

— в случае газа, полностью вырожденного (в случае полностью вырожденного дырочного газа знаменатель правой части (2.22б) следует заменить на $-E_g - \zeta$).

Подчеркнем, что отказаться от условия (2.21) (и, следовательно, от (2.22а, б)) нельзя: без него вообще нельзя было бы ввести представление о не зависящей от времени вероятности перехода (2.15), и стационарная постановка задачи, принятая нами в предыдущей главе (и невязанная опытом), потеряла бы смысл. Иначе говоря, неравенства (2.22а, б) составляют основное условие применимости кинетического уравнения. Вычислив для какого-нибудь механизма рассеяния время релаксации, мы должны затем проверить, удовлетворяется ли это условие. Только если оно удовлетворяется, результат имеет смысл и может быть использован для дальнейшего вычисления кинетических коэффициентов. В противном случае вся постановка задачи нуждается в пересмотре: энергию взаимодействия носителей заряда с соответствующими рассеивателями надо принимать во внимание уже при определении энергетического спектра системы.

Причину неизбежного появления неравенств (2.22а, б) в методе кинетического уравнения можно понять с помощью соотношения неопределенности между энергией и временем. При конечном времени наблюдения τ неопределенность в разности энергий начального и конечного состояний — порядка \hbar/τ . Чтобы можно было, хотя бы приближенно, говорить о сохранении энергии при столкновении, эта неопределенность должна быть мала по сравнению с характерной энергией электрона. Отсюда сразу вытекают неравенства (2.22а, б).

Во избежание недоразумений напомним, что E_λ и $E_{\lambda'}$ суть значения энергии невозмущенной системы. Точная энергия, которую надо было бы вычислять с учетом как H_0 , так и энергии взаимодействия H' , сохраняется, конечно, точно.

Формула (2.19) сводит задачу о расчете времени релаксации к вычислению матричных элементов оператора H' .

§ 3. Энергия взаимодействия носителей заряда с фононами

а. Общие соображения. По определению оператор H' описывает изменение энергии носителя заряда при смещении атомов решетки из положений равновесия. Вычисление этой энергии составляет весьма сложную задачу — хотя бы потому, что атомы обладают конечными размерами и при смещении могут деформироваться. Для определения этой деформации и связанного с ней изменения силового поля надо было бы решить динамическую задачу многих тел.

Положение, однако, значительно упрощается в случае, типичном для задачи о рассеянии. Именно, из дальнейшего (§ 4) будет

видно, что главную роль в рассеянии носителей заряда играют фононы со сравнительно малыми квазиволновыми векторами: длины волн «существенных» фононов оказываются примерно такими же, как у электронов, т. е. значительно больше постоянной решетки. Как всегда в подобных случаях, имеются в виду длины волн большинства электронов (в невырожденной системе — порядка $2\pi\hbar/\sqrt{mkT}$). Приняв это во внимание и пользуясь некоторыми соображениями общего характера, мы можем — не решая указанную выше задачу динамики — написать явное выражение для оператора H' , содержащее лишь небольшое число экспериментально определяемых параметров.

б. Взаимодействие носителей заряда с акустическими фононами; метод потенциала деформации. Рассмотрим сначала одноатомный кристалл ($r = 1$).

Заметим прежде всего, что оператор H' должен быть скаляром. Далее, он отличен от нуля, лишь если атомы решетки смещены из положений равновесия. Иначе говоря, оператор H' должен обращаться в нуль вместе с вектором смещения. Рассматривая, как и в гл. XII, случай малых колебаний, мы можем ограничиться линейной зависимостью H' от векторов \mathbf{Q} (\mathbf{g} , \hbar) или от их производных*). Наконец, надо принять во внимание, что при сдвиге или повороте всего кристалла как целого энергия электронов не меняется. Такому сдвигу соответствует смещение всех атомов решетки строго в одной фазе. Оператор H' в указанных условиях должен обращаться в нуль. В рассматриваемых сейчас одноатомных кристаллах возможны, как мы знаем, только акустические колебания решетки. При этом синфазному движению атомов соответствует бесконечно большая длина волны, т. е., согласно (XII.4.5), вектор смещения, не зависящий от координат, \mathbf{g} . Отсюда следует, что оператор H' должен выражаться не через сам вектор смещения, а через производные от него по координатам — при сдвиге кристалла как целого эти производные обращаются в нуль. Иначе говоря, важно не смещение атомов само по себе, а деформация решетки, при этом возникающая.

