

не в гравитационном (и, следовательно, инерционном) поле. Понятие об эффективной массе, а с ним и понятие о положительных дырках не имеют никакого отношения к гравитации (и инерции). Суть дела состоит в том, что силы инерции определяются через производную по времени от импульса, а не от квазиимпульса. Поэтому, например, в известных опытах Толмэна и Стюарта (определение удельного заряда электронов по измерению импульса тока при торможении вращающейся проволочной катушки) отношение заряда частиц к массе всегда будет получаться равным  $-e/m_0$ , т. е. будет соответствовать отрицательным электронам с истинной (а не эффективной) массой  $m_0$ . Такой результат получится и в том случае, когда вместо металла будет взят дырочный полупроводник. Далее, в § III.5 мы видели, что эффективная масса зависит от степени перекрытия атомных волновых функций. Она сильно увеличивается по мере увеличения глубины энергетической зоны; для глубоких узких зон  $m \gg m_0$  (внутренние электроны атомов практически локализованы около своих ядер). Однако это обстоятельство никак не сказывается на весе тела, который определяется истинными массами всех ядер и электронов.

### § 3. Движение носителей заряда в постоянном и однородном магнитном поле (классическая теория). Диаманитный резонанс

Рассмотрим задачу о движении электрона или дырки в постоянном и однородном магнитном поле. Решение этой задачи приведет нас к важному методу экспериментального определения эффективной массы. Дабы не затемнять существа дела, пренебрежем сначала рассеянием носителей заряда. Позднее мы учтем и этот эффект и выясним, в чем состоит его роль и в какой мере она существенна в рассматриваемой задаче.

Направим оси координат вдоль главных осей тензора обратной эффективной массы. Тогда, принимая во внимание формулу для силы Лоренца

$$\mathbf{F} = -\frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathfrak{B}],$$

мы можем, применительно к рассматриваемой задаче, переписать уравнения (1.10') в виде

$$\begin{aligned} \frac{dv_x}{dt} &= -\frac{\mathcal{E}e}{cm_x} (\alpha_z v_y - \alpha_y v_z), \\ \frac{dv_y}{dt} &= -\frac{\mathcal{E}e}{cm_y} (\alpha_x v_z - \alpha_z v_x), \\ \frac{dv_z}{dt} &= -\frac{\mathcal{E}e}{cm_z} (\alpha_y v_x - \alpha_x v_y). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$  — косинусы углов между вектором  $\mathfrak{B}$  и осями координат. Это есть система линейных однородных уравнений. Будем искать ее решение в виде гармонических колебаний:

$$v_x = v_1 e^{-i\omega t}, \quad v_y = v_2 e^{-i\omega t}, \quad v_z = v_3 e^{-i\omega t}, \quad (3.2)$$

где  $v_1, v_2, v_3$  — постоянные коэффициенты (амплитуды колебаний), а  $\omega$  — частота. Подставляя (3.2) в уравнения (3.1), получаем систему линейных алгебраических уравнений относительно амплитуд  $v_1, v_2, v_3$ :

$$\begin{aligned} -i\omega v_1 + \frac{\mathcal{B}e}{m_x c} \alpha_z v_2 - \frac{\mathcal{B}e}{m_x c} \alpha_y v_3 &= 0, \\ -\frac{\mathcal{B}e}{m_y c} \alpha_z v_1 - i\omega v_2 + \frac{\mathcal{B}e}{m_y c} \alpha_x v_3 &= 0, \\ \frac{\mathcal{B}e}{m_z c} \alpha_y v_1 - \frac{\mathcal{B}e}{m_z c} \alpha_x v_2 - i\omega v_3 &= 0. \end{aligned}$$

Условие разрешимости этой системы состоит в обращении в нуль ее детерминанта. Этим определяются возможные значения частоты колебаний  $\omega$ :

$$\omega = 0, \quad (3.3a)$$

$$\omega^2 = \omega_c^2 \equiv \left( \frac{\mathcal{B}e}{c} \right)^2 \left( \frac{\alpha_x^2}{m_y m_z} + \frac{\alpha_y^2}{m_z m_x} + \frac{\alpha_z^2}{m_x m_y} \right), \quad (3.3b)$$

т. е.

$$\omega_c = \frac{\mathcal{B}e}{m_c c}, \quad (3.4)$$

где

$$\frac{1}{m_c} = \left( \frac{\alpha_x^2}{m_y m_z} + \frac{\alpha_y^2}{m_z m_x} + \frac{\alpha_z^2}{m_x m_y} \right)^{1/2}. \quad (3.5)$$

Величину  $m_c$  иногда называют *циклотронной эффективной массой*.

