

С другой стороны, сама величина  $D$  определяется быстрыми процессами рассеяния, формирующими функцию распределения и протекающими зачастую так, как если бы никакой диффузии не было.

Комбинируя теперь формулы (3.1), (3.3), (3.4) и (3.9), получаем уравнение для функции распределения:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -(\mathbf{v}, \nabla f) - (\mathbf{F}, \nabla_p f) + J[f]. \quad (3.12)$$

Это и есть кинетическое уравнение. Интеграл столкновений  $J[f]$  дается здесь формулами (3.10) или (3.11) (или их суммой, если существенны оба вида рассеяния), а сила  $\mathbf{F}$  — выражением (3.5).

Уравнение (3.12) написано для случая, когда имеются носители заряда только одного типа. При наличии нескольких типов носителей (электронов и дырок, «легких» и «тяжелых» дырок и т. д.) надо ввести свою функцию распределения для каждого типа. Соответственно мы будем иметь столько кинетических уравнений вида (3.12), сколько есть таких типов. При этом в правой части формулы (3.12) появится сумма по всем типам частиц, на которых рассматриваемые носители заряда могут рассеиваться. Таким образом, если существенно взаимное рассеяние или превращение частиц разных типов, то мы приходим к системе связанных кинетических уравнений.

Уравнение (3.12) — интегро-дифференциальное; математическая задача о его решении становится определенной, лишь если задать еще граничные условия. Это, однако, удобно делать не в общем виде, а применительно к тому или иному конкретному случаю, и мы здесь не будем обсуждать этот вопрос.

Вывод кинетического уравнения завершает намеченную в предыдущем параграфе схему вычисления кинетических коэффициентов. Как видно из предыдущего, решение этой задачи делится на два этапа, которые несколько условно можно назвать «механическим» и «статистическим». Первый из них состоит в вычислении коэффициентов пропорциональности  $\mathcal{P}_1$ ,  $\mathcal{P}_2$ , т. е. вероятностей рассеяния при заданном механизме последнего. Второй этап состоит в решении уравнения (или уравнений) (3.12) при известных функциях  $\mathcal{P}_1$ ,  $\mathcal{P}_2$ .

#### § 4. Термодинамическое равновесие. Принцип детального равновесия

Кинетическое уравнение, выведенное в предыдущем параграфе для произвольных неравновесных условий, сохраняет силу и в условиях термодинамического равновесия. При этом оно определяет равновесную функцию распределения  $f_0$ . Последняя, однако, уже известна нам из равновесной статистической физики — это есть функция Ферми (V.3.1). Воспользуемся этим обстоятельством,

чтобы прийти к одному полезному соотношению между коэффициентами  $\mathcal{F}_1$  и  $\mathcal{F}_2$ .

Рассмотрим систему электронов в отсутствие внешнего электрического поля. Поскольку  $f_0$  не зависит от времени, уравнение (3.12) принимает вид

$$-(\mathbf{v}, \nabla f_0) - (\mathbf{F}, \nabla_{\mathbf{p}} f_0) + J[f_0] = 0. \quad (4.1)$$

При этом согласно (V.3.1)

$$f_0 = \left\{ \exp \left[ \frac{E(\mathbf{p}) - e\varphi - F}{kT} \right] + 1 \right\}^{-1}, \quad (4.2)$$

где  $\varphi$  — электростатический потенциал, отличный от константы, если в условиях равновесия имеется искривление зон.

Обозначим через  $f'_0$  производную от  $f_0$  по энергии  $E(\mathbf{p})$ . Поскольку функция  $f_0$  зависит от координат только через потенциал  $\varphi$ , а последний входит лишь в комбинации  $E(\mathbf{p}) - e\varphi$ , мы имеем

$$\nabla f_0 = -ef'_0 \cdot \nabla \varphi. \quad (4.3)$$

Далее, в силу (IV.1.3)

$$\nabla_{\mathbf{p}} f_0 = (\nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p})) f'_0 = \mathbf{v} f'_0. \quad (4.4)$$

Здесь принято во внимание, что в условиях термодинамического равновесия электрохимический потенциал  $F$  и температура  $T$  не зависят от координат.

Сила  $\mathbf{F}$  дается правой частью уравнения (3.5), где, в рассматриваемом случае,

$$\mathcal{E} = -\nabla \varphi.$$

Следовательно,

$$(\mathbf{F}, \nabla_{\mathbf{p}} f_0) = ef'_0 \left\{ (\mathbf{v}, \nabla \varphi) - \frac{1}{c} (\mathbf{v}, [\mathbf{v} \times \mathcal{B}]) \right\}. \quad (4.5)$$

Последнее слагаемое в правой части (4.5) тождественно равно нулю. Это означает, что однородное магнитное поле само по себе не может нарушить равновесное распределение носителей заряда по квазиимпульсам.

Подставляя выражения (4.3) и (4.5) в уравнение (4.1), мы получаем

$$e(\mathbf{v}, \nabla \varphi) f'_0 - e(\mathbf{v}, \nabla \varphi) f'_0 + J[f_0] = 0. \quad (4.1')$$

Видим, что в условиях термодинамического равновесия «трансляционное» и «ускорительное» слагаемые в кинетическом уравнении взаимно уничтожаются. Это означает, что имеет место взаимная компенсация плотностей диффузионного и дрейфового токов (ср. § VI.3). Действительно, диффузионный ток обусловлен как раз неоднородным распределением носителей заряда в пространстве, а дрейфовый — действием силы со стороны электрического поля.

