

В дальнейшем при рассмотрении электронного газа удобно будет отсчитывать энергию $E(\mathbf{p})$ от дна зоны проводимости. При этом $F + e\varphi = \zeta$, где химический потенциал ζ — тот же, что и в гл. V. В стационарных условиях и при $\mathcal{E}' = \nabla T = 0$ отсюда следует, как мы и ожидали, что $f_1 = 0$ и $f = f_0$. Иначе говоря, равновесие нарушается, лишь если отличен от нуля хотя бы один из векторов ∇F и ∇T . Только при этом условии могут возникнуть электрический ток и поток энергии.

§ 6. Интеграл столкновений в случае упругого рассеяния и изотропных изоэнергетических поверхностей.

Время релаксации импульса

Кинетическое уравнение (5.4'), как и (3.12), — нелинейное интегро-дифференциальное. В общем случае аналитическое его решение связано с большими математическими трудностями. По этой причине приходится вводить упрощения, основанные на тех или иных физических особенностях задачи.

Прежде всего, заметим, что во многих случаях вероятность изменения проекции спина при рассеянии весьма мала и, кроме того, частицы с «левой» и «правой» проекциями спина рассеиваются практически одинаково. Действительно, проекция спина может измениться только за счет сравнительно слабых магнитных взаимодействий. В пренебрежении последними суммирование по проекциям спина в правой части (3.10) отпадает, и мы можем явно рассматривать только частицы с какой-нибудь одной проекцией спина. Наличие электронов или дырок с другой проекцией спина при этом учитывается просто множителем 2 в формулах для концентрации частиц, плотности тока и плотности потока энергии, как это и сделано в равенствах (2.1), (2.2) и (2.3).

Далее, весьма часто рассеяние носителей заряда носит почти упругий характер. Так, например, обстоит дело при рассеянии их атомами заряженной или нейтральной примеси, дислокациями или иными структурными дефектами решетки. Все эти объекты обладают значительно большей массой, нежели электрон или дырка. Как известно из механики, при столкновении легкой частицы с тяжелой может сильно измениться импульс каждой из них, но обмен энергией между ними весьма затруднен: изменение энергии легкой частицы при столкновении оказывается малым по сравнению с самой этой энергией. В следующей главе мы убедимся, что так же обстоит дело и при рассеянии электронов на акустических колебаниях решетки: изменение энергии при рассеянии пропорционально $(m/M)^{1/2}$, где m — эффективная масса электрона, а M — масса атома решетки.

В соответствии со сказанным предположим, что рассеяние носителей заряда происходит без изменения их энергии: носители

только перераспределяются по данной изоэнергетической поверхности, не сходя с нее. Такой тип рассеяния называется *упругим*.

Разумеется, предположение об упругости рассеяния представляет собой идеализацию, использование которой оправдано не всегда. В самом деле, при полном отсутствии обмена энергией между носителями заряда и их окружением в кристалле не выделялось бы джоулево тепло и, далее, вообще не могло бы установиться термодинамическое равновесие между электронами и дырками, с одной стороны, и кристаллической решеткой — с другой. Утверждение о почти упругом характере рассеяния означает, что процесс обмена энергией между носителями заряда и решеткой протекает гораздо медленнее, чем процесс обмена квазиимпульсом. Принятая нами идеализация означает пренебрежение первым из этих процессов. Это может быть оправдано лишь при достаточно малом нарушении равновесия (например, в слабом электрическом поле), когда можно пренебречь энергией, приобретаемой носителями заряда от внешнего источника.