При  $m_x = m_y = m_z = m$  выражение (3.5) переходит в формулу (I.3.2). Оно упрощается также, если изоэнергетическая поверхность представляет собой эллипсоид вращения (III.8.5). Действительно, обозначим через  $\varphi$  угол между направлением магнитной индукции  $\mathcal{B}$  и осью вращения эллипсоида (осью  $Z$ ). Тогда

$$\alpha_z^2 = \cos^2 \varphi, \quad \alpha_x^2 + \alpha_y^2 = \sin^2 \varphi, \quad m_z = m_{\parallel}, \quad m_x = m_y = m_{\perp}$$

и выражение (3.5) принимает вид

$$\frac{1}{m_c} = \left( \frac{\cos^2 \varphi}{m_{\perp}^2} + \frac{\sin^2 \varphi}{m_{\perp} m_{\parallel}} \right)^{1/2}. \quad (3.5')$$

Корень (3.3a) соответствует движению с постоянной скоростью — равномерному движению вдоль направления поля. Два корня (3.3b) описывают гармонические колебания, в совокупности своей сводящиеся к равномерному вращению электрона в плоскости, перпен-

дикулярной магнитному полю. Угловая скорость этого вращения равна  $\omega_c$ .

Можно обобщить формулу (3.5) и на случай невырожденных зон при непараболическом законе дисперсии. Для этой цели удобно воспользоваться уравнением (1.9), совмещая ось  $Z$  с направлением магнитного поля:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathfrak{B}],$$

т. е.

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{e}{c} \mathfrak{B} v_y, \quad \frac{dp_y}{dt} = \frac{e}{c} \mathfrak{B} v_x, \quad \frac{dp_z}{dt} = 0. \quad (3.6)$$

Поскольку сила Лоренца не совершает работы, видим, что в рассматриваемой задаче имеются два интеграла движения:

$$p_z = \text{const}, \quad E(\mathbf{p}) \equiv E = \text{const}. \quad (3.7)$$

Эти уравнения описывают траекторию электрона в пространстве квазимпульсов. Будем считать ее замкнутой и несамопересекающейся. Согласно (III.8.3) в случае параболического закона дисперсии это есть эллипс

$$\frac{(p_x - p_x^0)^2}{2m_x} + \frac{(p_y - p_y^0)^2}{2m_y} = E - \frac{(p_z - p_z^0)^2}{2m_z} = \text{const}. \quad (3.7')$$

Отклонения от параболичности приводят к деформации эллипса; когда они становятся очень большими, траектория может (но не обязана) стать и незамкнутой. Исследование показывает, однако, что это возможно лишь в области энергий, достаточно далеких от дна зоны.

Обозначим через  $dp_{\perp}$  элемент дуги траектории и будем рассматривать время  $t$  как параметр, определяющий положение точки на ней. Тогда

$$\frac{dp_{\perp}}{dt} = \left[ \left( \frac{dp_x}{dt} \right)^2 + \left( \frac{dp_y}{dt} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (3.8)$$

Введем, далее, нормальную к кривой (3.7) составляющую вектора  $\mathbf{v}$ :  $\mathbf{v}_{\perp} = \{v_x, v_y\}$ . Абсолютная величина ее есть  $v_{\perp} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ . Пользуясь равенством (3.8), можем переписать уравнения (3.6) в виде

$$\frac{dp_{\perp}}{dt} = -\frac{e}{c} \mathfrak{B} v_{\perp}. \quad (3.6')$$

Отсюда

$$t = -\frac{c}{e\mathfrak{B}} \int \frac{dp_{\perp}}{v_{\perp}}.$$

Период обращения электрона по орбите  $2\pi/\omega_c$  получится, если взять здесь интеграл вдоль всей траектории (3.7):

$$\frac{2\pi}{\omega_c} = -\frac{c}{e\mathfrak{B}} \oint \frac{dp_{\perp}}{v_{\perp}}. \quad (3.9)$$

Фигурирующий в (3.9) интеграл можно выразить через площадь  $S(E, p_z)$ , ограниченную кривой (3.7). Действительно,

$$S(E, p_z) = \int dp_x dp_y,$$

причем пределы интегрирования определяются равенствами (3.7).