Интересуясь только длинноволновыми акустическими фононами, мы можем ограничиться первыми производными по координатам. Действительно, из формулы (XII.4.5) явствует, что каждое дифференцирование \mathbf{Q} по координатам дает множитель \mathbf{q} .

Итак, оператор H' представляет собой скаляр, линейно зависящий от первых производных вектора смещения \mathbf{Q} по координатам.

*) В гл. XII при разложении потенциальной энергии решетки в ряд по степеням смещений надо было взять квадратичные члены, ибо линейные обращались в нуль по условию минимума. В данном случае оператор H' никакими экстремальными свойствами относительно смещений, вообще говоря, не обладает и линейные члены в нуль обращаться не обязаны.

Простейшее выражение такого типа имеет вид

$$H'_{\text{ак}} = E_1 \operatorname{div} \mathbf{Q}, \quad (3.1)$$

где E_1 — некоторая постоянная. В принципе ее можно было бы вычислить, решая задачу механики об изменении энергии электрона при плавной периодической (с периодом волны) деформации решетки. Проще, однако, рассматривать E_1 как параметр теории, подлежащий определению из опыта (подобно, например, эффективной массе или ширине запрещенной зоны). Значения E_1 для электронов проводимости и для дырок, вообще говоря, различны. Соответственно мы имеем здесь не один, а два параметра, E_{1c} и E_{1v} , относящиеся, соответственно, к зоне проводимости и к валентной зоне.

Выражение (3.1) называется *потенциалом деформации*, а параметр E_1 — *константой потенциала деформации* (иногда слово «константа» опускают, относя термин «потенциал деформации» не только к правой части (3.1), но и к параметру E_1) *. Формула такого же типа описывает и изменение энергии носителя заряда при однородной статической деформации, возникающей, например, при сжатии или растяжении кристалла. Однако параметры, входящие в это последнее выражение, вообще говоря, не совпадают с E_{1c} и E_{1v} . Действительно, длина акустической волны хотя и велика по сравнению с постоянной решетки, но все же конечна, т. е. деформация, создаваемая акустической волной, всегда неоднородна.

Подставим в (3.1) выражение (XII.5.18) для вектора смещения при $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Согласно (XII.2.13) при этом вектор ξ оказывается вещественным. Согласно (XII.2.19') он еще и единичен. Таким образом,

$$H'_{\text{ак}} = \frac{iE_1}{\sqrt{G}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{s=1}^3 (\mathbf{q}, \xi(\mathbf{q}, s)) \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega(\mathbf{q}, s)}} \times \\ \times \{b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\}. \quad (3.2)$$

В рассматриваемом случае длинных акустических волн имеет смысл разделение колебаний на поперечные и продольные. Из формулы (3.2) явствует, что в рамках принятых предположений только продольные волны ($s = 1$) дают вклад в изменение энергии электрона: при $\xi(\mathbf{q}, s) \perp \mathbf{q}$ соответствующие слагаемые в (3.2) обращаются в нуль. Следовательно,

$$H'_{\text{ак}} = iE_1 \sum_{\mathbf{q}} q \sqrt{\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, 1)}} \{b(\mathbf{q}, 1) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b^*(\mathbf{q}, 1) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\}. \quad (3.3)$$

Здесь принято во внимание, что для продольных волн (снабженных индексом $s = 1$) $(\mathbf{q}, \xi(\mathbf{q}, 1)) = q$.

*) Выражение (3.1) было использовано в 1935 г. Титейкой в одной задаче теории металлов. В теорию полупроводников оно было введено независимо М. Ф. Дейгеном и С. И. Пекаром, и Дж. Бардином и В. Шокли.

Величина $\operatorname{div} \mathbf{Q}$, фигурирующая в правой части (3.1), имеет простой геометрический смысл. Как показывается в механике сплошных сред, при малых деформациях

$$\operatorname{div} \mathbf{Q} = \frac{\Delta V}{V_0}. \quad (3.4)$$

Здесь V_0 — некоторый объем в недеформированном кристалле (в качестве V_0 можно выбрать, например, объем элементарной ячейки), ΔV — его изменение при деформации, описываемой вектором \mathbf{Q} . Таким образом, $\operatorname{div} \mathbf{Q}$ есть относительное изменение объема при малой деформации.

