей эффективной температурой T_e . При этом T_e может флуктуировать только из-за фонон-фононных процессов. Поэтому v_{ff} будет единственной характерной частотой.

Резюмируем вкратце полученный результат. В греющих электрических полях возможны следующие ситуации:



а) $\nu_{ff} \gg \nu_{fe}$ — в спектре шума есть дисперсия на частотах порядка ν_{ef} ;

б) $\nu_{ff} \ll \nu_{fe}$ — есть дисперсия на частотах порядка ν_{ff} ;

в) $\nu_{ff} \ll \nu_{fe}$ — есть дисперсия на частотах ν и ν/f_s (ϵ_p) (рис. 41).

Во всех этих случаях относительные разности между высокочастотным плато и низкочастотным по порядку величины равны относительному разогреву $(T_e - T)/T$. В случае а) разность $S_2 - S_1$ имеет тот же знак, то и производная $\partial\mu/\partial T_e$. В случаях б) и в) такого простого правила нет, но при слабых разогревах $\left(\frac{T_e - T}{T} \ll 1\right)$ знаки $S_2 - S_1$ и $S_3 - S_2$ совпадают со знаком величины $1 + 2 \frac{\mu}{T} (\partial\mu/\partial T_e)^{-1}$.

В случае рассеяния импульса носителей на ионизованных примесях $\partial\mu/\partial T_e > 0$ и S_ω будет таким, как это показано на рисунке.

Мы видим, что флуктуации фононов могут существенно сказаться на виде спектральной функции S_ω . Поэтому исследование шумов представляет значительный интерес для изучения кинетических свойств длинноволновых фононов при их разогреве.

§ 13. ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

Полученные уравнения для флуктуаций и выражение для корреляторов сторонних потоков справедливы в очень широкой области частот и волновых векторов. Они содержат в себе информацию о статическом поведении частиц на микроскопических длинах (порядка длины свободного пробега l) и микроскопических интервалах времени (порядка времени между двумя последовательными актами соударений частиц с рассеивателями ν^{-1}). Эти уравнения довольно сложны по структуре, они содержат много микропараметров вещества (например, эффективную массу носителей, константы деформационного потенциала, энергии фононов различных ветвей).

Однако для практических целей не часто требуется столь детальная информация о поведении системы, а достаточно знать флуктуации таких физических величин, как плотности заряда и тока, полей, в макроскопических масштабах ($\omega \ll \nu$, $k \ll l^{-1}$). Такие крупномасштабные флуктуации называют гидродинамическими. Уравнения для гидродинамических флуктуаций можно получить, исходя из кинетического описания. Процедура вывода этих уравнений аналогична методу Энского — Чепмена, который применялся при получении макроскопических уравнений переноса в газах [344].

Мы получили здесь уравнения гидродинамического приближения для флуктуаций, следуя работам [308, 345]. Опустим в урав-

нении для δf члены, пропорциональные δN , δH и δE_1 . Тогда оно примет вид

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial r} + eF \frac{\partial}{\partial p} + I'(p) \right\} \delta f(r, p, t) = -e\delta E \frac{\partial f_p}{\partial p} + K. \quad (199)$$

Для краткости записи мы опустили здесь в δf индекс, обозначающий операцию сглаживания, а в операторах I' и K — нижние индексы, обозначающие тип взаимодействия.

Так как мы рассматриваем систему с горячими носителями, которые наблюдаются преимущественно в невырожденном газе, будем считать, что $f_p \ll 1$, и тогда линеаризованный оператор столкновений электронов с решеткой I'_{ef} совпадает с нелинеаризованным I_{ef} .

Из (199) непосредственно следует уравнение непрерывности, для чего необходимо просуммировать его по всем импульсам p . В результате получим

$$e \frac{\partial \delta n}{\partial t} + \operatorname{div} \delta j = 0. \quad (200)$$

Для того чтобы определить δj , необходимо решить (199) и подставить найденное значение δf в выражение для тока. Решить (199) можно с помощью итераций, считая, что в гидродинамическом приближении первые два члена в (199) малы по сравнению с оператором $eF \frac{\partial}{\partial p} + I(p)$, который обозначим через L_p .

Будем искать решение уравнения (199) в виде разложения по обратному оператору L_p^{-1} (что по порядку величины соответствует разложению по ω/v). При этом, однако, нужна определенная осторожность, поскольку может возникнуть неоднозначность при записи решения уравнения

$$L_p X_p = Y_p \quad (201)$$

с помощью обратного оператора

$$X_p = L_p^{-1} Y_p. \quad (202)$$

Дело в том, что оператор L_p имеет собственную функцию с нулевым собственным значением:

$$L_p f_p = 0. \quad (203)$$

Действительно, условие (203) представляет собой не что иное, как уравнение Больцмана в стационарном и однородном случае. Благодаря существованию нетривиального решения уравнения (203) (которое предполагается единственным), помимо (202), решением (201) будет также функция

$$X'_p = L_p^{-1} Y_p + \operatorname{const} f_p. \quad (203)$$

Чтобы избежать возможных осложнений и однозначно определить L_p^{-1} , остановимся подробнее на свойствах L_p^{-1} и L_p .

Заметим прежде всего, что оператор L_p удовлетворяет следующему условию:

$$\sum_p L_p X_p = 0, \quad (204)$$

выражающему закон сохранения числа частиц при действии поля и столкновений. Отсюда следует, что уравнение (201) имеет решение только, если правая часть (201) есть функция с нулевой суммой, т. е.

$$\sum_p Y_p = 0. \quad (205)$$

Поэтому, чтобы корректно определить L_p^{-1} , мы должны потребовать, во-первых, чтобы он действовал только на функции с нулевой суммой, и, во-вторых, наложить одно дополнительное условие. В качестве такого дополнительного условия потребуем, чтобы решение, выраженное символом L_p^{-1} , также принадлежало классу функций с нулевой суммой:

$$\sum_p L_p^{-1} Y_p = 0. \quad (206)$$

Удобно условиться, чтобы и оператор L_p действовал только в классе функций с нулевой суммой. Этого всегда можно добиться ввиду очевидного тождества:

$$L_p X_p = L_p \left\{ X_p - \frac{f_p}{n} \sum_{p'} X_{p'} \right\}. \quad (207)$$

Перепишем (201) с учетом (207) в виде

$$L_p \left\{ X_p - \frac{f_p}{n} \sum_{p'} X_{p'} \right\} = Y_p. \quad (208)$$

Умножая (208) на L_p^{-1} (учитывая, что $L_p^{-1} L_p = L_p L_p^{-1} = 1$), получаем решение

$$X_p = L_p^{-1} Y_p + \frac{f_p}{n} \sum_{p'} X_{p'}. \quad (209)$$

В отличие от (202) здесь const точно определена.

Устранив таким образом неоднозначность операции L_p^{-1} и определив операторы L_p и L_p^{-1} на одном и том же классе функций, мы сможем в дальнейшем манипулировать ими чисто механически, не беспокоясь о корректности производимых операций.

Перепишем уравнение (199) в соответствии с потребованным условием на сумму от искомой функции. Для этого вычтем из него уравнение непрерывности (200), предварительно умножив послед-

нее на f_p/n . В результате получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\delta f - f_p \frac{\delta n}{n} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\mathbf{v} \delta f - f_p \frac{\delta \mathbf{j}}{en} \right) + L_p \left(\delta f - f_p \frac{\delta n}{n} \right) = \\ = -e\delta E \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} + K. \end{aligned} \quad (210)$$

Действуя слева на обе части (210) оператором L_p^{-1} , получим

$$\begin{aligned} \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f_p \frac{\delta n}{n} + L_p^{-1} \left\{ -e\delta E \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}} + K - \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial t} \left(\delta f - f_p \frac{\delta n}{n} \right) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\mathbf{v} \delta f - f_p \frac{\delta \mathbf{j}}{en} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (211)$$

Форма записи (211) удобна для нахождения δf путем разложения его в ряд по степеням L_p^{-1} . Для оценок будем считать L_p^{-1} равным времени релаксации ν^{-1} независимо от того, сводится ли к последнему точный интеграл столкновений. Отметим, что при квазиупругих столкновениях возможны два характерных времени релаксации функции распределения: по энергии и импульсу. Для оценок необходимо использовать большее из них. Заменяя при оценках производные $\frac{\partial}{\partial t}$ и $\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ характерными частотами и волновыми векторами, получим следующее выражение для флуктуаций плотности тока в нижайшем порядке по малым параметрам ω/ν и $k\nu/\nu$:

$$\delta \mathbf{j} = e \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v} \delta f \simeq \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial n} \delta n + \left(\delta E \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \right) \mathbf{j} - e \hat{D} \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} + \delta \mathbf{j}^{\text{ст}}, \quad (212)$$

где тензор диффузии определяется выражением

$$D_{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{p}} v_{\alpha} L_p^{-1} \{v_{\beta} - v_{d\beta}\} \frac{f_p}{n}, \quad (213)$$

$$\mathbf{v}_d = \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v} f_p - \text{дрейфовая скорость}, \quad (214)$$

$$\delta \mathbf{j}^{\text{ст}} = e \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v} L_p^{-1} K. \quad (215)$$

Первый член в правой части (212) $(\partial \mathbf{j} / \partial n) \delta n$ учитывает дрейф малых флуктуаций плотности носителей во внешнем поле $\mathbf{F}$. Используя определение дрейфовой скорости $\mathbf{v}_d$, его можно записать в несколько ином виде

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial n} \delta n = e \mathbf{v}_d \delta n.$$

Второй член $\left(\delta E \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \right) \mathbf{j}$ описывает влияние флуктуаций электрического поля на протекающий ток и, как легко видеть, выражается

через дифференциальную подвижность $\hat{\mu}'$ следующим образом:

$$\left(\delta E \frac{\partial}{\partial F}\right) \mathbf{j} = en\hat{\mu}'\delta E.$$

Явный вид $\hat{\mu}'$ задается выражением

$$\mu'_{\alpha\beta} = -\frac{e}{n} \sum_{\mathbf{p}} v_{\alpha} L_{\mathbf{p}}^{-1} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial p_{\beta}}.$$

Сравнивая $\hat{\mu}'$ и $\hat{D}$, легко видеть, что в равновесном случае (когда $\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{\mathbf{v}}{T} f_{\mathbf{p}}$) между ними существует очевидная связь $\hat{\mu}' = \frac{e}{T} \hat{D}$ (соотношение Эйнштейна). В общем случае — это независимые параметры и должны определяться независимо.