Введем вместо  $p_x$  и  $p_y$  переменные  $E'$  и  $p_{\perp}$ , где  $E'$  принимает все значения от  $E_c$  до  $E$ . При этом элемент площади  $dp_x dp_y$  дается выражением

$$dp_x dp_y = \frac{dE dp_{\perp}}{v_{\perp}}.$$

Таким образом,

$$S(E, p_z) = \int_{E_c}^E dE' \oint \frac{dp_{\perp}}{v_{\perp}},$$

и, следовательно,

$$\oint \frac{dp_{\perp}}{v_{\perp}} = \frac{\partial S(E, p_z)}{\partial E}.$$

Подставляя это выражение в (3.9), получаем

$$\omega_c = \frac{e\mathcal{B}}{m_c c}, \quad (3.4')$$

где

$$m_c = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S(E, p_z)}{\partial E}. \quad (3.10)$$

В условиях (3.7') отсюда вновь получается формула (3.5). В более общем случае циклотронная эффективная масса (3.10) зависит от  $E$  и  $p_z$ .

В случае вырожденных зон изложенные выше общие соображения остаются в силе, однако для циклотронной эффективной массы вместо (3.5) получается более сложное выражение.

Из формулы (3.5) видно, что, измеряя частоту вращения  $\omega_c$  электронов (дырок) при различных направлениях магнитной индукции, можно определить компоненты тензора эффективных масс, а следовательно, и форму изоэнергетической поверхности\*).

Частоту  $\omega_c$  можно определить, исследуя поглощение электромагнитных волн в полупроводнике. Эту возможность иллюстрирует рис. 4.2, на котором показана траектория электрона, движущегося в постоянном и однородном магнитном поле с индукцией  $\mathcal{B}$ . Линейно поляризованная электромагнитная волна распространяется

вдоль оси  $Y$ , и вектор ее электрического поля  $\mathcal{E}$  параллелен плоскости орбиты электрона. Длина электромагнитной волны намного

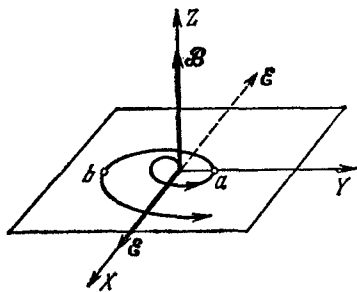


Рис. 4.2. К объяснению диамагнитного (циклотронного) резонанса.

вдоль оси  $Y$ , и вектор ее электрического поля  $\mathcal{E}$  параллелен плоскости орбиты электрона. Длина электромагнитной волны намного

\*) Строгое квантовомеханическое рассмотрение (см. ниже, § 5) показывает, что принятая в настоящем параграфе классическая трактовка движения носителей заряда в магнитном поле имеет определенные пределы применимости. Формула (3.5), однако, остается в силе и в точной теории.

больше диаметра орбиты, так что мгновенные значения  $\mathcal{E}$  одинаковы во всех ее точках. Если, например, электрон находится в точке  $a$  и поле  $\mathcal{E}$  направлено так, как показано на рисунке, то поле будет ускорять движение электрона. Когда электрон совершит половину оборота и попадет в точку  $b$ , фаза поля  $\mathcal{E}$  изменится. Если частота волны  $\omega$  совпадает с  $\omega_c$ , то фаза  $\mathcal{E}$  изменится как раз на  $\pi$  и поле  $\mathcal{E}$  будет по-прежнему ускорять движение электрона. Иначе говоря, при  $\omega = \omega_c$  будет иметь место резонансное поглощение электромагнитной волны системой электронов. Это явление получило название *диамагнитного* или *циклотронного резонанса*.

При непараболическом законе дисперсии условия резонанса оказываются различными для электронов разной энергии. Это приводит к «размазке» резонанса, затрудняя его наблюдение. Исключение составляет лишь случай сильно вырожденного газа носителей заряда, когда, как показано в гл. XIII, существенна лишь энергия, равная энергии Ферми.