Равенство (3.4) позволяет грубо оценить порядок величины константы E_1 . Действительно, изменение энергии электрона или дырки H' можно интерпретировать как смещение границы соответствующей зоны при деформации*). Экстраполируя формулы (3.1), (3.2) на случай не малых деформаций, видим, что E_1 есть, по порядку величины, сдвиг границы зоны при $\Delta V = V_0$, т. е. при изменении объема элементарной ячейки в два раза. Очевидно, это должна быть энергия порядка энергии электрона во внешней атомной оболочке, т. е. $|E_1| \sim 1 \div 10$ эВ. При этом знаки E_{1c} и E_{1v} в принципе могут быть любыми: в зависимости от природы кристалла дно зоны проводимости и потолок валентной зоны могут, независимо друг от друга, как подниматься, так и опускаться при сжатии (и, соответственно, опускаться или подниматься при расширении).

Согласно (3.1) и (3.4) колебания решетки, не связанные с изменением объема элементарной ячейки, не меняют энергии носителей заряда и, следовательно, не вызывают рассеяния их. Само выражение (3.1), однако, не вытекает однозначно из поставленных выше условий. Скаляр наиболее общего вида, линейно выражающийся через первые производные вектора смещения по координатам, представляет собой линейную форму

$$H'_{\text{ак}} = \sum_{s=1}^3 E_{\alpha\beta}(s) \frac{\partial Q_{\alpha, s}}{\partial x_{\beta}}. \quad (3.5)$$

Как показано в Приложении XI, величины $E_{\alpha\beta}(s)$ образуют симметричный тензор 2-го ранга (вообще говоря, свой для каждой ветви колебаний решетки). По этой причине формулу (3.5) можно переписать в виде

$$H'_{\text{ак}} = \sum_{s=1}^3 E_{\alpha\beta}(s) u_{\alpha\beta}(s), \quad (3.5')^*$$

* В рассматриваемом случае неоднородной деформации это смещение зависит от координат, что и приводит к рассеянию.

где $u_{\alpha\beta}(s) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial Q_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right)$ — компоненты тензора деформации. Формула (3.1) есть частный случай (3.5), когда тензор $E_{\alpha\beta}(s)$ вырождается в скаляр:

$$E_{\alpha\beta} = E_1 \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.6)$$

Зависимость от номера ветви при этом становится несущественной, поскольку все равно во взаимодействии с электронами участвуют только продольные фононы ($s = 1$). Заметим, однако, что формула (3.6), вообще говоря, несправедлива даже в кубическом кристалле и для точного расчета надо пользоваться общим выражением (3.5'). Благодаря условиям кристаллографической симметрии не все компоненты тензора $E_{\alpha\beta}$ независимы, но все же число параметров, подлежащих определению из опыта, здесь больше, чем в изотропном случае (3.6). Так, в n -Ge и n -Si их два (см. Приложение XI).

Утверждение об исключительной роли продольных фононов в случае (3.5) уже не имеет места. Действительно, вместо (3.3) мы получаем теперь на основании (XII.5.18)

$$H'_{ak} = i \sum_{s=1}^3 \sum_{\mathbf{q}} E_{\alpha\beta} q_{\alpha} \zeta_{\beta} \sqrt{\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)}} \{b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\}. \quad (3.7)$$

Фигурирующая здесь сумма

$$E_{\alpha\beta} q_{\alpha} \zeta_{\beta},$$

вообще говоря, не обращается в нуль при $\zeta \perp \mathbf{q}$. Соответственно поперечные акустические колебания решетки также дают вклад в рассеяние носителей заряда в анизотропном случае (3.5) (Приложение XI).

Обратимся теперь к кристаллам со сложной структурой элементарной ячейки ($r > 1$). Сформулированные выше общие условия, которым должен удовлетворять гамильтониан взаимодействия H' , остаются в силе и здесь. Отсюда следует, что энергия взаимодействия электрона с длинноволновыми акустическими фононами и в этом случае дается формулой (3.1) или ее анизотропным обобщением (3.5). В кристаллах с центром симметрии (k — числу их принадлежат германий и кремний) остаются в силе и явные формулы (3.3) или (3.7).