В новых обозначениях (212) перепишется в виде

$$\delta \mathbf{j} = ev_d \delta n + en\hat{\mu}'\delta E - e\hat{D} \frac{\partial \delta n}{\partial \mathbf{r}} + \delta \mathbf{j}^{\text{CT}}. \quad (216)$$

Уравнение непрерывности (200), в котором $\delta \mathbf{j}$ определяется выражением (216), совместно с уравнением Пуассона для поля δE (см. (113)) образуют систему уравнений для определения δn и флуктуаций продольного электрического поля δE через сторонний ток $\delta \mathbf{j}^{\text{CT}}$. Корреляционная функция последнего может быть легко найдена с помощью известных корреляторов $\langle KK \rangle$ и формулы (215):

$$\begin{aligned} \langle \delta j_{\alpha}^{\text{CT}}(\mathbf{r}, t) \delta j_{\beta}^{\text{CT}}(\mathbf{r}', t') \rangle_{\mathbf{k}, \omega} &= e^2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} v_{\alpha} v'_{\beta} L_{\mathbf{p}}^{-1} L_{\mathbf{p}'}^{-1} \langle K_{ef}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \times \\ &\times K_{ef}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t') \rangle_{\mathbf{k}, \omega}. \end{aligned} \quad (217)$$

Запишем коррелятор $\langle K_{ef} K_{ef} \rangle$ в более удобном, чем в (121), виде. С этой целью преобразуем правую часть (121) следующим образом:

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{p}''} (W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}''} f_{\mathbf{p}} + W_{\mathbf{p}'', \mathbf{p}} f_{\mathbf{p}'}) - W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}', \mathbf{p}} f_{\mathbf{p}'} &= \\ &= eF \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} + \left(\sum_{\mathbf{p}''} W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}''} f_{\mathbf{p}} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} - W_{\mathbf{p}', \mathbf{p}} f_{\mathbf{p}'} \right) + \\ &+ \left(\sum_{\mathbf{p}''} W_{\mathbf{p}', \mathbf{p}''} f_{\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} - W_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}} \right) = eF \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} + \\ &+ [L_{\mathbf{p}} + L_{\mathbf{p}'}] \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}} = eF \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \right) \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}} + \\ &+ [L_{\mathbf{p}} + L_{\mathbf{p}'}] \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}} \equiv (L_{\mathbf{p}} + L_{\mathbf{p}'}) \left\{ f_{\mathbf{p}} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} - \frac{f_{\mathbf{p}} f_{\mathbf{p}'}}{n} \right\}. \end{aligned} \quad (218)$$

При действии оператора $(L_p + L_{p'})$ на функцию $\frac{f_p f_{p'}}{n}$ получим нуль. Мы ввели это слагаемое в последнее выражение (218) для выполнения правила сумм, которое дальше позволит однозначно определить действие обратных операторов L_p^{-1} и $L_{p'}^{-1}$ на функцию $f_p \delta_{p,p'} - \frac{f_p f_{p'}}{n}$.

Используя (218) и переходя к обычной системе единиц с неравным единице объемом, перепишем коррелятор (121) следующим образом:

$$\langle K_{\text{ef}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) K_{\text{ef}}(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t') \rangle_{k,\omega} = \frac{1}{V^2} (L_p + L_{p'}) f_p \left(\delta_{p,p'} - \frac{f_{p'}}{N} \right),$$

$$(N \equiv Vn). \quad (219)$$

После подстановки (219) в (217) получим

$$\langle \delta j_{\alpha}^{\text{CT}}(\mathbf{r}, t) \delta j_{\beta}^{\text{CT}}(\mathbf{r}', t') \rangle_{k,\omega} = \frac{e^2}{V^2} \sum_p \left\{ v_{\alpha} L_p^{-1} f_p v_{\beta} - \sum_{p'} v_{\beta} \frac{f_{p'}}{N} \right\} +$$

$$+ v_{\beta} L_p^{-1} f_p v_{\alpha} - \sum_{p'} v_{\alpha} \frac{f_{p'}}{N} \}. \quad (220)$$

При суммировании второго члена в квадратной скобке мы заменили индексы $p \rightarrow p'$, $p' \rightarrow p$.

Сравнивая (220) с определением тензора диффузии (213) и используя (214), получим окончательную формулу

$$\langle \delta j_{\alpha}^{\text{CT}}(\mathbf{r}, t) \delta j_{\beta}^{\text{CT}}(\mathbf{r}', t') \rangle_{k,\omega} = \frac{ne^2}{V} (D_{\alpha\beta} + D_{\beta\alpha}). \quad (221)$$

Таким образом, тензор диффузии $\hat{D}$ связан простым соотношением с коррелятором стороннего тока, что подчеркивает стохастический характер диффузионных процессов. Поэтому, измеряя токовые шумы, можно находить $\hat{D}$ или же решать обратную задачу: по известному тензору диффузии исследовать шумы в системах, к которым применимо гидродинамическое описание.

Связь между неравновесными флуктуациями сторонних токов и коэффициентом диффузии была установлена Лексом [327] и Прайсом [305].

Теорию легко можно обобщить на случай наличия нескольких типов носителей. Для этого необходимо ввести в правые части уравнений непрерывности члены, учитывающие обмен частицами между различными группами, и соответствующие таким процессам ланжевеновские источники.

Важно подчеркнуть, что формула (221) получена с использованием явного вида коррелятора сторонних потоков. Если существенны электрон-электронные столкновения, для которых в неравновесном случае не выполняется простое соотношение (219), то теряется простая связь (221) между $\langle \delta j^{\text{CT}} \delta j^{\text{CT}} \rangle$ и тензором

диффузии. Поэтому для исследования гидродинамических флуктуаций в этом случае необходимо знать помимо $\hat{D}$, μ' , n еще один независимый параметр, описывающий дополнительную корреляцию в неравновесной системе с парными столкновениями.

* * *

В этой главе получены уравнения для флуктуирующих частей электронной и фононной функций распределения с учетом различных механизмов рассеяния. Определены корреляторы входящих в эти уравнения источников флуктуаций — сторонних потоков. На этом принципиальная сторона постановки задачи о флуктуациях в неравновесных системах закончена. Дальше необходимо решать эти уравнения для конкретных ситуаций. Упомянутые уравнения имеют довольно сложный интегро-дифференциальный вид и содержат к тому же сторонние потоки, которые являются операторами (с заданными статистическими свойствами). Возникает вопрос, как их решать. Заранее ясно, что в общем виде решить такие уравнения не удастся. Но чаще всего это и не требуется. Обычно в эксперименте шум измеряют не во всем, а в определенном конечном спектральном диапазоне. Поэтому имеет смысл решать уравнения для флуктуаций в различных спектральных диапазонах, используя те или иные приближения. Так, при рассмотрении задачи о рассеянии электромагнитных волн на флуктуациях плотности тока (заряда) интерес могут представлять высокочастотные флуктуации (вблизи плазменных частот), для которых справедливо неравенство $\omega \gg \nu$. В этом случае в качестве нулевого приближения можно взять

$$\delta f_0(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \omega) \simeq \left\{ e\delta E(\mathbf{k}, \omega) + e \frac{\mathbf{v}}{c} \times \delta \mathbf{H}(\mathbf{k}, \omega) \right\} \frac{\partial f_p}{\partial \mathbf{p}}$$

и использовать затем разложение по параметру ν/ω (подставляя в интеграл столкновений функцию δf_0 и определяя δf в следующем приближении). В частности, таким образом была решена задача о сечении рассеяния электромагнитных волн, обусловленном флуктуациями горячих электронов в полупроводниках [346, 347]. Было показано, что в полупроводниках с горячими электронами и нестандартным законом дисперсии ϵ_p может возникать новый механизм рассеяния волн, не связанный с флуктуациями концентрации.

Рассеяние электромагнитных волн флуктуациями горячих электронов в многодолинных полупроводниках детально исследовано в работе [348]. При $\omega \ll \nu$, как было показано в § 13, можно использовать гидродинамическое приближение. Это существенно упрощает задачу. Флуктуации в полупроводниках в гидродинамическом приближении рассматривались во многих работах (например, [349—351]).

Самая трудная для расчета ситуация, когда необходимо определить шумы в области частот $\omega \sim \nu$. В последнем случае проще использовать не уравнения для флуктуаций функции распределения, а уравнения для корреляционных функций (метод моментов). Это позволяет использовать для расчета спектральных характеристик шума вариационный метод [352].

В настоящей главе флуктуации рассмотрены в квазиклассическом приближении ($\hbar k \ll \bar{p}$, $\hbar \omega \ll \epsilon_p$). Условия этого приближения не всегда выполняются. В частности, интерес могут представлять ситуации, когда $\hbar \omega \geq \bar{\epsilon}_p$. Изложенная выше схема вывода уравнений для флуктуаций функций распределения остается в силе и в этом случае с тем лишь отличием, что здесь нельзя пренебрегать влиянием флуктуирующего поля на функцию распределения за время соударения. Такое обобщение дано в работе [329].

В сильных магнитных полях, в узкозонных полупроводниках и в сильных электрических полях может наступить квантование зонного спектра (возникают уровни Ландау и Штарка соответственно).

Использование уравнений движения для квантового аналога классической микроскопической функции распределения позволяет описать флуктуации и в этой ситуации (что и сделано в работах [331, 332]).

1. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников.— М.: Наука, 1978.— 615 с.
2. Зейтц Ф. Современная теория твердого тела.— М.; Л.: Гостехтеориздат, 1949.— 736 с.
3. Zak J. The kq -representation in the dynamics of electrons in solids.— Solid State Phys., 1972, 27, p. 1—62.
4. Бете Г., Зоммерфельд А. Электронная теория металлов.— М.; Л.: Гостехиздат, 1938.— 316 с.
5. Тамм Иг. Über eine Mögliche Art der Electronenbindung an Kristalloberflächen.— Sow. Phys., 1932, 1, N 6, S. 733—746.
6. Дэвисон С., Левин Дж. Поверхностные Таммовские состояния.— М.: Мир, 1973.— 232 с.
7. Bloch F. Über die Quantenmechanik der Electronen in Kristallgittern.— ZS. f. Phys., 1929, 52, N 7/8, S. 555—600.
8. Займан Дж. Принципы теории твердого тела.— М.: Мир, 1966.— 416 с.
9. Цидильковский И. М. Зонная структура полупроводников.— М.: Наука, 1978.— 328 с.
10. Харрисон У. Теория твердого тела.— М.: Мир, 1972.— 616 с.
11. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела.— М.: Наука, 1978.— 792 с.
12. Люттингер Дж., Кон В. Движение электронов и дырок в возмущенных периодических полях.— В кн.: Проблемы физики полупроводников.— М.: Изд-во иностр. лит., 1957, с. 514—539.
13. Давыдов А. С. Квантовая механика.— М.: Наука, 1973.— 703 с.
14. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел.— М.: Наука, 1967.— 491 с.
15. Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов.— М.; Л.: Гостехтеориздат, 1951.— 256 с.
16. Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках.— М.: Наука, 1972.— 584 с.
17. Kane E. O. Band structure of indium antimonide.— J. Phys. and Chem. Solids, 1957, 1, N 4, p. 249—261.
18. Равич Ю. И. О температурной зависимости эффективной массы и влияния двухфононных процессов на подвижность в полупроводниках с узкой запрещенной зоной.— ФТТ, 1965, 7, № 6, с. 1821—1831.
19. Хилсум К., Роуз-Инс А. Полупроводники типа $A_{III}B_V$.— М.: Изд-во иностр. лит., 1963.— 323 с.
20. Маделунг О. Физика полупроводниковых соединений элементов III и IV групп.— М.: Мир, 1967.— 477 с.
21. Rode D. L. Electron mobility in direct-gap polar semiconductors.— Phys. Rev. B, 1970, 2, N 4, p. 1012—1024.
22. Baumann K. On the temperature dependence of the band gap in semiconductors.— Phys. status solidi B, 1974, 63, N 1, p. K71 — K74.