В действительности прецессионное движение носителей заряда нарушается соударениями, которые уменьшают резонансное поглощение и могут даже сделать вообще невозможным его наблюдение. Остановимся на этом подробнее, пользуясь, как и выше, полуклассическим описанием. Рассмотрим для определенности случай постоянной скалярной эффективной массы  $m$  и положим, что индукция  $\mathfrak{B}$  направлена по оси  $Z$ , а электрическое поле волны  $\mathcal{E}$  — по оси  $X$  (рис. 4.2). Магнитным полем волны будем пренебрегать по сравнению с сильным постоянным полем  $\mathfrak{B}$ . Влияние соударений будем учитывать введением некоторой силы трения

$$\mathbf{F}_{\text{тр}} = -\frac{m\mathbf{v}}{\tau_p},$$

где  $\tau_p$  — время релаксации импульса, определяющее подвижность частиц (ср. гл. I, XIII). Тогда уравнения движения частицы будут

$$\begin{aligned} m \frac{dv_x}{dt} &= -e\mathfrak{E} - \frac{e}{c} v_y \mathfrak{B} - \frac{m}{\tau_p} v_x, \\ m \frac{dv_y}{dt} &= \frac{e}{c} v_x \mathfrak{B} - \frac{m}{\tau_p} v_y. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Интересуясь, как и выше, установившимися колебаниями вида (3.2) и подставляя эти выражения в уравнения (3.11), мы получим

$$\begin{aligned} m(-i\omega + \tau_p^{-1})v_x &= -e\mathfrak{E} - \frac{e}{c} \mathfrak{B}v_y, \\ m(-i\omega + \tau_p^{-1})v_y &= \frac{e}{c} \mathfrak{B}v_x. \end{aligned}$$

Исключая отсюда  $v_y$ , мы найдем среднюю дрейфовую скорость  $v_x$ , а следовательно, и электропроводность  $\sigma$  для переменного поля

волны  $\mathcal{E}$ :

$$\sigma = - \frac{env_x}{\mathcal{E}} = \sigma_0 \frac{1 - i\omega\tau_p}{(1 - i\omega\tau_p)^2 + (\omega_c\tau_p)^2}. \quad (3.12)$$

Здесь  $n$  — концентрация частиц, а через  $\sigma_0 = en\mu = \frac{e^2n}{m} \tau_p$  обозначена электропроводность для постоянного электрического поля. Величина  $\sigma$  оказывается зависящей от частоты  $\omega$  и, кроме того, комплексной, что означает наличие разности фаз между колебаниями тока и поля. Поглощение электромагнитной волны пропорционально вещественной части  $\sigma$ . Из формулы (3.12) мы имеем

$$\frac{\text{Re } \sigma}{\sigma_0} = \frac{1 + (\omega\tau_p)^2 + (\omega_c\tau_p)^2}{[1 + (\omega_c\tau_p)^2 - (\omega\tau_p)^2]^2 + 4(\omega\tau_p)^2}. \quad (3.13)$$

Зависимость  $\frac{\text{Re } \sigma}{\sigma_0}$  от  $\frac{\omega_c}{\omega}$  для различных значений  $\omega\tau_p$  показана на рис. 4.3. При  $\omega\tau_p \ll 1$  она монотонна. Это и понятно, так как в данном случае электрон не успевает сделать ни одного оборота без столкновений; скорость его после столкновения может быть направлена под любым углом к электрическому полю волны. Иначе говоря, столкновения нарушают синфазный характер движения электронов относительно колебаний поля в волне, необходимый для возникновения резонанса. Резонансное поглощение становится заметным при  $\omega\tau_p \gtrsim 1$ ; оно тем заметнее, чем больше  $\omega\tau_p$ .

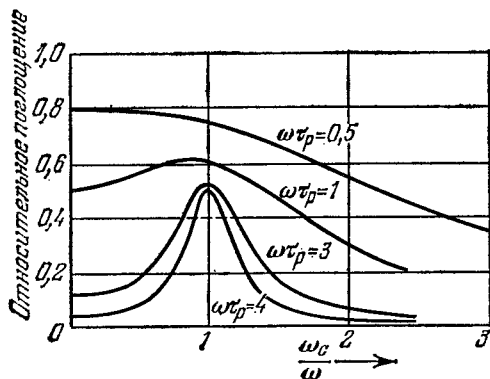


Рис. 4.3. Резонансное поглощение электромагнитной волны в зависимости от отношения  $\omega_c/\omega$ .