в. Взаимодействие носителей заряда с оптическими фононами в гомеоплярном кристалле; метод потенциала деформации. Согласно § XII.3 при длинноволновых оптических колебаниях центр тяжести элементарной ячейки почти не смещается. Соответственно здесь нет необходимости требовать, чтобы гамильтониан взаимодействия электронов с оптическими фононами выражался непременно через производные от компонент вектора смещения по координатам. Допустимым может оказаться и выражение, содержащее сам

вектор смещения:

$$H'_{\text{опт}} = \sum_{s \geq 4} \mathbf{A}(s) \mathbf{Q}_s. \quad (3.8)$$

Здесь $\mathbf{A}(s)$ — некоторый вектор, зависящий, вообще говоря, от номера ветви s ; компоненты его должны выражаться через величины, характеризующие зонную структуру носителей заряда в соответствующей идеальной решетке. Нижний предел суммирования $s = 4$ напоминает, что речь идет только об оптических фононах.

Формула (3.8) оправдана, если условия симметрии электронных (дырочных) изоэнергетических поверхностей допускают существование отличного от нуля вектора \mathbf{A} . Очевидно, для этого необходимо, чтобы некоторые направления в зоне Бриллюэна были физически выделены. Так обстоит дело, например, если минимум энергии лежит не в центре зоны Бриллюэна (таких точек минимума может быть несколько): в этом случае выделены направления, параллельные радиус-векторам, соединяющим точки минимума с точкой $\mathbf{p} = 0$. Это необходимо условие, однако, еще не является достаточным. Достаточные условия, при которых гамильтониан H' можно записать в виде (3.8), можно получить, лишь исследуя всю совокупность соотношений симметрии, характеризующих поверхности постоянной энергии. Анализ показывает, что для электронов проводимости в германии такая запись возможна, а в кремнии $\mathbf{A}(s) = 0$ *).

При $\mathbf{A}(s) = 0$ в правую часть (3.8) надо включить слагаемые с производными типа (3.5). Разумеется, их можно было бы написать и при $\mathbf{A} \neq 0$; однако в этом случае их роль была бы относительно невелика, поскольку здесь существенны только длинные волны.

Интересуясь электронами вблизи данного минимума, мы можем записать вектор \mathbf{A} в виде

$$\mathbf{A} = nE_0, \quad (3.9)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор вдоль оси, идущей из центра зоны Бриллюэна в рассматриваемый минимум, а E_0 — некоторая постоянная (размерности энергии, деленной на длину). Более общая форма (аналогичная переходу от (3.1) к (3.5)) имеет вид

$$A_\alpha = E_{\alpha\beta}^{(0)} n_\beta, \quad (3.9')$$

где $E_{\alpha\beta}^{(0)}$ — компоненты некоторого тензора. Очевидно, формула (3.9) получается из (3.9'), если этот тензор вырождается в скаляр.

Подставляя выражение (XII.5.19) в правую часть (3.8), находим окончательный вид гамильтониана взаимодействия электронов с оптическими фононами в гомеополярном кристалле:

$$H'_{\text{опт}} = \sum_{s \geq 4} \sum_{\mathbf{q}} E_{\alpha\beta}^{(0)}(s) n_\beta \zeta_\alpha \left[\frac{\hbar}{2M\Omega\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2} \{ b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \}. \quad (3.10)$$

*) Доказательство этого утверждения можно найти, например, в книге [2].

Для кубических кристаллов величину E_0 (или компоненты $E_{\alpha\beta}^{(0)}$) иногда пишут в виде произведения $E_0 b$ (или, соответственно, $E_{\alpha\beta}^{(0)} b$), где b — абсолютная величина вектора обратной решетки, а Ξ ($\Xi_{\alpha\beta}$) — новая постоянная размерности энергии. Ее называют *константой оптического потенциала деформации*.