23. Ганн Дж. Эффект Ганна.— УФН, 1966, 89, № 1, с. 147—160.
24. Gunn J. B. Electron transport properties relevant to instabilities in GaAs.— J. Phys. Soc. Jap., 1966, 21, Suppl., p. 505—508.
25. Chynoweth W. L., Feldman W. L., McCumber D. E. Mechanism of the Gunn effects.— J. Phys. Soc. Jap., 21, Suppl., 1966, p. 514—521.
26. Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Миронов А. Г. Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках.— М.: Наука, 1972.— 414 с.
27. Левинштейн М. Е., Пожела Ю. К., Шур М. С. Эффект Ганна.— М.: Сов. радио, 1975.— 288 с.
28. Pal B. P. Hot electron magnetic susceptibility of degenerate semiconductors at low temperatures: effect of non-parabolicity.— Phys. Status solidi B, 1974, 63, N 2, p. 739—749.
29. Коллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры.— М.: Мир, 1969.— 360 с.
30. Dimmock J. O. The calculation of electronic energy bands by the augmented plane wave method.— Solid State Phys., 1971, 26, p. 103—274.
31. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников.— М.: Наука, 1977.— 672 с.
32. Borzieskowski I. Approximate analytical description of the E(k) dependence of the band of heavy and light holes in Si and Ge.— Phys. status solidi B, 1974, 61, N 2, p. 607—614.
33. Antoncik E. Band structure of semiconductors.— In: Electron in crystalline solids. Vienna: Intern. atomic energy agency, 1973, p. 461—530.
34. Herman F., Kortum R. L., Kuglin C. D., Short R. A. New studies of the band structure of the diamond-type crystals.— J. Phys. Soc. Jap., 1966, 21, Suppl., p. 7—14.
35. Кочелан В. А., Пина В. И., Писковой В. Н., Соколов В. Н. Теория многозначного равновесного распределения носителей тока в многодолинных полупроводниках.— ЖЭТФ, 1971, 61, № 6, с. 2504—2513.
36. Baranskii P. I., Kolomoets V. V. The determination of the deformation potential constants in n-germanium.— Phys. status solidi B, 1971, 45, N 1, p. K55 — K59.
37. Walton A. K., Williams G. P., Reddy K. V. K. Deformation potentials of germanium and silicon by differential spectroscopic observation of their indirect absorption edges.— Phys. status solidi B, 1971, 47, N 1, p. K29 — K32.
38. Cresswell M. W., McKelvey J. P. Minority-Carrier mobility in p-type germanium under High Uniaxial Stress.— Phys. Rev., 1966, 144, N 2, p. 605—609.
39. Shay J. L., Tell B. Energy band structure of I + III + VI₂ semiconductors.— Surface Sci., 1973, 37, N 3, p. 748—762.
40. Поплаевой А. С., Полягалов Ю. И., Ратнер А. И. Структура энергетических зон соединений AgGaSe₂, AgGaS₂, AgGaTe₂.— Изв. вузов. Физика, 1974, № 11, с. 24—29.
41. Manfredotti C., Mancini A. M., Rizzo A. et al. Electrical Properties of GaS_xSb_{1-x} solid solutions.— Phys. status solidi A, 1978, 48, N 2, p. 293—296.
- 41a. Aubon M. J., Caron L. G., Jay-Geron J. P. Band structure of cadmium arsenide at room temperature.— Phys. Rev. B., 1977, 15, N 8, p. 3872—3878.
42. Физика и химия соединений A_{II}B_{VI}.— М.: Мир, 1970.— 624 с.
43. Георгобиани А. Н. Широкозонные полупроводники A_{II}B_{VI} и перспективы их применения.— УФН, 1974, 113, № 1, с. 129—155.
44. Равич Ю. И., Ефимова Б. А., Смирнов И. А. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe и PbS.— М.: Наука, 1968.— 383 с.
- 45a. Groves S. H., Brown R. N., Pidgeon C. R. Interband magnetoreflexion and band structure of HgTe.— Phys. Rev. B., 1967, 161, N 3, p. 779—793.

456. *Абрикосов А. А., Брандт Н. Б.* Новые состояния вещества.— Вестн. АН СССР, 1973, № 2, с. 3—13.
46. *Берченко Н. Н., Пашковский М. В.* Теллурид ртути — полупроводник с нулевой запрещенной зоной.— УФН, 1976, 119, № 2, с. 223—255.
- 47а *Гельмонт Б. Л., Иванов-Омский В. И., Цидильковский И. М.* Электронный энергетический спектр бесщелевых полупроводников.— УФН, 1976, 120, № 3, с. 337—362.
- 47б. *Zawadzki W.* Electron transport phenomena in small-gap semiconductors.— Adv. Phys., 1974, 23, N 3, p. 435—522.
48. *Абрикосов А. А., Бенеславский С. Д.* О возможности существования веществ, промежуточных между металлами и диэлектриками.— ЖЭТФ, 1970, 59, № 10, с. 1280—1298.
49. *Groves S. H., Paul W.* Band structure of gray tin.— Phys. Rev. Lett., 1967, 11, N 5, p. 194—197.
50. *Конузэл Э.* Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях.— М.: Мир, 1970.— 384 с.
51. *Блатт Ф.* Физика электронной проводимости в твердых телах.— М.: Мир, 1971.— 470 с.
52. *Buther P. N.* Basic electron transport theory.— In: Electron in cristalline solids. Viena: Intern. atomic energy agency, 1973, p. 103—165.
53. *Денис В., Пожела Ю.* Горячие электроны.— Вильнюс: Минтис, 1971.— 289 с.
54. *Шокли В.* Теория электронных полупроводников.— М.: Изд-во иностр. лит., 1953.— 714 с.
55. *Борн М., Кунь Х.* Динамическая теория кристаллических решеток.— М.: Изд-во иностр. лит., 1958.— 488 с.
56. *Zook J. D.* Piezoelectric scattering in semiconductors.— Phys. Rev. A, 1964, 136, N 3, p. 869—878.
57. *Ландау Л., Лифшиц Е.* Теория упругости.— М.: Наука, 1965.— 202 с.
58. *Harrison W.* Scattering of electrons by lattice vibrations in nonpolar crystals.— Phys. Rev., 1956, 104, N 5, p. 1281—1290.
59. *Seitz F.* On the mobility of electrons in pure Non-polar insulators.— Phys. Rev., 1948, 73, N 4, p. 549—564.
60. *Fröhlich H., Pelzer H., Zeinaw.* Propetries of slow-electrons in polar materials.— Phil. Mag., 1950, 41, N 314, p. 221—242.
61. *Fröhlich H.* Electrons in lattice fields.— Adv. Phys., 1954, 3, N 11, p. 325—361.
62. *Черчиньяни К.* Теория и приложения уравнения Больцмана.— М.: Мир, 1978.— 495 с.
63. *Херринг К., Фогт Э.* Теория явлений переноса и потенциала деформации для полупроводников со многими минимумами на изоэнергетических поверхностях с анизотропным рассеянием.— В кн.: Проблемы физики полупроводников. М.: Изд-во иностр. лит., 1957, с. 567—598.
64. *Самойлович А. Г., Коренблит И. Я., Даховский И. В., Искра В. Д.* Анизотропное рассеяние электронов на ионизированных примесях и акустических фононах.— ФТТ, 1961, 3, № 11, с. 3285—3298.
65. *Дыкман И. М., Томчук П. М.* Влияние электрического поля на температуру, электропроводность и термоэмиссию полупроводников.— ФТТ, 1960, 2, № 9, с. 2228—2239.
66. *Conwell E., Weisskopf V. F.* Theory of impurity scattering in semiconductors.— Phys. Rev., 1950, 77, N 3, p. 388—390.
67. *Брукс Г.* Теория электрических свойств германия и кремния.— Пробл. соврем. физики, 1957, № 8, с. 74—155.
68. *Ландау Л. Д.* Кинетическое уравнение в случае кулоновского взаимодействия.— ЖЭТФ, 1937, 7, № 2, с. 203—209.
69. *Козн Р., Спитцер Л., Роутли П.* Электрическая проводимость ионизированного газа.— Пробл. соврем. физики, 1956, № 2, с. 54—69.
70. *Спитцер Л.* Физика полностью ионизированного газа.— М.: Изд-во иностр. лит., 1957.— 112 с.

