

миевское вырождение). Магнитные поля, для которых неравенство (5.19) не выполняется и надо учитывать квантование Ландау, называются квантующими.

Следует, однако, помнить, что формулы, полученные в настоящем параграфе, тоже имеют определенные пределы применимости. Действительно, мы рассматривали здесь поведение носителей заряда в идеальном кристалле. В применении к реальному кристаллу полученные таким путем результаты имеют смысл, если можно пренебречь процессами рассеяния. Последние приводят к нестационарности рассматриваемых нами состояний: на каждом из уровней электрон может находиться лишь конечное время τ_p — характерное время свободного пробега. Согласно принципу неопределенности между энергией и временем это означает, что каждый уровень приобретает конечную ширину: $\Delta E \sim \hbar/\tau_p$. Формулы (5.9), (5.12) и т. д. имеют смысл, лишь если эта ширина мала по сравнению с расстоянием между уровнями:

$$\hbar/\tau_p \ll \hbar\omega_c. \quad (5.20)$$

Как и следовало ожидать (в случае параболического закона дисперсии!), это есть не что иное, как классическое неравенство $\omega_c\tau_p \gg 1$.

Далее, применение в данной задаче метода эффективной массы оправдано, коль скоро магнитная длина, определяемая формулой (5.11), велика по сравнению с постоянной решетки. При $\mathcal{B} = 10^4$ Гс мы имеем, согласно (5.11), $\gamma = 0,25 \cdot 10^{-6}$ см.

Квантовомеханическое рассмотрение позволяет особенно ясно понять сущность явления диамагнитного резонанса. Очевидно, мы имеем здесь просто переходы между соседними уровнями Ландау, вызываемые фотонами частоты ω_c .

§ 6. Движение и энергетический спектр носителей заряда в постоянном электрическом поле

Пусть в кристалле создано постоянное и однородное в пространстве электрическое поле напряженности \mathcal{E} . Этого можно добиться, например, используя достаточно тонкий образец в качестве «диэлектрической прослойки» в конденсаторе. Будем считать, что величина \mathcal{E} удовлетворяет условию (1.6).

В отличие от магнитного, электрическое поле уже с точки зрения классической механики может производить работу над зарядом. Соответственно следует ожидать, что при наложении постоянного и однородного электрического поля носитель заряда будет менять свою энергию, т. е. перемещаться по зоне. Для исследования этого движения воспользуемся уравнением движения (1.9). Для определенности будем говорить об электронах; все результаты для дырок получаются из приводимых ниже формул изменением знака при e .

Замечая, что в рассматриваемом случае сила $F = -e\mathcal{E}$, мы имеем

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e\mathcal{E}. \quad (6.1)$$

Интегрируя это уравнение с начальным условием $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$ при $t = 0$, находим

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 - e\mathcal{E}t. \quad (6.2)$$

По виду формула (6.2) описывает неограниченное возрастание квазиимпульса. Следует, однако, помнить, что по определению последний изменяется только в пределах первой зоны Бриллюэна. Поэтому слова «неограниченное возрастание» в данном случае лишены смысла. Характер движения электрона легко выяснить,

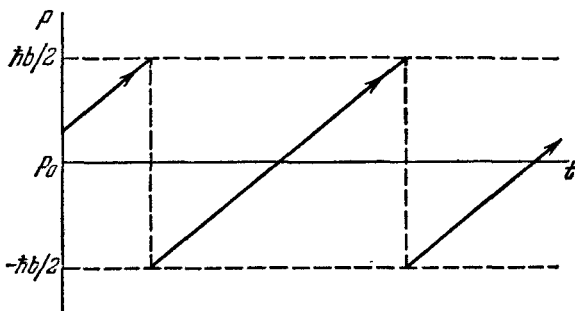


Рис. 4.7. Периодическое движение носителя заряда в зоне Бриллюэна во внешнем электрическом поле (одномерный случай). Сплошные линии со стрелками изображают траекторию носителя в пространстве квазиимпульсов.