г. *Взаимодействие носителей заряда с оптическими фононами в гетерополярном кристалле*. В гетерополярном полупроводнике атомы решетки обладают отличными от нуля эффективными зарядами. В результате оптические колебания решетки сопровождаются колебаниями дипольного момента, т. е. колебаниями вектора поляризации среды *). Это приводит к изменению энергии электрона (по сравнению с покоящейся решеткой), не связанному непосредственно с потенциалом деформации. Для длинных волн это изменение энергии легко вычислить с помощью законов электростатики.

Пусть изменение дипольного момента элементарной ячейки при смещении атомов из положения равновесия есть \mathbf{d} . Соответствующий вектор поляризации \mathfrak{P} , очевидно, равен

$$\mathfrak{P} = \frac{\mathbf{d}}{V_0}, \quad (3.11)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки (для краткости мы говорим просто «вектор поляризации» вместо «изменение вектора поляризации»).

Как известно из электростатики, наличие поляризации \mathfrak{P} означает, что в решетке имеется связанный заряд с объемной плотностью

$$\rho = -\operatorname{div} \mathfrak{P}. \quad (3.12)$$

Этот заряд создает электрическое поле, потенциал которого φ определяется из уравнения Пуассона

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi\rho,$$

или, принимая во внимание равенства (3.11) и (3.12), из уравнения

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4\pi}{V_0} \operatorname{div} \mathbf{d}. \quad (3.13)$$

Найдя отсюда φ , получим гамильтониан взаимодействия носителя заряда с поляризационными фононами:

$$H'_{\text{пол}} = \pm e\varphi. \quad (3.14)$$

Для вычисления \mathbf{d} надо специализировать природу кристалла. Мы рассмотрим кристалл кубической системы, элементарная ячейка которого содержит два атома различной химической природы. К такому типу относятся, например, щелочно-галогидные кристаллы (NaCl, KCl и др.), кристаллы типа CsCl, а также соедине-

*) По этой причине колебания рассматриваемого типа иногда называют поляризационными.

ния типа $A^{III}B^V$ — InSb, GaAs и др. Эффективные заряды атомов той и другой природы обозначим, соответственно, через Ze и $-Ze$. Число Z может быть и не целым, если химическая связь в рассматриваемом кристалле — не чисто ионная (гл. II). Очевидно,

$$\mathbf{d} = Ze [\mathbf{Q}(\mathbf{r}, 1) - \mathbf{Q}(\mathbf{r}, 2)], \quad (3.15)$$

где индексы 1, 2 нумеруют атомы ячейки, а радиус-вектор \mathbf{r} считается непрерывным (мы рассматриваем случай длинных волн). Для вектора смещения \mathbf{Q} надо подставить выражение (XII.5.19). Мы получаем

$$\mathbf{d} = Ze \sum_{s \geq 4} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2} [\xi_1(\mathbf{q}, s) - \xi_2(\mathbf{q}, s)] \times \\ \times \{b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\}. \quad (3.16)$$

Уравнение (3.13) принимает вид

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4\pi Ze}{V_0} \sum_{s \geq 4} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2} [(q\xi_1) - (q\xi_2)] \times \\ \times \{b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\}.$$

Нас интересует частное решение этого уравнения, обращающееся в нуль вместе с параметром Z . Представляя φ в виде разложения Фурье:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \{\varphi_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \varphi_{\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\},$$

легко находим

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi Ze}{V_0} \sum_{s \geq 4} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2} [(q, \xi_1) - (q, \xi_2)] \times \\ \times \{b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\}. \quad (3.17)$$

Видно, что поперечные фононы не дают вклада в правую часть (3.17): для них $(\mathbf{q}, \xi_1) = (\mathbf{q}, \xi_2) = 0$.

Поскольку в сумме по s в правой части (3.17) остается один член, мы можем вообще опустить индекс s в аргументах функций ω , ξ_1 , ξ_2 , понимая под ними только величины, относящиеся к продольным оптическим фононам. То же справедливо и для операторов b , b^* .