71. Спитцер Л., Херм Р. Явления переноса в полностью ионизированном газе.— Пробл. соврем. физики, 1956, № 2, с. 70—79.
72. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике.— М.: Гостехиздат, 1946.— 119 с.
73. Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов.— М.: Наука, 1971.— 332 с.
74. Константинов О. В., Перель В. И. Столкновения частиц в высокотемпературной плазме.— ЖЭТФ, 1960, 39, № 9, с. 861—871.
75. Balescu R. Irreversible processes in ionized gases.— Phys. Fluids, 1960, 3, N 1, p. 52—63.
76. Исихара А. Статистическая физика.— М.: Мир, 1973.— 471 с.
77. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов.— М.: Изд-во иностр. лит. 1960.— 510 с.
78. Desloge E. A., Matthysse S. W. Collision term in the boltzman equation.— Amer. J. Phys., 1960, 28, N 1, p. 1—12.
79. Смирнов В. И. Курс высшей математики.— М.: Наука, 1974.— Т. 3. Ч. 2. 672 с.
80. Pearson G. I., Bardeen J. Electrical properties of pure silicon and silicon alloys containing boron and phosphorum.— Phys. Rev., 1949, 75, N 5, p. 865—883.
81. Erginsoy C. Neutral impurity scattering in semiconductors.— Phys. Rev., 1950, 79, N 6, p. 1013—1014.
82. Massey H. S. W., Moisewitsch B. L. The scattering of electrons by hydrogen atoms.— Phys. Rev., 1950, 78, N 2, p. 180—181.
83. Fucai M., Kawamura H., Sekidi K., Imai I. Line-broadening of cyclotron resonanse due to lattice and neutral impurity acattering in silicon and germanium.— J. Phys. Soc. Jap., 1964, 19, N 1, p. 30—39.
84. Благосклонская Л. Е., Гершензон Е. М., Ладыжинский Ю. П., Попова А. П. Рассеяние электронов на нейтральных акцепторах в полупроводниках.— ФТТ, 1968, 10, № 10, с. 3010—3016.
85. Благосклонская Л. Е., Гершензон Е. М., Ладыжинский Ю. П., Попова А. П. Рассеяние электронов на нейтральных донорах в полупроводниках.— ФТТ, 1968, 11, № 10, с. 2967—2971.
86. Градштейн И. С., Рыжик П. М. Таблицы интегралов, сумм рядов и произведений.— М.: Наука, 1971.— 1108 с.
87. Wollenberg W. Zeitabhängige Boltzmann Gleichung fur Kristallelectronen und Einstellung der Stationaren Verteilung.— Ann. Phys., 1973, 29, N 4, S. 358—364.
88. Пожела Ю. К. Плазма и токовые неустойчивости в полупроводниках.— М.: Наука, 1977.— 367 с.
89. Kurosawa T. Streaming in the absence of a magnetic field.— J. Phys. Soc. Jap., 1971, 31, N 3, p. 668—678.
90. Kurosawa T. Monte carlo calculations of hot electron problems.— J. Phys. Soc. Jap., 1966, 21, Suppl., p. 424—426.
91. Maeda H., Kurosawa T. Hot electron population in crossed electric and magnetic fields.— In: Proc. Intern. conference on the physics of semicondztors. Warszawa : PWN, 1972, p. 602—607.
92. Gram N. O., Jorgensen M. H., Meyer N. I. Monte carlo catculations on hot electrons instabilities in n-type Si and Ge.— In: Proc. Intern. Conference on the physics of semicondztors. Warszawa : PWN, 1972, p. 622—629.
93. Lebowhl P. A., Marcus P. M. Hot electron distibutrions by direct integration of the boltzmann equation.— Solid State Communs, 1971, 9, N 19, p. 1671—1674.
94. Costato M., Jacoboni C., Reggiani L. Hole transport in polar semiconductors.— Phys. status solidi B, 1972, 52, N 2, p. 461—473.
95. Budd H. Variable formulation of the hot carrier problem.— Phys. Rev., 1967, 158, N 3, p. 798—804.
96. Budd H. Chambers solution of the boltzmann equation.— Phys. Rev., 1962, 127, N 1, p. 4.

97. *Budd H. F.* The generalized path variable method.— *J. Phys. Soc. Jap.*, 1963, 18, № 1, p. 142.
98. *Нормантас Э., Филипавичус В.* Зависимость электропроводности *p*-Ge в сильном магнитном поле от констант деформационного потенциала.— *ФТП*, 1973, 7, № 9, с. 1775—1780.
99. *Baraff G. A.* Distribution functions and ionisation rates for hot electrons in semiconductors.— *Phys. Rev.*, 1962, 128, N 6, p. 2507—2517.
100. *Rees H. D.* Calculation of distributions functions by exploiting the stability of the steady state.— *J. Phys. and Chem. Solids*, 1969, 30, N 3, p. 643—655.
101. *Rees H. D.* The numerical analysis of semiclassical transport problems.— *J. Phys. C. — Solid State Phys.*, 1970, 3, N 5, p. 965—972.
102. *Прайс П. Дж.* Теория «синхронного ансамбля» горячих электронов.— В кн.: Тр. IX Междунар. конф. по физике полупроводников. Л.: Наука, 1969, с. 797—801.
103. *Rees H. D.* Numerical solution of the boltzmann electron motion in solids.— *J. Phys. C — Solid State Phys.*, 1972, 5, N 6, p. 641—656.
104. *Келдыш Л. В.* К теории ударной ионизации в полупроводниках.— *ЖЭТФ*, 1965, 48, № 6, с. 1692—1707.
105. *Baraff G. A.* Maximum anisotropy approximation for calculation electron distribution, application to high field transport in semiconductors.— *Phys. Rev. A*, 1964, 133, N 1, p. 26—33.
106. *Давыдов Б.* К теории движения электронов в газах и полупроводниках.— *ЖЭТФ*, 1937, 7, № 9/10, с. 1069—1089.
107. *Фэн Г. И.* Валентные полупроводники германий — кремний.— *УФН*, 1958, 64, № 4, с. 733—779; *УФН*, 1958, 65, № 1, с. 111—132.
108. *Gunn I. B.* High Electric Field Effects in semiconductors.— In: *Progress in semiconductors*. London: Heywood, 1957, vol. 2, p. 211—248.
109. *Зеегер К.* Физика полупроводников.— М.: Мир, 1977— 616 с.
110. *Куреев П. С.* Физика полупроводников.— М.: Высш. школа, 1975.— 584 с.
111. *Орешкин П. Т.* Физика полупроводников и диэлектриков.— М.: Высш. школа, 1977.— 448 с.
112. *Ryder E. J.* Mobility of holes and electrons in high electric fields.— *Phys. Rev.*, 1953, 90, N 5, p. 766—769.
113. *Fröhlich H., Paranjape B. V.* Dielectric breakdown in solids.— *Proc. Phys. Soc. B*, 1953, 69, N 1, p. 21—32.
114. *Pines D.* Collective description of electron interactions: IV Electron interaction in metals.— *Phys. Rev.*, 1953, 92, N 3, p. 626—636.
115. *Reik H. G., Risken H.* Distribution functions for hot electrons in many-valley semiconductors.— *Phys. Rev.*, 1961, 124, N 3, p. 777—784.
116. *Гельмонт Б. Л., Лягушенко Р. И., Ясиевич И. И.* Функция распределения и потери энергии горячими электронами при взаимодействии с оптическими фононами.— *ФТТ*, 1972, 14, № 2, с. 533—542.
117. *Гуревич А. В.* Влияние соударений между электронами на их распределение по скоростям в газах и полупроводниках в электрическом поле.— *ЖЭТФ*, 1959, 37, № 1, с. 304—306.
118. *Kohler M.* Transport Erscheinungen in Electronengas.— *Z. Phys.*, 1949, 125, N 11/12, S. 679—692.
119. *Sondheimer E. H.* The theory of the transportphenomena in metalls.— *Proc. Roy. Soc. A*, 1950, 203, N 1, p. 75—98.
120. *Tauber G. E.* Transport phenomens in germanium and silicon.— *J. Phys. and Chem. Solids*, 1962, 23, N 1, p. 7—18.
121. *Шуфф Л.* Квантовая механика.— М.: Изд-во иностр. лит., 1957.— 475 с.
122. *Wilson A. H.* The theory of metal.— London: Cambridge univ. press, 1954.— 346 p.
123. *Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г.* Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда.— М.: Наука, 1975.— 400 с.

124. *Платцман Ф., Вольф П.* Волны и взаимодействия в плазме твердого тела.— М.: Мир, 1975.— 436 с.
125. *Чуенков В. А.* К теории электропроводности многодолинных полупроводников в сильном переменном электрическом поле.— ФТП, 1972, 6, № 8, с. 1413—1423.
126. *Parandjape B. V.* Behaviour of hot electrons in microwave fields.— Phys. Rev., 1961, 122, N 5, p. 1372—1375.
127. *Васько Ф. Т.* Нелинейное поглощение электромагнитной волны свободными носителями полупроводника.— ФТТ, 1974, 16, № 11, с. 3478—3480.
128. *Басс Ф. Г.* Кинетическая теория распространения сильных электромагнитных волн в полупроводниках и в плазме.— ЖЭТФ, 1964, 47, № 4, с. 1322—1341.
129. *Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г.* Нелинейная теория распространения электромагнитных волн в полупроводниках.— ЖЭТФ, 1966, 51, № 2, с. 536—555.
130. *Васько Ф. Т., Дыкман И. М.* Разогрев электронов сильным постоянным и высокочастотным электрическими полями.— ФТП, 1976, 10, № 5, с. 1012—1014.
131. *Jamashita J., Watanabe M.* On the conductivity of non-polar crystals in strong electric field.— Prog. Theor. Phys., 1954, 12, N 4, p. 443—453.
132. *Canali C., Jacobini C., Nava F., Ottaviani G., Alberigi-Quarante A.* Electron drift velocity in silicon.— Phys. Rev. B, 1975, 12, N 6, p. 2265—2284.
133. *Ashe M., Sarbei O. G.* Electron conductivity of hot carriers in silicon and Ge.— Phys. status solidi, 1969, 33, N 1, p. 9—57.
134. *Schmidt-Tiedeman K. J.* Symmetry properties of warm electron effects in cubic semiconductors.— Phys. Rev., 1961, 123, N 6, p. 1991—2000.
135. *Adawi I.* Variational treatment of warm electrons in nonpolar crystals.— Phys. Rev., 1960, 120, N 1, p. 118—127.
136. *Yamashita J.* Electron-electron interaction in hot electron problems.— Prog. Theor. Phys., 1960, 24, N 2, p. 357—369.
137. *Дыкман И. М., Томчук П. М.* Влияние электрического поля на температуру электронов и электропроводность.— ФТТ, 1962, 4, № 5, с. 1082—1094.
138. *Gunn J. B.* Effect of electron and impurity density of the field-dependence of mobility in germanium.— J. Phys. and Chem. Solids, 1959, 8, p. 239—241.
139. *Jager I.* Die Bedeutung der Electron-Electron Wechselwirkung in Halbleitern.— Phys. status solidi B, 1974, 61, N 2, S. 711—718.
140. *Sasaki W., Shibuya M.* Experimental evidence of the anisotropy of hot electrons in *n*-type germanium.— J. Phys. Soc. Jap., 1956, 11, N 11, p. 1202—1203.
141. *Sasaki W., Shibuya M., Mizuguchi K.* Anisotropy of hot electrons in *n*-type germanium.— J. Phys. Soc. Jap., 1958, 13, N 5, p. 456—460.
142. *Sasaki W., Shibuya M., Mizuguchi K., Hatoyama G. M.* Anisotropy of hot electrons in germanium.— J. Phys. and Chem. Solids, 1959, 8, p. 250—256.
143. *Shibuya M.* Hot electron problem in semiconductors with apheroidal energy surfaces.— Phys. Rev., 1955, 99, N 4, p. 1189—1191.
144. *Koenig S. H.* Inter-electron collisions and the «temperature» of hot electrons.— Proc. Phys. Soc., 1959, 73, N 474, p. 959—962.
145. *Paige E. G.* The Anisotropy of the conductivity of hot electrons and their temperature in germanium.— Proc. Phys. Soc., 1960, 75, N 2, p. 174—184.
146. *Reik H. G., Risken H., Figner G.* Theory of hot electrons in many valley semiconductors in the region of high electric field.— Phys. Rev. Lett., 1960, 9, N 9, p. 423—425.
147. *Koenig S. H., Nathan M. I., Paul W., Smith A. C.* Effects of high pressure on some electron phenomena in *n*-type germanium.— Phys. Rev. 1960, 118, N 5, p. 1217—1221.
148. *Shibuya M., Sasaki W.* Intervalley scattering of hot electrons.— J. Phys. Soc. Jap., 1960, 15, N 1, p. 207—208.