Математически предположение об упругости рассеяния выражается тем, что коэффициенты $\mathcal{P}_1(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ и $\mathcal{P}_2(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, фигурирующие в интеграле столкновений, отличны от нуля лишь при $E(\mathbf{p}') = E(\mathbf{p})$. В то же время интегралы от \mathcal{P}_1 и \mathcal{P}_2 по \mathbf{p}' должны быть отличны от нуля. Этим требованиям можно удовлетворить, полагая

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_1(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= \delta[E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p})] S(\mathbf{p}', \mathbf{p}), \\ \mathcal{P}_2(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= \delta[E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p})] S(\mathbf{p}, \mathbf{p}'), \end{aligned} \quad (6.1)$$

где $S(\mathbf{p}', \mathbf{p})$, $\mathcal{S}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ — некоторые функции, $\delta[E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p})]$ — дельта-функция Дирака*). Действительно, согласно свойствам δ -функции интегралы от величин (6.1), умноженных на функцию распределения f , во-первых, отличны от нуля и, во-вторых, содержат только значения f и S при $E(\mathbf{p}') = E(\mathbf{p})$. В гл. XIV выражения (6.1) будут получены явно. При этом, в силу принципа детального равновесия (4.7),

$$S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = S(\mathbf{p}, \mathbf{p}').$$

Подставляя выражения (6.1) в правую часть (3.10), мы получаем

$$J[f] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta[E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}')] \{f(\mathbf{p}', \mathbf{r}) - f(\mathbf{p}, \mathbf{r})\} d\mathbf{p}'. \quad (6.2)$$

Итак, предположение об упругом характере рассеяния привело к тому, что искомая функция распределения вошла под знак интеграла столкновений линейно.

Дальнейшего упрощения интеграла столкновений можно добиться, приняв во внимание свойства симметрии изоэнергетических

*) См. Приложение IV.

поверхностей. Рассмотрим простейший случай, когда названные поверхности не вырождены и изотропны, т. е. представляют собой сферы *)

$$E = E(p^2). \quad (6.3)$$

При этом функцию $E(p^2)$ можно обратить; соответствующая обратная функция есть $p^2(E)$.

Заметим, что по своему физическому смыслу функция $S(p, p')$ есть скаляр. Следовательно, она может выражаться лишь через скалярные комбинации векторов p и p' .

В рассматриваемом случае их пять:

$$p^2, \quad p'^2, \quad (p, p') = pp' \cos \theta, \quad E(p^2), \quad E(p'^2). \quad (6.4)$$

Здесь $\theta = \widehat{p, p'}$ есть угол рассеяния.

При упругом рассеянии последние две из величин (6.4) оказываются одинаковыми. Далее, в силу (6.3) $p^2 = p'^2$. Таким образом, остаются только два независимых скаляра; в качестве таковых удобно взять энергию $E = E(p^2)$ и $\cos \theta$:

$$S(p, p') = S(E, \cos \theta). \quad (6.5)$$

Итак, условия упругости рассеяния и изотропии невырожденных изоэнергетических поверхностей привели к тому, что функция S оказалась зависящей не от пяти, а только от двух аргументов; при этом один из них в процессе рассеяния остается неизменным.

В дальнейшем, при рассмотрении квантовомеханической части задачи (гл. XIV), коэффициенты $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2$ будут явно вычислены для ряда механизмов рассеяния. Мы непосредственно убедимся тогда в справедливости формул (6.1) и (6.5) в разных конкретных случаях.

Оказывается, однако, что для решения статистической части задачи при малых отклонениях от равновесия специализация вида функции $S(E, \cos \theta)$ не требуется. Достаточно представить функцию распределения в виде (5.1).

В соответствии с § 1 ограничимся учетом членов, линейных по \mathcal{E} и ∇T . Легко сообразить при этом, как должна зависеть функция f_1 от \mathcal{E} , ∇T и \mathcal{B} . Надо лишь принять во внимание, что f_1 есть скаляр, \mathcal{E} и ∇T — векторы, а \mathcal{B} — псевдовектор. Рассмотрим сначала те же три частных случая, что и в § 1.