Задача об определении энергии взаимодействия электрона с длинноволновыми поляризационными фононами свелась теперь к вычислению разности $\xi_1 - \xi_2$ при малых значениях волнового вектора \mathbf{q} . Для этой цели воспользуемся соотношениями (XII.2.19) и (XII.3.7). При $r = 2$ и $\mathbf{q} = 0$ они принимают вид

$$M_1 \xi_1^2(0) + M_2 \xi_2^2(0) = M_1 + M_2, \quad M_1 \xi_1(0) + M_2 \xi_2(0) = 0.$$

Отсюда находим

$$\xi_1 = \left(\frac{M_2}{M_1}\right)^{1/2} \xi, \quad \xi_2 = -\left(\frac{M_1}{M_2}\right)^{1/2} \xi, \quad (3.18)$$

где ξ — единичный вектор, определяющий направление смещения первого атома при колебаниях данной ветви. Видно, что атомы действительно смещаются в противоположных направлениях.

Согласно (3.18)

$$\xi_1(0) - \xi_2(0) = \frac{M_1 + M_2}{\sqrt{M_1 M_2}} \xi. \quad (3.19)$$

Интересуясь только длинными волнами, мы можем прямо подставить это выражение в формулу (3.17) — учет зависимости $\xi_1 - \xi_2$ от q дает относительно малые поправки. Подставляя, далее, $\varphi(\mathbf{r})$ в формулу (3.14), находим окончательно

$$H'_{\text{пол}} = \pm \frac{4\pi e^2 Z}{V_0} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \frac{M_1 + M_2}{\sqrt{M_1 + M_2}} \cdot \frac{1}{q} \{ b(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b^*(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \}. \quad (3.20)$$

Здесь принято во внимание, что для продольных фононов $(\xi, \mathbf{q}) = q$.

Взаимодействие электронов с колебаниями решетки в гетерополярных кристаллах может быть обусловлено не только переменной поляризацией среды, но и потенциалом деформации. Формулы (3.1), (3.5), (3.10) при этом остаются в силе, ибо при выводе их мы не делали явных предположений о природе кристалла. Однако при не слишком малом эффективном заряде Z «поляризационное» взаимодействие (3.20) оказывается более эффективным, чем «деформационное»: силы, ответственные за возникновение энергии взаимодействия (3.20), дальнедействующие, в результате чего на электрон одновременно оказывают влияние изменения дипольного момента во многих элементарных ячейках.

д. Взаимодействие носителей заряда с пьезоэлектрическими колебаниями решетки. В ряде кристаллов механическая деформация сопровождается их электрической поляризацией и возникновением электрического поля. Такие кристаллы называются пьезоэлектрическими. Пьезоэлектрический эффект объясняется тем, что при механической деформации кристалла, решетка которого содержит разноименно заряженные ионы, отдельные подрешетки из ионов одного и того же знака могут смещаться друг относительно друга, отчего и возникает электрический момент. К числу пьезоэлектриков относятся некоторые кристаллы соединений $A^{II}B^{VI}$ (например, CdS, CdSe), $A^{III}B^{IV}$ (GaAs, InSb) и многие другие. Необходимое (но не достаточное) условие существования этого эффекта состоит в отсутствии у данной решетки центра симметрии*). При колебаниях

*) Перечень кристаллических классов, в которых возможен пьезоэлектрический эффект, можно найти в руководствах по кристаллофизике [3, М4].

решетки в пьезоэлектрических кристаллах на носители заряда действуют силы со стороны пьезоэлектрического поля, что приводит к дополнительному (к ранее рассмотренным) механизму рассеяния.

Для количественного описания пьезоэлектрического эффекта мы будем пользоваться двумя основными соотношениями.

Рассмотрим сначала простейший случай, когда эффект определяется только одной компонентой тензора деформации u . Направления электростатической индукции \mathcal{D} и электрического поля \mathcal{E} будем считать совпадающими. При малых деформациях возникающий электрический момент можно считать пропорциональным u . Полагая его равным $-\beta u$, получаем первое основное соотношение:

$$\mathcal{D} = \varepsilon \mathcal{E} - 4\pi \beta u. \quad (3.21)$$

Здесь β — пьезоэлектрический модуль данного кристалла.

Второе основное соотношение описывает так называемый обратный пьезоэлектрический эффект. Он заключается в том, что в свободном (незакрепленном) пьезоэлектрическом кристалле в электрическом поле появляется дополнительная деформация, пропорциональная первой степени поля. В случае же несвободного кристалла в нем возникают дополнительные механические напряжения. В рассматриваемом простейшем случае механическое напряжение s выражается формулой

$$s = \Lambda u + \beta \mathcal{E}, \quad (3.22)$$

где Λ — модуль упругости.