149. *Самойлович А. Г., Коренблит И. Я., Дазовский И. В., Искра В. Д.* Решение кинетического уравнения при анизотропном рассеянии электронов.— ФТТ, 1961, 3, № 10, с. 2939—2952.
150. *Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках* / Под ред. П. И. Баранского.— Киев : Наук. думка, 1977.— 181 с.
151. *Dienys V., Kancleros Z.* Influence of unfluence of uniaxial stress on the phenomenological energy relaxation time in *n*-type silicon.— *Phys. status solidi B*, 1975, 71, N 2, p. K209—K211.
152. *Appel J.* Electron-Electron scattering and transport phenomena in nonpolar semiconductors.— *Phys. Rev.*, 1961, 122, N 6, p. 1760—1772.
153. *Luong M., Shaw A. W.* Quantum transport theory of impurity scattering limited mobility in *n*-type semiconductors including electron scattering.— *Phys. Rev. B*, 1971, 4, N 8, p. 2436—2441.
154. *Devreese I. T., Evard R., Kartheuser E.* Note on the solution of the bolzman equation for electron-LO phonon scattering.— *Phys. status solidi B*, 1978, 90, N 1, p. K73—K76.
155. *Ahmad S., Daga O. P., Khokle W. S.* Energy and momentum loss rates for eletrons in silicon.— *Phys. status solidi*, 1970, 40, N 2, p. 631—638.
156. *Денис В., Канцлерис Ж. В.* Влияние электрон-электронного взаимодействия на время релаксации энергии в *n*-Si.— ФТП, 1974, 8, № 7, с. 1404—1406.
157. *Дыкман И. М., Томчук П. М.* Анизотропия проводимости горячих электронов и межэлектронное взаимодействие.— ФТТ, 1965, 7, № 1, с. 286—289.
- 157а. *Коган В. И.* О скорости выравнивания температур заряженных частиц в плазме.— В кн.: *Физика плазмы и проблемы управляемых термоядерных реакций*. М. : Изд-во АН СССР, 1958, т. 1, с. 130—137.
158. *Давыдов Б. И., Жебелев С. И.* К теории электропроводности теплых электронов в многодолинных полупроводниках.— ФТП, 1970. 4, № 7, с. 1293—1289.
- 158а. *Ashe M., Boichenko B. L., Bondar V. M., Sarbei O. G.* Influence of electron-electron scattering on the anisotropic conductivity at high electric fields in Si.— *Phys. status solidi B*, 1971, 44, N 1, p. 173—182.
159. *Яковлев В. А., Сытилина Н. Г.* О температурной зависимости анизотропной дрейфовой скорости горячих электронов в *n*-Ge.— ФТП, 1972, 6, № 6, с. 1022—1028.
160. *Григорьев Н. Н., Дыкман И. М., Томчук П. М.* Влияние электрон-электронного взаимодействия на возникновение отрицательной поперечной проводимости в *n*-Ge.— ФТП, 1974, 8, № 6, с. 1083—1089.
161. *Erlbach E.* New hot-electron negative resistance effect.— *Phys. Rev.*, 1963, 132, N 5, p. 1976—1979.
162. *Грибников З. С., Кочелан В. А., Митин В. В.* Многозначный эффект Сасаки в многодолинных полупроводниках.— ЖЭТФ, 1970, 59, № 5, с. 1828—1845.
163. *Астров Ю. А., Кастальский А. А.* Абсолютное отрицательное сопротивление в чистом *n*-Ge (эффект Эрлбаха).— ФТП, 1972, 6, № 2, с. 323—328.
164. *Hammar C.* Transverse negative resistance in *n*-type germanium.— *Phys. Rev. B*, 1971, 4, N 8, p. 2560—2566.
165. *Gaylord T. K., Rabson T. A.* On the possibility of transverse negative differential conductivity in semiconductors.— *Phys. Lett. A*, 1972, 38, N 7, p. 493—494.
166. *Matz D.* Effects of nonparabolicity of non-ohmic transport in InSb and InAs.— *Phys. Rev.*, 1968, 168, N 3, p. 843—849.
167. *Facett W., Boardman A. D., Swan S.* Monte-Carlo determination of electron transport properties in GaAs.— *J. Phys. and Chem. Solids*, 1970, 31, N 9, p. 1963—1990.
168. *Dykman I. M., Rosenbaum V. M., Vasko F. T.* Hot electron in semiconductors with quasi—relativistic band structure.— *Phys. status solidi B*, 1978, 88, N 2, p. 385—395.

169. *Holzhütter H. G., Mocker M.* Generalized boltzmann equation with field-dependent collision terms inclusive of interband transitions.—Phys. status solidi B, 1977, 81, N 1, p. 139—146.
170. *Энштейн Э. М.* Воздействие сильной электромагнитной волны на электронные свойства полупроводников.—Радиофизика, 1975, 18, № 6, с. 785—811.
171. *Васько Ф. Т.* Фотопроводимость при рассеянии с испусканием оптических фононов.—ФТТ, 1977, 19, № 3, с. 915—916.
172. *Krancer D., Gornik E.* Influence of the deformation potential on the mobility in *n*-type InSb.—Solid State Commun, 1971, 9, N 18, p. 1541—1544.
173. *Rode D. L.* Electron transport in InSb, InAs and InP.—Phys. Rev. B, 1971, 3, N 10, p. 3287—3299.
174. *Ehrenreich H.* Electron scattering in InSb.—J. Phys. and Chem. Solids, 1957, 2, p. 131—149.
175. *Haga E., Kimura H.* Free-carrier infrared absorption and determination of deformation potential constant.—J. Phys. Soc. Jap., 1963, 18, N 6, p. 777—793.
176. *Jensen B.* Theory of free carrier absorption in InSb.—Solid State Commun, 1971, 9, N 18, p. 1587—1589.
177. *Hilsum C.* Hot electrons in compound semiconductors.—In: Proc. II Intern. conference in the physics of semiconductors. Warszawa: PWN, 1972, p. 585—601.
178. *Fröhlich E.* Theory of electrical breakdown in ionic crystals.—Proc. Roy. Soc. A, 1937, 160, N 901, p. 320—241.
179. *Давыдов Б., Шмушкевич И.* Электропроводность полупроводников с ионной решеткой в сильных полях.—ЖЭТФ, 1940, 10, № 9, с. 1043—1055.
180. *Fletcher K., Butcher P. N.* An exact solution in the linearized boltzmann equation with applications to the hall mobility and hall factor of *n*-GaAs.—J. Phys. C — Solid State Phys., 1972, 5, N 2, p. 212—224.
181. *Hattori M., Sato H.* Note on the field dependence of the mobility in semiconductors.—J. Phys. Soc. Jap., 1960, 15, N 7, p. 1237—1242.
182. *Blood P., Orton J. W.* The electrical characterisation of semiconductors.—Repts. Prog. Phys., 1978, 41, N 2, p. 157—257.
183. *Howard D. I., Sondheimer E. H.* The theory of electronic conduction in polar semiconductors.—Proc. Roy. Soc. A, 1953, 219, N 1136, p. 53—74.
184. *Дыкман И. М., Томчук П. М.* Электропроводность полярных полупроводников при учете межэлектронного взаимодействия.—ФТТ, 1962, 4, № 12, с. 3551—3563.
185. *Stratton R.* The influence of interelectronic collisions on conduction and breakdown in polar crystals.—Proc. Roy. Soc. A, 1958, 246, N 1246, p. 406—422.
186. *Kanai J.* The change of electron mobility in indium antimonide at low electric field.—J. Phys. Soc. Jap., 1960, 15, N 5, p. 830—835.
187. *Matz D., Garcia-Moliner F.* Warm-carrier resistivity in impure *n*-InSb in a magnetic field.—Phys. status solidi, 1964, 7, N 1, p. 205—222.
188. *Komissarov V. S.* Calculation of hot-electron mobility and electron temperature in *n*-type InSb under Assumption of maxwellian distribution.—Phys. status solidi B, 1976, 76, N 1, p. 105—112.
189. *Kahlert H., Bauer G.* Hot electron-phonon interaction in the non-parabolic conduction band of degenerate InSb at 4,2° K.—Phys. Rev. B, 1973, 7, N 6, p. 2670—2682.
190. *Peterson R. L., Magnusson B., Weissglas P.* Magnetophonon resonances in polar semiconductors.—Phys. status solidi B, 1971, 46, N 2, p. 729—734.
191. *Григорьев Н. Н., Дыкман И. М., Томчук П. М.* Температура и подвижность горячих электронов в полярных полупроводниках.—ФТТ, 1965, 7, № 11, с. 3378—3385.
192. *Bok J., Cuthmann C.* Effects des hauts champs électriques sur les phénomènes de transport dans InSb à basse température.—Phys. status solidi, 1964, 6, N 3, p. 853—862.