а) *Носители заряда в постоянном и однородном слабом электрическом поле.* Поскольку функция f_1 должна быть скаляром, линейно содержащим вектор \mathcal{E} , здесь следует положить

$$f_1 = (p, \mathcal{E}) \psi(E), \quad (6.6a)$$

где $\psi(E)$ — пока неизвестная нам скалярная функция энергии носителя заряда.

*) Предположение о параболичности закона дисперсии не обязательно.

б) *Носители заряда в постоянном и однородном слабом температурном поле.* Здесь

$$f_1 = (\mathbf{p}, \nabla T) \chi_1(E) + (\mathbf{p}, \boldsymbol{\varepsilon}') \chi_2, \quad (6.6б)$$

где χ_1 и χ_2 — неизвестные пока скалярные функции, а величина $\boldsymbol{\varepsilon}'$ связана с нагревом образца и с возможным перераспределением зарядов в нем. Фактически вектор $\boldsymbol{\varepsilon}'$ не независим, а выражается через ∇T . Связь между этими векторами, однако, определяется условиями опыта и удобнее здесь ее не специализировать.

в) *Носители заряда в постоянных и однородных электрическом и магнитном полях.* Здесь имеются три независимых вектора: $\boldsymbol{\varepsilon}$, $[\boldsymbol{\varepsilon} \times \boldsymbol{\mathcal{B}}]$, $(\boldsymbol{\mathcal{B}}, \boldsymbol{\varepsilon}) \boldsymbol{\mathcal{B}}$. Соответственно мы имеем

$$f_1 = (\mathbf{p}, \boldsymbol{\varepsilon}) \psi_1(E) + (\mathbf{p}, [\boldsymbol{\varepsilon} \times \boldsymbol{\mathcal{B}}]) \psi_2(E) + (\mathbf{p}, \boldsymbol{\mathcal{B}}) (\boldsymbol{\mathcal{B}}, \boldsymbol{\varepsilon}) \psi_3(E), \quad (6.6в)$$

где ψ_1 , ψ_2 и ψ_3 — пока неизвестные скалярные функции. Они зависят от энергии носителя заряда и, может быть, от величины \mathcal{B}^2 *).

Аналогичные выражения можно написать и при наличии сразу и электрического, и магнитного поля, и градиента температуры или только магнитного поля и градиента температуры. В общем виде, следовательно, мы имеем

$$f_1 = (\mathbf{p}, \boldsymbol{\xi}(E)), \quad (6.7)$$

где вектор $\boldsymbol{\xi}$ представляет собой линейную комбинацию векторов, характеризующих внешние воздействия. Скалярные коэффициенты в этой линейной комбинации зависят от E и, может быть, от \mathcal{B}^2 .

Очевидно, функция (5.1) с учетом (6.7) описывает состояние с отличными от нуля значениями плотности электрического тока и потока энергии. Действительно, f_1 , как и $v(\mathbf{p})$, есть нечетная функция квазиимпульса \mathbf{p} и интегралы в правых частях (2.2) и (2.3) оказываются отличными от нуля. Вместе с тем средняя энергия носителей заряда $\langle E \rangle$ в этом состоянии не отличается от равновесной. В самом деле,

$$\langle E \rangle = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int f(\mathbf{p}) E(\mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (6.8)$$

Поскольку $E(\mathbf{p})$ есть четная функция квазиимпульса \mathbf{p} , слагаемое f_1 не дает вклада в интеграл (6.8): в принятом приближении носители заряда получают от внешних полей и передают решетке только квазиимпульс, но не энергию **).

Подставим выражение (5.1) в интеграл столкновений (6.2) и примем во внимание равенство (6.5). В силу упругого характера

*) Как мы увидим в следующем параграфе, последняя возможность не противоречит условию (5.3).

**) Этот результат можно было предвидеть заранее, вспомнив, что джоулево тепло выражается через квадрат напряженности электрического поля.