При экспериментальном осуществлении диамагнитного резонанса необходимо прежде всего обеспечить выполнение условия  $\omega_c\tau_p > 1$ . Пользуясь формулой (3.4) и выражая  $\tau_p$  через подвижность  $\mu$ , мы имеем

$$\omega_c\tau_p = \frac{\mathcal{B}e}{mc} \tau_p = \frac{1}{c} \mu \mathcal{B} > 1$$

или, если  $\mu$  дано в практических единицах ( $\text{см}^2/\text{с} \cdot \text{В}$ ), а  $\mathcal{B}$  — в гауссах,

$$\mu > 10^8/\mathcal{B}.$$

В типичных экспериментах используют электромагниты, создающие индукцию от нескольких тысяч до нескольких десятков тысяч гаусс.

Полагая  $\mathcal{B} = 1 \cdot 10^3$  Гс, мы находим, что  $\mu$  должно быть  $> 10^5 \text{см}^2/\text{с} \cdot \text{В}$ . В большинстве известных полупроводников при комнатных температурах подвижность заметно меньше, поэтому оказывается необходимым работать при низких температурах (обычно гелиевых) и использовать очень чистые кристаллы (чтобы примесное рассеяние не уменьшало подвижность).

Однако при этом возникает другая трудность: при очень низких температурах все остаточные примеси не ионизованы и в зонах практически не имеется носителей. Поэтому приходится прибегать к вспомогательным приемам создания подвижных электронов (дырок). Один из них заключается в ударной ионизации мелких примесей электрическим полем самой электромагнитной волны, для

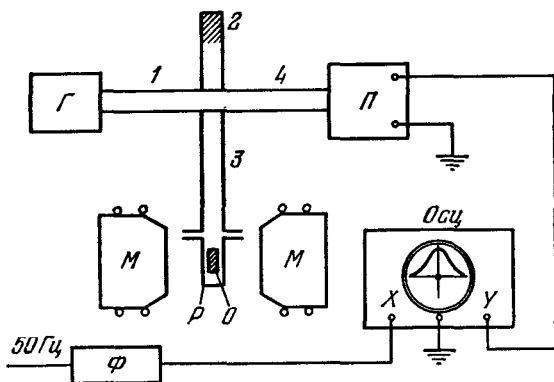


Рис. 4.4. Схема наблюдения диамагнитного резонанса. Г — генератор СВЧ колебаний, П — приемник, Осц — осциллограф, Р — резонансная полость с образцом О, ММ — электромагнит, Ф — фазовращатель.

чего мощность волны должна быть больше некоторого предела, различного для разных полупроводников. Подвижные носители заряда можно также создать с помощью слабого освещения кристалла.

Частоты  $\omega_c$ , определяемые формулой (3.4), при  $\mathcal{B} \sim 10^4$  Гс имеют порядок  $10^{10} \div 10^{12} \text{с}^{-1}$  и соответствуют электромагнитным волнам сантиметрового или миллиметрового диапазона. Поэтому для наблюдения диамагнитного резонанса чаще всего используют СВЧ технику.

На рис. 4.4 показана принципиальная схема одного из типичных опытов (в действительности такие установки содержат ряд дополнительных узлов и блоков; они опущены, как не имеющие принципиального значения). СВЧ колебания от генератора Г ослабляются аттенюатором и попадают в плечо 1 балансового моста. Последний представляет собой двойной волноводный тройник, имеющий четыре

плеча. Плечи 2 и 3 присоединяются к согласованным нагрузкам, одной из которых является резонансная полость  $P$  с исследуемым образцом  $O$ . При равенстве этих нагрузок сигнала в плече 4 нет. При возникновении резонанса изменяется поглощение волны в резонаторе с образцом, баланс моста нарушается и в плече 4 появляется сигнал. Последний регистрируется обычным приемником. На опыте удобно изменять не частоту волны  $\omega$ , а величину магнитной индукции (т. е.  $\omega_c$ ); для чего в электромагните МЛ

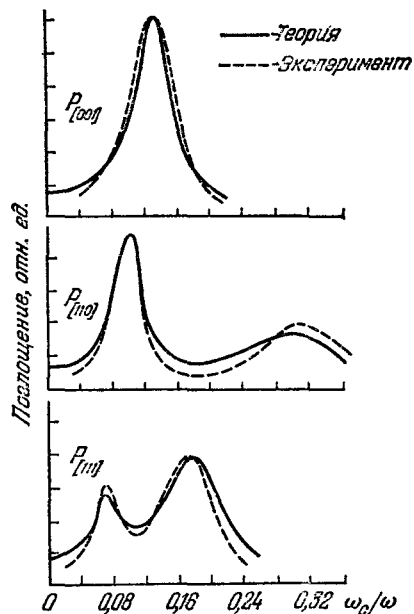


Рис. 4.5. Зависимость поглощения  $P$  СВЧ колебаний от магнитной индукции в германии  $n$ -типа. Индексы у  $P$  указывают направление магнитной индукции.  $T=4,2$  К, частота 8,9 ГГц.