193. *Mats D., Galcia-Moliner.* Non-omic transport in semiconductors in a magnetic field.— *Phys. status solidi*, 1964, 5, N 3, p. 495—509.
194. *Галаванов В. В., Наследов Д. Н., Филиппенко А. С.* Исследование механизма рассеяния электронов в чистых и легированных кристаллах.— *ФТТ*, 1964, 6, № 9, с. 2683—2688.
195. *Галаванов В. В., Наследов Д. Н., Филиппенко А. С.* Подвижность электронов в InSb при смешанном механизме рассеяния.— *ФТТ*, 1964, 6, № 11, с. 3471—3473.
196. *Григорьев Н. Н., Дыкман И. М., Томчук П. М.* Функция распределения и температурная зависимость подвижности в полупроводниках $A_{III}B_V$.— *ФТТ*, 1968, 10, № 4, с. 1058—1064.
197. *Kinch M. A.* Scattering mechanism in indium antimonide at low temperatures.— *Brit. Appl. Phys.*, 1966, 17, N 10, p. 1257—1267.
198. *Krancer D.* High frequency conductivity of polar semiconductors.— *Phys. status solidi B*, 1971, 46, N 2, p. 591—596.
199. *Olven F. W.* Numerical solution of the second order linear difference equation.— *Mat. and Math. Phys. B*, 1967, 71, N 1, p. 111—119.
200. *Дыкман И. М., Томчук П. М.* Функция распределения и подвижность электронов в полярных полупроводниках при непараболическом законе дисперсии.— *ФТТ*, 1966, 8, № 5, с. 1343—1350.
201. *Айзенштадт В. С., Крылов В. И., Метальский А. С.* Таблицы для вычисленного преобразования Лапласа.— Минск : Изд-во АН БССР, 1962.— 337 с.
202. *Harris J. J., Ridley B. K.* Hot electrons in nonparabolic bands with acoustic and polar optical phonon scattering.— *J. Phys. and Chem. Solids*, 1973, 34, N 2, p. 197—207.
203. *Mathur P. C., Sham R., Jain S.* Transport phenomena in III—V compound semiconductors.— *Phys. status solidi A*, 1978, 50, N 1, p. 11—40.
204. *Матуленис А., Пожела Ю., Реклайтис А.* Динамика разогрева электронов в непараболической зоне полярных полупроводников.— *ФТП*, 1976, 10, № 2, с. 280—285.
205. *Prior A. C.* Avalanche multiplication and electron mobility in indium antimonide at high electric fields.— *J. Electr. Contr.*, 1958, 4, N 2, p. 165—169.
206. *Morisaki H., Inuishi Y.* Transport phenomena in indium antimonide at higher electric field.— *J. Phys. Soc. Jap.*, 1965, 20, N 10, p. 1814—1821.
207. *Григорьев Н. Н., Дыкман И. М., Томчук П. М.* Влияние электрического поля на магнетосопротивление и эффект Холла в полярных полупроводниках.— *ФТП*, 1967, 1, № 1, с. 132—135.
208. *Келдыш Л. В.* О влиянии сильного электрического поля на оптические характеристики непроводящих кристаллов.— *ЖЭТФ*, 1958, 34, № 5, с. 1138—1141.
209. *Franz W.* Einfluss eines elektrischen Feldes auf eine optische Absorptionkante.— *ZS f. Naturforsch.*, 1958, 13a, N 6, S. 484—489.
210. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика.— М. : Наука, 1974.— 752 с.
211. *Bardeen J., Blatt F. J., Hall L. H.* Indirect transitions from the valence to the conduction bands.— In: *Photoconductivity conference*. New York : Wiley, 1956, p. 146—154.
212. *Мосс Т., Барелл Г., Эллис Б.* Полупроводниковая оптоэлектроника.— М. : Мир, 1976.— 431 с.
213. *Keldys L. V., Vaviliv V. C., Bricin K. I.* The influence of a strong electric field on the optical properties of semiconductors.— In: *Proc. V. Intern. conference on semiconductors*.— Prague : CAS, 1961, p. 824—828.
214. *Буляница Д. С.* Влияние внешнего электрического поля на форму края полосы собственного поглощения непроводящих кристаллов.— *ЖЭТФ*, 1960, 38, № 4, с. 1201—1204.
215. *Callaway J.* Optical absorptions in an electric field.— *Phys. Rev.*, 1963, 130, N 2, p. 549—553.

216. *Thamalingam K.* Optical absorption in the presence of a uniform field.— *Phys. Rev.*, 1963, 130, N 6, p. 2204—2206.
217. *Джонсон Б.* Поглощение вблизи края фундаментальной полосы.— В кн.: *Оптические свойства полупроводников*. М.: Мир, 1970, с. 166—277.
218. *Callaway J.* Optical absorption in an electric field.— *Phys. Rev. A*, 1964, 134, N 4, p. 998—1009.
219. *Пантел Р., Путхоф Т.* Основы квантовой электроники.— М.: Мир, 1972.— 384 с.
220. *Бертен Ф.* Основы квантовой электроники.— М.: Мир, 1971.— 629 с.
221. *Волновые и флуктуационные процессы в лазерах* / С. Г. Зейгер, Ю. Л. Климонтович, П. С. Ланда, Е. Г. Ларионцев.— М.: Наука, 1974.— 415 с.
222. *Кадомцев Б. Б.* Коллективные явления в плазме.— М.: Наука, 1976.— 238 с.
223. Квантовая электроника.— М., 1976.— Т. 3. № 4.
224. Известия вузов СССР. Радиофизика.— Горький, 1976.— Т. 19, № 5/6.
225. *Скотт Э.* Волны в активных и нелинейных средах в приложении к электронике.— М.: Сов. радио, 1977.— 368 с.
226. *Нелинейные волны* / Под ред. С. Лейбовича, А. Сибасса.— М.: Мир, 1977.— 319 с.
227. *Мосс Т. С., Барелл Г. Дж., Хезерингтон Э.* Измерение френелевского увлечения, обусловленного движением электронов в полупроводнике.— В кн.: *Тр. IX Междунар. конф. по физике полупроводников*. Л.: Наука, 1969, с. 213—218.
228. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика.— М.: Наука, 1976.— 584 с.
229. *Кубо Р.* Статистическая механика.— М.: Мир, 1967.— 452 с.
230. *Дыкман И. М., Томчук П. М.* Влияние электрического поля и закона дисперсии энергии на плазменные колебания в полупроводниках.— *ЖЭТФ*, 1968, 54, № 2, с. 592—601.
231. *Алмазов Л. А., Васько Ф. Т., Дыкман И. М.* Влияние дрейфа носителей на распространение электромагнитных волн в твердотельной плазме.— *Письмо в ЖЭТФ*, 1972, 16, № 5, с. 305—307.
232. *Гинзбург В. Л.* Распространение электромагнитных волн в плазме.— М.: Наука, 1967.— 683 с.
233. *Васько Ф. Т.* Электрооптический эффект, обусловленный виртуальными межзонными переходами.— *ФТТ*, 1972, 14, № 12, с. 3680—3682.
234. *Алмазов Л. А.* Зависимость показателя преломления полупроводника от направления дрейфа носителей тока.— *ФТП*, 1975, 9, № 4, с. 657—664.
235. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика.— М.: Наука, 1971.— 415 с.
236. *Привалов В. Е., Фридрихов С. А.* Кольцевой газовый лазер.— *УФН*, 1969, 97, № 3, с. 377—402.
237. *Kaw R. K., Dubey P. K., Chakravarti A. K.* Hot electron anisotropy of microwave conductivity in nonparabolic semiconductors.— *J. Appl. Phys.*, 1970, 41, N 7, p. 3102—3107.
238. *Huber F., Kopetz H.* Anisotropy of the microwave conductivity in polar semiconductors.— *J. Appl. Phys.*, 1970, 41, N 7, p. 3134—3139.
239. *Richter K., Bonek E.* On the anisotropic microwave conductivity in the hot electron region of *n*-InSb.— *Phys. status solidi*, 1969, 31, N 2, p. 579—588.
240. *Kolodziejczek J., Kierzek-Pecold E.* Free carrier electro-magneto-optical phenomena in semiconductors.— *Phys. status solidi*, 1967, 19, N 2, p. 623—639.
241. *Tripathi V. K.* Hot electron helicon mode conversion in a semiconductors.— *J. Phys. D — Appl. Phys.*, 1970, 3, N 9, p. 1363—1366.
242. *Bonek E., Potzl H. W., Richter K.* High-frequency behavior of hot electrons in one-valley polar semiconductors.— *J. Phys. and Chem. Solids*, 1970, 31, N 5, p. 1151—1161.

243. Дыкман И. М., Толпыго Е. И. Анизотропия микроволновой проводимости и поглощения в полупроводниках с горячими носителями.— ФТТ, 1965, 7, № 7, с. 2237—2239.
244. Гершензон Е. М., Гуревич Ю. А., Литвак-Горская Л. Б. Анизотропное поглощение электромагнитных волн горячими носителями в полупроводниках.— ФТТ, 1965, 7, № 5, с. 1378—1381.
245. Löschner H., Zimmerl O., Frank K. et al. Hot electron absorption of millimeter and submillimeter waves in *n*-InSb.— In: Proc. of II Intern. conference on the physics of semiconductors. Warszawa : PWN, 1972, p. 630—637.
246. Banys T., Paršeliūnas J., Pozela J. Hot Electrons in *n*-Type GaAs at Microwave High Electric Fields.— In: Proc. of II Intern. conference of the physics semiconductors. Warszawa : PWN, 1972, p. 639—643.
247. Kagan M. S., Kalashnikov S. G., Zhdanova N. G. et al. Ac conductivity of semiconductors with hot electrons.— In: Proc. of 12 th Intern. conference of the physics of semiconductors. Stuttgart : Teubner, 1974, p. 829—833.
248. Almasov L. A., Dykman I. M. High-frequency conductivity of hot carriers in semiconductors with non-parabolic dispersion law of energy.— Phys. status solidi B, 1971, 48, N 2, p. 563—570.
249. Аскеров Б. М. Кинетические эффекты в полупроводниках.— М. : Наука, 1970.— 303 с.
250. Almasov L. A. High-frequency conductivity of hot carriers in semiconductors with non-parabolic dispersion law in the presence of a magnetic field.— Phys. status solidi B, 1972, 54, N 1, p. 87—97.
251. Вуд Р. Физическая оптика.— М. ; Л. : ОНТИ, 1936.— 895 с.
252. Волькенштейн М. В. Молекулярная оптика — М. ; Л. : Гостехтеориздат, 1951.— 744 с.
253. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.— М. : Гостехиздат, 1957.— 532 с.
254. Воробьев Л. Е., Стафеев В. И., Ушаков А. Ю., Штурбин А. В. Исследование оптических свойств горячих носителей тока в полупроводниках.— В кн.: Тр. IX Междунар. конф. по физике полупроводников. Л. : Наука, 1969, с. 809—814.
255. Воробьев Л. Е., Комиссаров В. С., Стафеев В. И., Ушаков А. Ю. Электрооптический эффект на горячих электронах в *n*-InSb.— Письма в ЖЭТФ, 1971, 13, № 3, с. 140—142.
256. Sodha M. S., Kamal J., Dubey P. K. High field transport phenomena in *n*-InSb at high temperatures.— J. Phys. Soc. Jap., 1970, 28, N 6, p. 1461—1468.
- 256a. Dubey P. K., Chakravarti A. K. Transport phenomena in nonparabolic semiconductors at high electric fields.— Phys. status solidi B, 1971, 43, N 1, p. 89—100.
257. Almasov L. A., Dykman I. M. Hot electron kerr effect in semiconductors with non-parabolic dispersion law of energy.— Phys. status solidi B, 1972, 51, N 2 p. 751—759.
258. Рабинович Р. И. О гальваномагнитных эффектах при рассеянии энергии горячих электронов на оптических фононах.— ФТП, 1969, 3, № 7, с. 996—1004.
259. Альбер Я. И., Андронов А. А., Валов В. А. Инвертированные состояния горячих электронов и отрицательная проводимость в полупроводниках.— ЖЭТФ, 1977, 82, № 3, с. 1030—1050.
260. Vernon R. J., Newman H., Chan V. The Faraday-type microwave Kerr effect in tellurium.— J. Phys. and Chem. Solids, 1978, 39, N 11, p. 1181—1188.
261. Борн М. Оптика.— Харьков; Киев : Гостехиздат Украины, 1937.— 749 с.
262. Piller H. Faraday rotation.— In: Semiconductors and semimetals. New York ; London : Acad. press, 1972, vol. 8, p. 103—179.
263. Субашиев А. В. Эффект Фарадея на горячих электронах.— ФТТ, 1965, 7, № 3, с. 936—938.