вспоминая, что точки, разделенные вектором $\hbar\mathbf{b}$, описывают одно и то же состояние электрона. Следовательно, попав на границу зоны Бриллюэна, электрон, тем самым, попадает и на противоположную ее границу, откуда вновь начинается увеличение квазиимпульса. Если векторы \mathcal{E} и \mathbf{b} параллельны, то квазиимпульс будет изменяться периодически — так, как это показано (для одномерного случая) на рис. 4.7. Период осцилляций t_0 , т. е. время, за которое электрон проходит всю зону Бриллюэна и возвращается в исходное состояние, легко найти из условия

$$\hbar\mathbf{b} = e\mathcal{E}t_0.$$

Отсюда

$$t_0 = \frac{\hbar}{e} \frac{(\mathbf{b}, \mathcal{E})}{\mathcal{E}^2}. \quad (6.3)$$

В частности, в кубическом кристалле, когда вектор \mathfrak{E} параллелен одной из главных его осей, мы имеем

$$t_0 = \frac{\hbar}{e\mathfrak{E}a}. \quad (6.3')$$

Периодическому движению электрона по зоне Бриллюэна должны соответствовать и осцилляции в энергетической зоне. В этом легко убедиться, полагая, в соответствии с (1.7) и (1.3),

$$\frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial t} = -e (\mathfrak{E} \nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p})). \quad (6.4)$$

Общее решение этого дифференциального уравнения есть произвольная функция аргумента $\mathbf{p} - e\mathfrak{E}t$. Поскольку при $\mathfrak{E} = 0$ должна получиться просто энергия электрона в идеальной решетке, мы имеем

$$E(\mathbf{p}, t) = E(\mathbf{p} - e\mathfrak{E}t). \quad (6.5)$$

Как мы знаем, $E(\mathbf{p})$ есть периодическая функция с периодом $\hbar b$. Отсюда сразу следует, что электрон в постоянном и однородном электрическом поле, параллельном одному из векторов обратной решетки, осциллирует по энергетической зоне с периодом, определяемым формулой (6.3).

Обратим внимание на приближенный характер проделанного только что расчета. Именно, мы использовали формулу (1.7), подставив в нее выражение (1.3) для средней скорости электрона. Последнее, однако, было получено для электрона, движущегося в чисто периодическом поле. Отсюда следует, что равенство (6.5) (как и само представление об осцилляциях электрона по зоне) приближенно справедливо, лишь если напряженность «кристаллического» поля, формирующего зонный спектр, велика по сравнению с \mathfrak{E}^* .

Далее, мы не принимали во внимание рассеяние носителей заряда неизбежно существующими несовершенствами решетки. При наличии его представление об осцилляциях электронов и дырок по зонам сохраняет смысл лишь при условии

$$t_0 \ll \tau_p. \quad (6.6)$$

До сих пор мы рассматривали нестационарное движение носителей заряда. Можно поставить и задачу об их стационарных состояниях, т. е. об энергетическом спектре носителей заряда в постоянном и однородном электрическом поле. В рассматриваемом случае потенциальная энергия электрона имеет вид

$$U(\mathbf{r}) + e\mathfrak{E}z, \quad (6.7)$$

*) По порядку величины напряженность «кристаллического» поля составляет в среднем около 10^7 В/см.

где $U(\mathbf{r})$, как и раньше, соответствует электрону в решетке, а поле \mathcal{E} предполагается направленным вдоль оси Z . Коль скоро выполняется неравенство (1.6), второе слагаемое в (6.7) меняется весьма медленно по сравнению с первым. Следовательно, локально — в каждой не слишком большой области кристалла — потенциальную энергию электрона во внешнем поле можно рассматривать как почти постоянную, и мы можем написать собственные значения энергии в виде

$$E_l = E_l(\mathbf{p}) + e\mathcal{E}z. \quad (6.8)$$

Таким образом, локально здесь сохраняется представление о зонном энергетическом спектре электрона. Однако на больших интервалах z (порядка $E_g/e\mathcal{E}$) изменение второго слагаемого в (6.8) становится заметным. Это означает, что зоны, оставаясь практически неизменными по форме, должны наклониться так, как показано на рис. 4.8 (для простоты изображены только границы двух зон — проводимости и валентной).

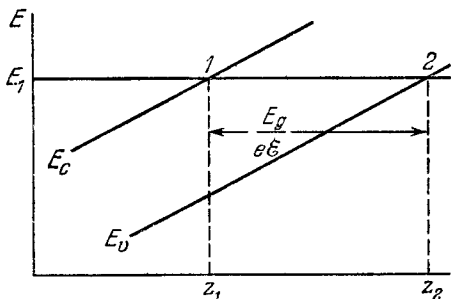


Рис. 4.8. Наклонные энергетические зоны в постоянном и однородном электрическом поле. Ось Z направлена вдоль вектора \mathcal{E} .