устраивают дополнительную обмотку, модулирующую магнитную индукцию с низкой частотой. Подавая выходной сигнал приемника на одну из пар отклоняющих пластин осциллографа  $Осц$ , а на другую пару пластин — сигнал, пропорциональный изменению магнитной индукции, можно получить на экране осциллографа всю резонансную кривую. На рис. 4.5 в качестве примера показана форма кривых поглощения в германии  $n$ -типа\*). Из рисунка видно, что при повороте кристалла изменяются и число наблюдаемых максимумов, и их положение, что свидетельствует об анизотропии эффективной массы.

Зная значение  $\mathcal{B}$ , соответствующее резонансу ( $\omega_c = \omega$ ), из формулы (3.4) можно непосредственно найти соответствующее значение  $m_c$ .

Укажем еще, что опыты с диамагнитным резонансом позволяют определить знак основных носителей заряда. Для этого вместо прямоугольного резонатора употребляют цилиндрический и возбуждают в нем колебания, поляризованные по кругу. Если магнитная индукция  $\mathcal{B}$  направлена параллельно оси резонатора, то круговые орбиты носителей будут перпендикулярны оси резонатора, т. е. будут лежать в той же плоскости, что и вектор  $\mathcal{E}$  волны. Легко сообразить, что поглощение волны должно наблюдаться только в том случае, когда направление вращения  $\mathcal{E}$  в волне совпадает

\*) В. Lax, H. J. Zeiger, R. N. Dexter, Physica 20, 818 (1954).



с направлением вращения частиц. А это последнее, при заданном направлении  $\mathfrak{B}$ , различно для положительных и отрицательных частиц. Такие опыты позволили получить прямое экспериментальное доказательство существования положительных дырок.

#### § 4. Метод эффективной массы

Как указывалось в гл. II, атомы примеси, как и другие структурные дефекты решетки, могут создавать дискретные уровни в запрещенной зоне. Расчет их составляет одну из задач электронной теории реальных кристаллов. Потенциальную энергию электрона при этом можно представить в виде суммы двух слагаемых:  $U(\mathbf{r}) + \delta U(\mathbf{r})$ . Здесь  $U(\mathbf{r})$  обозначает по-прежнему потенциальную энергию электрона в идеальном кристалле, а  $\delta U(\mathbf{r})$  есть непериодическая функция, описывающая взаимодействие электрона с несовершенствами решетки. Так же обстоит дело и при квантовомеханическом рассмотрении движения электронов в идеальном кристалле при наличии внешнего электрического поля.

Во многих случаях функция  $\delta U(\mathbf{r})$  сравнительно плавно изменяется в пространстве, оставаясь практически постоянной на протяжении постоянной решетки  $a$ . При этом задачу о движении электрона удобно решать с помощью приближенного приема, называемого *методом эффективной массы*. Идея его состоит в том, чтобы, пользуясь плавностью функции  $\delta U$ , свести уравнение Шредингера с потенциалом  $U + \delta U$  к более простому виду, содержащему явно только  $\delta U$ . Роль периодического потенциала состоит при этом в изменении оператора кинетической энергии: вместо массы свободного электрона в нем появляются эффективные массы, описывающие поведение носителя заряда в соответствующем идеальном кристалле (с этим связано название метода). Зонную структуру идеального кристалла при этом следует считать известной.

Для выполнения намеченной только что программы необходимо, чтобы в области, где, в основном, движется электрон, удовлетворялось условие плавности поля  $\delta U$  \*):

$$a \frac{|\nabla \delta U|}{|\delta U|} \ll 1. \quad (4.1)$$

Другие условия применимости метода эффективной массы будут указаны ниже. Подробное изложение метода можно найти в книгах [M7] и [2]. Здесь мы сформулируем только окончательные результаты.

Рассмотрим сначала поведение электронов вблизи дна невырожденной зоны с параболическим изотропным законом дисперсии.

\*) Если кристалл не кубический, то в качестве  $a$  в (4.1) можно подставить любую из постоянных решетки, ибо все они — одного порядка величины. Метод эффективной массы был предложен С. И. Пекаром в 1948 г.