264. Гуляев Ю. В. Эффект Фарадея на горячих электронах.— Письма в ЖЭТФ 1965, 1, № 3, с. 11—15.
265. Воробьев Л. Е., Смирнов В. И., Солтанов У. Б. и др. Влияние сильного электрического поля на эффект Фарадея в сурьмянистом индии.— ФТП, 1967, 1, № 1, с. 145—146.
266. Palic E. D., Furdyna J. K. Infrared and microwave magnetoplasma effect in semiconductors.— Rep. Prog. Phys., 1970, 33, N 12, p. 1193—1322.
267. Asche M. On the faraday effect of hot electrons in many-valley semiconductors.— Phys. status solidi, 1970, 41, N 1, p. 67—73.
268. Gupta B. M. Faraday ellipticity of hot electrons in many-valley semiconductors.— Phys status solidi, 1970, 37, N 1, p. 115—118.
269. Heinrich H. Hot electron transfer in gallium antimonide from infrared faraday effect.— Phys. Rev. B, 1971, 3, N 2, p. 416—420.
270. Chakravarti A. K., Dubey P. K. Hot electron faraday effect in nonparabolic semiconductors.— J. Phys. and Chem. Solids, 1971, 32, N 4, p. 905—912.
271. Потапов В. П., Трифонов В. И., Яременко Н. Г. Эффект Фарадея в n -InSb в миллиметровом диапазоне длины волн при температуре $4,5^\circ$ К.— ФТП, 1971, 5, № 8, с. 1646—1648.
272. Vorobev L. E., Komissarov V. S., Stafeev V. I. Faraday and kerr effects of hot electrons in n -type InSb in the infrated.— Phys. status solidi B, 1972, 52, N 1, p. 25—37.
273. Vorobev L. E., Komissarov V. S., Stafeev V. I. Faraday effect of hot electrons in degenerate n -type InSb in the infared.— Phys. status solidi B, 1972, 54, N 1, p. K61—K64.
274. Srivastava G. P., Mehra R. M. Microwave Faraday rotation in p -type germanium.— Phys. status solidi B, 1974, 66, N 2, p. K47—K51.
275. Mezdorf J., Kessler F. R. Interband Faraday rotation and ellipticity in silicon measured by polarization modulation.— Phys. status solidi B, 1975, 71, N 1, p. 237—244.
276. Запасский В. С. Нечетные магнитооптические эффекты в кубических кристаллах в геометрии Фохта.— ФТТ, 1977, 19, № 4, с. 964—969.
277. Березиков Д. Д., Вильямс П. П., Попов А. А., Панин Е. П. Исследование взаимодействия электромагнитных волн с горячими электронами в сильных магнитных полях и конфигурации Фохта в n -Ge.— ФТП, 1977, 11, № 1, с. 204—206.
278. Almasov L. A. Hot electron Faraday rotation and birefringence in semiconductors with non-parabolic energy bands.— Phys. status solidi B, 1973, 58, N 2, p. 821—830.
279. Цернике Ф., Мидвинтер Дж. Прикладная нелинейная оптика.— М.: Мир, 1976.— 261 с.
280. Jha S., Bloembergen N. Nonlinear optical susceptibility in group IV and III—V semiconductors.— Phys. Rev., 1968, 171, N 3, p. 891—898.
281. Rustagi K. S. Effect of carrier scattering on nonlinear optical susceptibility due to mobile carriers in InSb, InAs and GaAs.— Phys. Rev. B, 1970, 2, N 10, p. 4053—4061.
282. Wynne J. J. Dispersion of the nonlinear optical susceptibility in n -InSb in a magnetic field.— Phys. Rev. B, 1972, 6, N 2, p. 534—545.
283. Jablonowitch E., Bloembergen M., Wynne J. J. Dispersion of the non-linear optical suceptibility in n -InSb.— Phys. Rev. B, 1971, 3, N 6, p. 2060—2062.
284. Алмазов Л. А., Дыкман И. М. Нелинейная оптическая восприимчивость полупроводников с нестандартным законом дисперсии энергии при наличии магнитного поля.— ФТП, 1974, 8, № 8, с. 1436—1441.
285. Wolf R. A., Pearson G. A. Theory of optical mixing by mobile carriers in semiconductors.— Phys. Rev. Lett., 1966, 17, N 19, p. 1015—1017.
286. Ван-дер-Зил А. Флуктуационные явления в полупроводниках.— М.: Изд-во иностр. лит., 1961.— 239 с.

287. Мак-Уортер А. Шумы $1/f$ — типа и свойства поверхности германия.— В кн.: Физика поверхности полупроводников.— М.: Изд-во иностр. лит., 1959, с. 263—289.
288. Hooge F. N. $1/f$ Noise is no surface effect.— Phys. Lett. A, 1969, 29, N 3, p. 139—140.
289. Hooge F. N. Discussion of recent experiments of $1/f$ noise.— Physica, 1972, 60, N 1, p. 130—144.
290. Clarke I., Voss R. F. $1/f$ Noise from thermal fluctuations in metal films.— Phys. Rev. Lett., 1974, 33, N 1, p. 24—27.
291. Voss R. F., Clarke I. $1/f$ noise from system in thermal equilibrium.— Phys. Rev. Lett., 1976, 36, N 1, p. 42—45.
292. Voss R. F., Clarke I. Flicker $1/f$ noise: equilibrium temperature and resistance fluctuations.— Phys. Rev. B, 1976, 13, N 2, p. 556—573.
293. Putterman S. Mode-coupled fluctuations and $1/f$ noise.— Phys. Rev. Lett., 1977, 39, N 10, p. 585—587.
294. Sato H. Theory of temperature fluctuations and $1/f$ noise.— J. Phys. Soc. Jap., 1978, 44, N 1, p. 49—53.
295. Agu M. A nonstationary time-series having $1/f$ -type power spectrum.— J. Phys. Soc. Jap., 1976, 40, N 5, p. 1510—1511.
296. Brophy J. J. Statistics of $1/f$ noise.— Phys. Rev., 1968, 166, N 3, p. 827—831.
297. Brophy J. J. Zero-crossing statistics of $1/f$ noise.— J. Appl. Phys., 1969, 40, N 2, p. 567—569.
298. Greenstein L. I., Brophy J. J. Influence of lower cutoff frequency on the measured variance of $1/f$ noise.— J. Appl. Phys., 1969, 40, N 2, p. 682—685.
299. Brophy J. J. Variance fluctuations in flicker noise and current noise.— J. Appl. Phys., 1969, 40, N 9, p. 3551—3553.
300. Коган Ш. М. Новые экспериментальные исследования механизма $1/f$.— УФН, 1977, 123, № 1, с. 131—136.
301. Рытов С. М. Введение в статистическую радиофизику.— М.: Наука, 1976.— Ч. 1. 494 с.
302. Landau L. Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik.— ZS f. Phys., 1927, 45, N 5/6, S. 430—441.
303. Фон Нейман И. Математические основы квантовой механики.— М.: Изд-во иностр. лит., 1964.— 367 с.
304. Wigner E. On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium.— Phys. Rev., 1932, 40, N 5, p. 749—759.
305. Fluctuations phenomena in solids / Ed. R. E. Burgess.— New.-York: Acad. press, 1965.— 389 p.
306. Коган Ш. М., Шульман А. Н. К теории флуктуаций в неравновесном электронном газе.— ЖЭТФ, 1969, 56, № 3, с. 862—876.
307. Коган Ш. М., Шульман А. Я. Электрические флуктуации в плазме твердого тела в сильном электрическом поле.— ФТТ, 1967, 9, № 8, с. 2259—2264.
308. Ганцевич С. В., Гуревич В. Л., Катилус Р. Флуктуации в полупроводниках в сильном электрическом поле и рассеяние света горячими электронами.— ЖЭТФ, 1969, 57, № 8, с. 503—519.
309. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика.— М.: Наука, 1978.— Ч. 2. 448 с.
310. Левин М. П., Рытов С. М. Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике.— М.: Наука, 1967.— 308 с.
311. Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И. Введение в статистическую радиофизику.— М.: Наука, 1978.— Ч. 2. 463 с.
312. Электродинамика плазмы / Под ред. А. И. Ахиезера.— М.: Наука, 1974.— 719 с.
313. Nyquist H. Thermal agitation of electric charge in conductors.— Phys. Rev., 1928, 32, N 1, p. 110—113.
314. Callen H. B., Walton T. A. Irreversibility and generalised noise.— Phys. Rev., 1951, 83, N 1, p. 34—40.