рассеяния $f_0(E(p)) = f_0(E(p'))$ и, следовательно,

$$J[f] = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E(p) - E(p')) S(E(p), \cos\theta) \{(\mathbf{p}', \xi) - (\mathbf{p}, \xi)\}. \quad (6.9)$$

Интеграл по \mathbf{p}' удобно вычислять в сферических координатах, направив полярную ось по вектору \mathbf{p} . Полярные углы векторов \mathbf{p}' и ξ относительно \mathbf{p} обозначим, соответственно, через (θ, φ) и (α, β) , а вместо \mathbf{p}' введем переменную $E' = E(p')$. Тогда

$$d\mathbf{p}' = \frac{p'^2(E')}{v(E')} dE' \sin\theta \cdot d\theta d\varphi,$$

где $v(E') = |dE'/dp'|$.

Введем плотность состояний по формуле (V.7.8a) и выполним интегрирование по E' в (6.9) с помощью δ -функции. Получим

$$J[f] = \frac{N(E)\xi(E)}{8\pi} \int_0^\pi d\theta \cdot \sin\theta \cdot S(E, \cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot (\rho \cos(\widehat{\mathbf{p}', \xi}) - \rho \cos\alpha). \quad (6.10)$$

Как известно из сферической тригонометрии,

$$\cos(\widehat{\mathbf{p}', \xi}) = \cos\theta \cdot \cos\alpha + \sin\theta \cdot \sin\alpha \cdot \cos(\varphi - \beta).$$

Подставим это выражение в правую часть (6.10) и проинтегрируем по φ . Получим

$$J[f] = -\frac{\xi p(E) \cos\alpha}{\tau(E)} \equiv -\frac{f_1}{\tau(E)}, \quad (6.11)$$

где

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{N(E)}{4} \int_0^\pi d\theta \cdot S(E, \cos\theta) (1 - \cos\theta) \sin\theta. \quad (6.12)$$

Очевидно, функция $\tau(E)$ не отрицательна. В частности, для электронов с квадратичным законом дисперсии мы имеем

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{V 2m^3 (E - E_c)}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_0^\pi d\theta \cdot S(E, \cos\theta) (1 - \cos\theta) \sin\theta. \quad (6.13)$$

Видим, что $\tau^{-1}(E)$ представляется в виде суммы двух слагаемых. Первое из них (отвечающее единице в круглых скобках под знаком интеграла) связано с интегралом «ухода» B (3.8), второе (отвечающее $\cos\theta$ в круглых скобках) — с интегралом «прихода» A (3.7). Легко убедиться, что «приходный» член не играет роли, если S — четная функция $\cos\theta$ (или не зависит от θ).

Функция $\tau(E)$, определяемая равенствами (6.12) или (6.13), имеет размерность времени и называется *временем релаксации импульса*. Для краткости мы будем опускать слово «импульса» всюду, где это не может повести к недоразумениям. Часто используется также термин «транспортное время релаксации».

Смысл термина «время релаксации» легко уяснить себе, рассмотрев частный случай, когда внешние поля отсутствуют и образец пространственно однороден ($\nabla f = 0$), но функция распределения все же имеет неравновесный вид (5.1). Так может обстоять дело, например, сразу после выключения (в момент $t = 0$) внешнего электрического поля. Естественно, такое состояние не будет стационарным и функция распределения будет изменяться со временем, постепенно приближаясь к равновесному своему значению. Действительно, кинетическое уравнение (3.12) в данном случае имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{f - f_0}{\tau(E)} = 0. \quad (6.14)$$

Отсюда

$$f - f_0 = Ce^{-t/\tau(E)}. \quad (6.15)$$

Константа C определяется начальными условиями и нас здесь не интересует. Видно, что величина τ определяет время возвращения системы к состоянию равновесия.