Таким образом, уравнение (4.1) теперь принимает вид

$$J[f_0] = 0. \quad (4.1'')$$

Смысл этого равенства ясен: в условиях взаимной компенсации первых двух слагаемых в (4.1) число частиц в любом элементе фазового пространства может измениться только за счет столкновений\*). Поскольку в рассматриваемых условиях функция распределения не зависит от времени, «приход» и «уход» частиц должны взаимно компенсироваться.

Уравнение (4.1'') с учетом (4.2) устанавливает некоторую связь между величинами  $\mathcal{F}_1(\mathbf{p}', \mathbf{p})$  и  $\mathcal{F}_2(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ .

Рассмотрим сначала случай, когда рассеяние носителей заряда происходит на каких-либо несовершенствах решетки (но не друг на друге). Тогда, согласно (3.10), равенство (4.1'') принимает вид

$$\int \{ \mathcal{F}_1(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f_0(\mathbf{p}') [1 - f_0(\mathbf{p})] - \mathcal{F}_2(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f_0(\mathbf{p}) [1 - f_0(\mathbf{p}')] \} d\mathbf{p}' = 0. \quad (4.6)$$

Допустим, что равенство нулю интеграла в (4.6) влечет за собой и обращение в нуль подынтегрального выражения. Тогда, подставляя в (4.6) явное выражение для функции Ферми, мы получаем

$$\frac{\mathcal{F}_1(\mathbf{p}', \mathbf{p})}{\mathcal{F}_2(\mathbf{p}, \mathbf{p}')} = \exp \frac{E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p})}{kT}. \quad (4.7)$$

Видно, что рассеяние с увеличением энергии менее вероятно, чем с уменьшением ее: при  $E(\mathbf{p}') < E(\mathbf{p})$  правая часть (4.7) меньше единицы. При упругом рассеянии, когда энергия частицы не изменяется вовсе,  $\mathcal{F}_1(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \mathcal{F}_2(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ .

Предположение о равенстве нулю не только интеграла, но и подынтегрального выражения в левой части (4.6) означает, что в условиях равновесия поток частиц из данного элемента фазового пространства в любой другой точно уравновешивается обратным ему потоком. Меньшая вероятность перехода из состояний с малой энергией компенсируется при этом большей их «заселенностью». Иначе говоря, приход и уход частиц уравновешиваются не суммарно, а детально — порознь для каждого двух элементов фазового пространства. Соответственно утверждение, выражаемое равенством (4.7), носит название *принципа детального равновесия*.

Изложенное выше, разумеется, не представляет собой вывода указанного принципа. Это есть лишь способ догадаться, какого соотношения между величинами  $\mathcal{F}_1(\mathbf{p}', \mathbf{p})$  и  $\mathcal{F}_2(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$  можно было бы ожидать. Фактически равенство (4.7) при определенных условиях вытекает из квантовой механики ([M2], § 108), и его можно ис-

\*) Ситуация становится особенно ясной, если искривления зон нет вообще, т. е. система носителей заряда пространственно однородна. В этом случае функция распределения не зависит от координат, а  $\mathfrak{E} = -\nabla\phi = 0$ , т. е. первое и второе слагаемые в (4.1) порознь обращаются в нуль: переноса частиц ни в координатном, ни в импульсном пространстве нет вообще.

пользовать для нахождения явного вида равновесной функции распределения. Так, в частности, обстоит дело при упругом рассеянии бесспиновых частиц (что и будет проиллюстрировано в дальнейшем на конкретных примерах). При этом слово «бесспиновый» не обязательно понимать буквально: речь идет о процессах рассеяния, в которых спин частицы не играет роли. Именно с такими процессами мы чаще всего имеем дело в неферромагнитных полупроводниках и металлах.

Совершенно аналогично можно рассмотреть и рассеяние носителей заряда друг на друге. Интеграл столкновений при этом дается формулой (3.11). Комбинируя ее с соотношением (4.1'), мы получаем, подобно (4.7),

$$\frac{\mathcal{F}_1(p', p'; p_1, p_2)}{\mathcal{F}_2(p_1, p_2; p', p')} = \exp \frac{E(p') + E(p'_2) - E(p_1) - E(p_2)}{kT}. \quad (4.8)$$

Под знаком экспоненты здесь стоит полное изменение энергии двух частиц при столкновении. В отсутствие обмена энергией с какими-либо третьими телами оно, очевидно, должно равняться нулю. Таким образом, равенство (4.8) принимает более простой вид:

$$\mathcal{F}_1(p', p'; p_1, p_2) = \mathcal{F}_2(p_1, p_2; p', p'). \quad (4.8')$$

Как и (4.7), равенство (4.8') справедливо не всегда [M2]. Однако уточнения, которые необходимо внести в общем случае, в интересующих нас задачах ничего не меняют.

## § 5. Малые отклонения от равновесия

Систему электронов можно вывести из состояния термодинамического равновесия, накладывая напряжение на образец, или создавая в нем градиент концентрации носителей заряда или температуры. При этом электрохимический потенциал или температура (или и то и другое) становятся зависящими от координат. Принимая во внимание это обстоятельство, мы можем записать неравновесную функцию распределения в виде

$$f(p, r) = f_0(p, r) + f_1(p, r). \quad (5.1)$$

Здесь

$$f_0 = \left\{ \exp \frac{E(p) - e\varphi - F(r)}{kT(r)} + 1 \right\}^{-1} \quad (5.2)$$

есть функция Ферми с изменяющимися в пространстве температурой и электрохимическим потенциалом, а  $f_1$  — неизвестная пока функция, которую надо определить из кинетического уравнения.

Представление  $f(r, r)$  в виде (5.1) оказывается удобным, если градиенты функций  $F(r)$  и  $T(r)$  достаточно малы. Как будет