315. Кубо Р. Статистическая механика необратимых процессов.— В кн.: Вопросы квантовой теории необратимых процессов. М.: Изд-во иностр. лит., 1961, с. 39—72.
316. Кубо Р., Иокота М., Накажима С. Статистическая механика необратимых процессов. II.— В кн.: Вопросы квантовой теории необратимых процессов. М.: Изд-во иностр. лит., 1961, с. 73—88.
317. Кадомцев Б. Б. О флуктуациях в газе.— ЖЭТФ, 1957, 32, № 4, с. 943—945.
318. Жигулев В. Н. К теории упорядоченных статистических систем.— Докл. АН СССР, 1965, 161, № 5, с. 1051—1054.
319. Климонтович Ю. Л. О неравновесных флуктуациях в газе.— ТМФ, 1971, 9, № 1, с. 109—123.
320. Коган Ш. М. К теории флуктуаций в неравновесном газе с парными столкновениями.— ТМФ, 1972, 10, № 1, с. 143—149.
321. Ганцевич С. В., Гуревич В. Л., Катилус Р. О флуктуациях в неравновесном стационарном состоянии.— ЖЭТФ, 1970, 59, № 8, с. 533—541.
322. Коган В. Д. Флуктуации в системе заряженных частиц.— ФТТ, 1975, 17, № 7, с. 1969—1977.
323. Садовников Б. И. Асимптотика классических функций Грина в «вязком гидродинамическом приближении».— Докл. АН СССР, 1965, 164, № 5, с. 1024—1027.
324. Ганцевич С. В., Гуревич В. Л., Катилус Р. Флуктуации тока в полупроводнике в сильном электрическом поле.— ФТТ, 1969, 11, № 2, с. 308—315.
325. Шульман А. Я., Коган Ш. М. К теории флуктуаций в неравновесном электрическом газе.— ЖЭТФ, 1969, 57, № 12, с. 2112—2119.
326. Коган Ш. М., Шульман А. Я. Сторонние случайные силы и уравнения для корреляционных функций в теории неравновесных флуктуаций.— ФТТ, 1970, 12, № 4, с. 1119—1123.
327. Lax M. Fluctuations from the nonequilibrium steady state.— Rev. Mod. Phys., 1960, 32, N 1, p. 25—64.
328. Lax M. Classical noise IV: langevin methods.— Rev. Mod. Phys., 1966, 38, N 3, p. 541—566.
329. Томчук П. М., Чумак А. А. Квантовое кинетическое уравнение для флуктуаций в неравновесных электрон-фоонных системах.— ФТТ, 1973, 15, № 4, с. 1011—1018.
330. Томчук П. М., Чумак А. А. Неравновесные флуктуации в газе с парными столкновениями.— Докл. АН УССР. Сер. А, 1975, 10, с. 931—935.
331. Томчук П. М., Чумак А. А. Флуктуации в электрон-фоонных системах при наличии сильных электрических и магнитных полей.— УФЖ, 1973, 18, № 11, с. 1822—1831.
332. Рожков С. С., Томчук П. М. Флуктуации тока в полупроводниках в квантующем электрическом поле.— ЖЭТФ, 1977, 72, № 1, с. 248—256.
333. Климонтович Ю. Л. Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы.— М.: Наука, 1975.— 352 с.
334. Ситенко А. Г. Флуктуации и нелинейное взаимодействие волн в плазме.— Киев: Наук. думка, 1977.— 248 с.
335. Фудзита С. Введение в неравновесную квантовую статистическую механику.— М.: Мир, 1969.— 207 с.
336. Давыдов А. С. Теория твердого тела.— М.: Наука, 1976.— 639 с.
337. Гуров К. П. Основы кинетической теории.— М.: Наука, 1966.— 351 с.
338. Силин В. П. Об интервале столкновений для заряженных частиц.— ЖЭТФ, 1961, 40, № 6, с. 1768—1774.
339. Lenard A. On bogoliubov's equation for a spatially homogeneous plasma.— Ann. Phys., 1960, 10, N 3, p. 390—400.
340. Тарасенко А. А., Чумак А. А. Неравновесные флуктуации электронов и фоонов в полупроводниках.— ЖЭТФ, 1977, 72, № 8, с. 625—631.
341. Гуревич В. Л., Катилус Р. К теории горячих электронов в горячих полупроводниках.— ЖЭТФ, 1965, 49, № 10, с. 1145—1156.

342. Шульман А. Я. Корреляционные функции неравновесных флуктуаций в полупроводниках в приближении электронной температуры.— ФТТ, 1970, 12, № 4, с. 1181—1186.
343. Томчук П. М., Чумак А. А. Влияние межэлектронного взаимодействия на неравновесные шумы в многодолинных полупроводниках.— ФТП, 1975, 9, № 9, 1668—1673.
344. Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статической механике.— М.: Мир, 1965.— 307 с.
345. Gantsevich S. V., Gurevich V. L., Katilius R. Diffusion near nonequilibrium steady state.— Phys. Condens. Matter, 1974, 18, N 1, p. 165—178.
346. Томчук П. М., Шендеровский В. А. Рассеяние и трансформация волн на флуктуациях в неравновесной плазме полупроводника с анизотропной энергетической зоной.— ЖЭТФ, 1972, 62, № 3, с. 1131—1143.
347. Tomchuk P. M., Shenderowskii V. A. Wave scattering processes on fluctuations in non-equilibrium semiconductor plasmas with isotropic non-parabolic dispersion law of carrier energy.— Phys. status solidi B, 1974, 63, N 2, p. 709—718.
348. Ганцевич С. В., Катилиус Р., Устимов Н. Г. Рассеяние света неравновесными свободными носителями в полупроводниках.— ФТТ, 1974, 16, № 4, с. 1106—1113.
349. Bely V. V., Klimontovich Yu. L. Low-frequency nonequilibrium fluctuations in electron-phonon system.— Physica, 1974, 73, N 2, p. 327—340.
350. Томчук П. М., Чумак А. А., Щедрин А. И. Влияние магнитного поля на амбиполярный дрейфовый шум в полупроводниках.— ФТП, 1976, 10, № 4, с. 716—719.
351. Тарасенко А. А., Томчук П. М., Чумак А. А. Флуктуации в анизотропных полупроводниках, связанные с дрейфом носителей.— ФТП, 1976, 10, № 9, с. 1520—1523.
352. Томчук П. М., Шендеровский В. А. Флуктуации в неравновесной полупроводниковой плазме.— УФЖ, 1970, 14, № 6, с. 901—906.

Предисловие	5
ГЛАВА 1.	
ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛЕ	7
§ 1. Основные уравнения. Одноэлектронное приближение	7
§ 2. Обратная решетка	14
§ 3. Зонная структура энергии электрона	18
§ 4. Импульс и скорость зонного электрона. Метод эффективной массы	27
§ 5. Зонная структура некоторых полупроводников	36
ГЛАВА 2.	
МЕХАНИЗМЫ РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ	57
§ 1. Кинетическое уравнение	57
§ 2. Интегралы столкновений	64
§ 3. Рассеяние на кулоновских и нейтральных центрах	72
§ 4. Разложение интегралов столкновений по сферическим функциям. Времена релаксации	80
ГЛАВА 3.	
ГОРЯЧИЕ ЭЛЕКТРОНЫ В АТОМАРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ	
§ 1. Явления переноса и нагрев электронов полем	92
§ 2. Кинетическое уравнение и диффузионное приближение	95
§ 3. Недиффузионное приближение	100
§ 4. Решение уравнения Больцмана при взаимодействии электронов с акустическими фононами	103
§ 5. Кулоновские механизмы рассеяния	107
§ 6. Приближение электронной температуры	109
§ 7. Учет оптических фононов	115
§ 8. Вариационный принцип	121
§ 9. Электропроводность атомарных полупроводников	127
§ 10. Разогрев электронов постоянным и высокочастотным полем	134
ГЛАВА 4.	
МНОГОДОЛИННЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ	139
§ 1. Анизотропия проводимости	139
§ 2. Эффект Сасаки	142
§ 3. Вариационный принцип при анизотропном рассеянии	147
§ 4. Примесное рассеяние	151
§ 5. Межэлектронное рассеяние	158

§ 6. Рассеяние носителей на акустических фононах	162
§ 7. Смешанный механизм рассеяния	169
§ 8. Междолинное рассеяние	172
§ 9. Электропроводность многодолинных полупроводников	175
§ 10. Приближение электронной температуры в многодолинных полупроводниках	177
§ 11. Влияние межэлектронного взаимодействия на возникновение отрицательной поперечной проводимости	186

ГЛАВА 5.

ПОЛЯРНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ	193
§ 1. Взаимодействие электронов с колебаниями решетки	193
§ 2. Электропроводность полярных полупроводников в слабом поле	197
§ 3. Влияние непараболичности энергии на функцию распределения и подвижность	209
§ 4. Полевая зависимость электронной температуры и проводимости полупроводников с непараболическим законом дисперсии	215
§ 5. Эффект Холла и магнетосопротивление горячих электронов	222
§ 6. Зависимость показателя преломления от направления дрейфа носителей	228

ГЛАВА 6.

ФЛУКТУАЦИИ И МЕТОДЫ ИХ ОПИСАНИЯ	240
§ 1. Основные понятия	240
§ 2. Корреляционные функции	242
§ 3. Матрица плотности (статистический оператор)	245
§ 4. Флуктуационно-диссипативная теорема	249
§ 5. Флуктуации в неравновесных системах	255
§ 6. Постановка задачи	256
§ 7. Уравнения движения	263
§ 8. Корреляторы сторонних потоков	272
§ 9. Флуктуации в системе с межчастичным взаимодействием	273
§ 10. Неравновесные флуктуации в газе с кулоновским взаимодействием	276
§ 11. Флуктуации фононной функции распределения	285
§ 12. Конвективный шум в условиях разогрева длинноволновых фононов	292
§ 13. Гидродинамическое описание неравновесных флуктуаций	296
Список литературы	304

Исаак Маркович Дыкман
Петр Михайлович Томчук

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА И ФЛУКТУАЦИИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Утверждено к печати ученым советом Института физики АН УССР

Редактор Т. С. Мельник. Редактор-библиограф С. Г. Даневич. Оформление художника Д. Д. Грибова. Художественный редактор И. П. Антолюк. Технический редактор Б. М. Кричевская. Корректоры Л. М. Тищенко, Р. С. Коган

Информ. бланк № 3938

Сдано в набор 16.07.80. Подп. в печ. 18.02.81. БФ 01019. Формат 60 x 90/16. Бумага типогр. № 1. Обыкн. нов. гарн. Выс. печ. Усл. печ. л. 20,0. Уч.-изд. л. 21,7. Усл. кр.-лист. 24,5. Тираж 1600 экз. Заказ 1-115. Цена 3 р. 60 к.
Издательство «Наукова думка», 252601, Киев, ГСП, Репина, 3.
Книжная фабрика «Коммунист», РПО «Полиграфкнига» Госкомиздата УССР, 310012, Харьков-12, Энгельса, 11.