Как будет видно из дальнейшего, время $\tau(E)$ есть не что иное, как время свободного пробега, введенное в § 2 гл. I. Здесь, однако, оно введено не ad hoc, а выведено — в определенных предположениях — из рассмотрения интеграла столкновений. При этом формулы (6.12) и (6.13) позволяют явно вычислять τ как функцию энергии носителя заряда и экспериментально варьируемых параметров, коль скоро известна функция $S(E, \cos \theta)$, т. е. коль скоро решена механическая часть задачи.

Следует подчеркнуть, что предположения, в рамках которых получены простые формулы (6.11) и (6.12), — довольно жесткие. Прежде всего, изоэнергетические поверхности далеко не всегда изотропны (§§ III.8, III.9). Наоборот, энергия электрона чаще зависит не только от абсолютной величины квазимпульса, но и от ориентации его относительно осей кристалла. В частности, так обстоит дело в германии и кремнии. В таких случаях кинетические свойства системы электронов характеризуются «временем релаксации», зависящим не только от энергии, но и от направления движения частицы относительно кристаллографических осей. Простая формула (6.12) при этом уже несправедлива. Иногда удается ввести три «времена релаксации», каждое из которых зависит только от энергии и соответствует потоку электронов вдоль «своей» кристаллографической оси. Далее, как будет показано в гл. XIV, существуют механизмы рассеяния, для которых предположение об упругом его характере не оправдано.

Задача о решении кинетического уравнения с учетом анизотропии изоэнергетических поверхностей или неупругости рассеяния связана с серьезными математическими осложнениями, и мы здесь не будем на ней останавливаться. Приближенную аналитиче-

скую ее трактовку, справедливую в применении к кристаллам типа германия и кремния, можно найти в монографии [М7]. В более сложных случаях кинетическое уравнение решают численными методами.

Несмотря на известную грубость принятых нами предположений, формулы (6.11) и (6.12) все же оказываются очень полезными. В ряде случаев они позволяют правильно указать зависимость кинетических коэффициентов от экспериментально варьируемых параметров, а также оценить порядок их величины. Дело в том, что анизотропия изоэнергетических поверхностей не всегда играет принципиальную роль. Зачастую учет ее приводит просто к появлению не слишком существенных численных коэффициентов. Более подробно этот вопрос рассматривается в § 7 и в § XIV.6.

§ 7. Элементарные стационарные решения кинетического уравнения в случае малых отклонений от равновесия

Решение кинетического уравнения в условиях, когда справедливо неравенство (5.3) и соотношение (6.11), не представляет труда. В настоящем параграфе мы будем интересоваться только стационарными состояниями, в которых функция распределения f не зависит от времени. Это соответствует постоянным полям (или постоянному градиенту температуры), со времени включения которых прошло время, заметно превышающее как время свободного пробега, так и максвелловское время релаксации.

Вновь рассмотрим по отдельности три случая, указанные в § 6. Ограничимся при этом материалами, пространственно однородными в отсутствие внешних воздействий (в частности, в отсутствие градиента температуры).

а. Статическая электропроводность. В рассматриваемом случае нет причин для возникновения зависимости функции распределения от координат, $\mathfrak{B} = 0$ и $\mathfrak{E}' = \mathfrak{E}$.

Таким образом, кинетическое уравнение (5.4') с учетом соотношений (6.6а) и (6.11) принимает вид

$$e(\mathfrak{E}, \mathbf{v}) f'_0 - (p, \mathfrak{E}) \frac{\Psi}{\tau} = 0. \quad (7.1)$$

В изотропном случае (6.3) скорость \mathbf{v} параллельна p . Положим

$$p = m(E) \mathbf{v}, \quad (7.2)$$

где $m(E)$ — некоторая величина размерности массы. При квадратичном законе дисперсии это есть просто эффективная масса носителя заряда; при учете непараболичности она зависит от энергии.

Уравнение (7.1) теперь принимает вид

$$\left(\frac{e}{m} f'_0 - \frac{\Psi}{\tau} \right) (p, \mathfrak{E}) = 0. \quad (7.3)$$