Эти рассуждения справедливы и в случае неоднородного электрического поля, если только оно достаточно плавное: напряженность поля должна медленно меняться на протяжении характерной длины волны электрона. Действительно, в этом случае потенциальную энергию электрона в рассматриваемом поле можно по-прежнему рассматривать как величину, локально постоянную. На достаточно больших расстояниях, однако, различие между однородным и неоднородным полями становится заметным: в последнем случае границы зон оказываются непрямолинейными. Об этом говорят как об искривлении зон. Представление об искривленных зонах весьма часто используется в задачах, в которых играют роль пространственно неоднородные электрические поля (гл. VI — XI). Оно позволяет, в частности, пользоваться уравнениями движения (1.9), (1.10) — (1.10'') не только в пространственно однородных, но и в плавных неоднородных полях.

Из рассмотрения рис. 4.8 вытекает, что запрещенной зоны в том смысле, в каком этот термин употреблялся раньше, здесь, строго говоря, нет. Действительно, для любого значения энергии можно найти область пространства, в которой оно попадает, например, в зону проводимости; в другой области изменения z оно же

попадает в валентную зону. Представление о границах зон тем не менее сохраняет известный смысл.

Чтобы выяснить его, вернемся к одномерному примеру, рассмотренному в § III.5 (результаты будут иметь и общее значение). В этом случае верхняя и нижняя границы энергии электрона в данной зоне (в чисто периодическом поле) соответствуют максимальному и минимальному значениям выражения (III.5.12"). При вещественных значениях $\lambda = kd$ выражение (III.5.12") ограничено и зона имеет конечную ширину. Легко видеть, однако, что выражение (III.5.10) удовлетворяет системе уравнений (III.5.8) и при мнимых λ . При этом, очевидно, $\cos \lambda$ заменяется на $\operatorname{ch} |\lambda|$, т. е. абсолютная величина функции (III.5.12") может быть сколь угодно большой. Следовательно, если бы были допустимы мнимые значения квазиволнового числа k , то ширина разрешенной зоны была бы бесконечно велика.

Мы знаем, однако, что в силу условия нормировки (III.2.8) компоненты квазиволнового вектора должны быть вещественными. Действительно, в противном случае волновая функция электрона содержала бы множитель

$$\exp(-z \operatorname{Im} k). \quad (6.9)$$

При любом знаке $\operatorname{Im} k$ выражение (6.9) расходится на бесконечности — либо при $z \rightarrow +\infty$, либо при $z \rightarrow -\infty$. Единственный способ избежать этой расходимости состоит в том, чтобы выбрать в данной области энергий тривиальное решение: $\psi = 0$. Это и означает, что электрон в запрещенной зоне находиться не может: вероятность обнаружить его там равна нулю.

Итак, значениям энергии, лежащим в запрещенной зоне, формально можно сопоставить ненулевые решения уравнения Шредингера. Эти решения, однако, не осциллируют, а возрастают при одном из способов стремления координаты z к бесконечности, почему и исключаются условием (III.2.8), заменяясь тривиальным $\psi = 0$. Иначе говоря, понятие «запрещенная зона» можно определить двояко:

а) как совокупность значений энергии, не допускаемых условием (III.2.8) и потому в идеальном кристалле физически не реализующихся;

б) как совокупность значений энергии, которым отвечают ненулевые решения с мнимым квазиимпульсом — затухающие или возрастающие на бесконечности.

Для идеального кристалла в отсутствие внешних полей эти два определения идентичны. При наложении электрического поля, однако, положение меняется. Первое определение теперь отпадает; второе же — остается в силе. Действительно, коль скоро потенциальная энергия электрона во внешнем поле остается почти

постоянной на протяжении многих постоянных решетки, волновые функции его локально будут иметь почти такой же вид, как и в отсутствие поля. Следовательно, сохраняется деление волновых функций на осциллирующие («разрешенная» зона) и затухающие или возрастающие («запрещенная» зона). Границы зон при этом будут зависеть от координат. (Для разрешенной зоны, понимаемой как совокупность дозволённых значений энергии, это было бы бессмысленно: собственные значения уравнения Шредингера, по определению, от координат не зависят.)

Из рис. 4.8 видно, почему в рассматриваемом случае условие ограниченности решения на бесконечности не исключает состояний с мнимым квазимпульсом. Дело в том, что благодаря наклону зон электрон находится в запрещенной зоне лишь в ограниченной области пространства (так, электрон с энергией E_1 находится в запрещенной зоне на участке $z_1 < z < z_2$). Далее, для любой точки на границе дозволённой зоны запрещенная зона лежит со стороны только меньших или только больших значений z (см., например, точки 2 и 1 на рис. 4.8). Следовательно, существует физически осмысленное решение, при котором $z \operatorname{Im} k > 0$, т. е., согласно (6.9), волновая функция убывает по мере приближения в глубь запрещенной зоны.

Иначе говоря, при наложении электрического поля вероятность обнаружить электрон в запрещенной зоне становится отличной от нуля, но она все же сравнительно невелика. В этом и состоит смысл термина «запрещенная зона» при наличии внешнего электрического поля.

Из сказанного явствует, что электрон во внешнем поле может, не совершая работы, перейти из одной разрешенной зоны в другую. Пусть, например, в начальный момент времени электрон с энергией E_1 находится на границе валентной зоны (в точке 2 рис. 4.8). Согласно (6.9) волновая функция его в запрещенной зоне теперь не равна нулю тождественно, а пропорциональна $\exp\{- (z_2 - z) \operatorname{Im} k\}$. Следовательно, существует конечная вероятность «просачивания» электрона через запрещенную зону в точку 1, расположенную уже на границе зоны проводимости. Это явление в известной мере аналогично хорошо известному из квантовой механики туннельному переходу электрона из одной потенциальной ямы в другую сквозь разделяющий их потенциальный барьер. Соответственно оно получило название *туннельного эффекта* *). Вероятность его \mathcal{P} тем больше, чем меньше расстояние $z_2 - z_1$, т. е. чем сильнее наклонены зоны. Вычисления, на которых мы не будем останавливаться (см. [1, 3]), показывают, что с точностью

*) Следует, однако, помнить, что аналогия с обычным туннельным эффектом не полная: потенциального барьера в обычном смысле слова запрещенная зона не представляет.

до несущественного предэкспоненциального множителя

$$\mathcal{P} \sim \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right), \quad (6.10)$$

где \mathcal{E}_0 — постоянная, зависящая от параметров кристалла (от ширины запрещенной зоны, расположения экстремумов в зоне Бриллюэна, эффективных масс электрона в зонах проводимости и валентной и т. д.).

Пусть, например, изоэнергетические поверхности вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны суть сферы с центрами в центре зоны Бриллюэна; соответствующие эффективные массы обозначим через m_n и $-m_p$ ($m_p > 0$). Тогда

$$\mathcal{E}_0 = \frac{\pi E_g^{3/2} m_r^{1/2}}{2\hbar e}, \quad (6.11)$$

где $m_r = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}$ — есть приведенная эффективная масса электрона и дырки. При $E_g = 1$ эВ и $m_r = 0,1 m_0$ формула (6.11) дает $\mathcal{E}_0 \simeq \simeq 10^7$ В/см.

Видно, что в слабых полях ($\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_0$) вероятность туннельного эффекта совершенно ничтожна и им можно пренебречь. При этом достаточно рассматривать движение электрона только в одной зоне, т. е. справедливы рассуждения, изложенные в начале этого параграфа. С увеличением напряженности поля вероятность туннельного эффекта быстро возрастает, и при $\mathcal{E} \simeq 0,1 \mathcal{E}_0$ его уже надо принимать во внимание.

Туннельный эффект может иметь место и в неоднородных электрических полях. С ним связан ряд явлений, наблюдаемых в полупроводниках. Так, он обуславливает один из возможных механизмов пробоя беспримесного образца: в достаточно сильном поле происходит спонтанное образование электронов проводимости и дырок в валентной зоне *). Далее, на этом эффекте основано действие туннельных диодов (см. § VIII. 3).

Наконец, некоторые особенности поглощения света полупроводниками в сильном поле также объясняются туннельным эффектом (§ XVIII.10).

§ 7. Мелкие примесные уровни в гомеоплярном кристалле

Рассмотрим простейшую задачу теории реальных кристаллов — задачу о мелких уровнях, создаваемых в запрещенной зоне изолированными атомами посторонней примеси. Мелкими будем называть

*) Этот механизм — не единственный. По-видимому, в ряде случаев более существенную роль играет механизм ударной ионизации; электрон проводимости, разгоняемый электрическим полем, приобретает энергию, достаточную для того, чтобы «вышибить» другой электрон из валентной зоны.