В общем случае произвольной деформации в кристалле произвольной симметрии вместо соотношения (3.21) мы получим линейное соотношение между компонентами рассматриваемых величин в виде

$$\mathcal{D}_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta} \mathcal{E}_\beta - 4\pi \beta_{\alpha, \mu\nu} u_{\mu\nu}. \quad (3.21')$$

Здесь, как и всюду выше, индексы α, β, μ, ν принимают значения x, y, z , а по дважды встречающимся индексам подразумевается суммирование. Вместо единственной величины β теперь входит совокупность величин $\beta_{\alpha, \mu\nu}$, образующих тензор пьезоэлектрических модулей 3-го ранга; этот тензор симметричен по двум последним индексам: $\beta_{\alpha, \mu\nu} = \beta_{\alpha, \nu\mu}$.

Аналогично, вместо (3.22) в общем случае справедливо соотношение

$$s_{\mu\nu} = \Lambda_{\alpha\beta; \mu\nu} u_{\alpha\beta} + \beta_{\alpha, \mu\nu} \mathcal{E}_\alpha, \quad (3.22')$$

где $\Lambda_{\alpha\beta; \mu\nu}$ — совокупность компонент тензора упругости.

Отметим, что оба соотношения (3.21') и (3.22') взаимно связаны и в них входит один и тот же тензор пьезоэлектрических модулей $\beta_{\alpha, \mu\nu}$. Это становится понятным, если рассмотреть выражение для свободной энергии деформированного пьезоэлектрического кристалла. Если \mathcal{F}_0 есть свободная энергия недеформированного кристалла, то при наличии деформации к ней добавляются два слагаемых:

энергия механической деформации и энергия поляризованного диэлектрика в электрическом поле. Записывая компоненты вектора поляризации в виде $-\beta_{\alpha, \mu\nu} u_{\mu\nu}$, т. е. исходя из соотношения (3.21'), мы имеем

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + \frac{1}{2} \Lambda_{\alpha\beta; \mu\nu} u_{\alpha\beta} u_{\mu\nu} + \beta_{\alpha, \mu\nu} u_{\mu\nu} \mathcal{E}_\alpha.$$

Так как компоненты механического напряжения определяются по формуле

$$s_{\mu\nu} = \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial u_{\mu\nu}} \right)_{T, \mathcal{E}},$$

то отсюда и получается соотношение (3.22').

Число независимых компонент тензоров $\epsilon_{\alpha\beta}$, $\beta_{\alpha, \mu\nu}$ и $\Lambda_{\alpha\beta; \mu\nu}$ определяется симметрией кристалла. Рассмотрим кубические кристаллы типа цинковой обманки (к числу их относятся, например, соединения типа $A^{III}B^V$). В них имеются три зеркально поворотные оси симметрии четвертого порядка, которые мы и выберем в качестве осей координат. Тогда ([M13], §§ 13, 17) мы имеем случай (3.21): тензор $\epsilon_{\alpha\beta}$ вырождается в скаляр $\epsilon \delta_{\alpha\beta}$, а пьезоэлектрический тензор имеет лишь одну независимую компоненту

$$\beta_{x, yz} = \beta_{z, xy} = \beta_{y, zx} = \beta; \quad \beta_{\lambda, \mu\nu} = 0 \quad \text{при } \mu = \lambda \quad \text{или } \nu = \lambda. \quad (3.23)$$

Вернемся теперь к задаче о рассеянии.

В рассматриваемом случае оператор энергии взаимодействия носителей заряда с фононами имеет вид

$$H'_{\text{пьеzo}} = \pm e\varphi. \quad (3.24)$$

Здесь верхний знак относится к дыркам, а нижний — к электронам; через φ обозначен потенциал пьезоэлектрического поля, связанный с напряженностью поля \mathcal{E} обычным равенством

$$\mathcal{E} = -\nabla\varphi. \quad (3.25)$$

Пусть ρ есть плотность объемного заряда. Тогда, пользуясь уравнением Пуассона

$$\text{div } \mathcal{D} = 4\pi\rho$$

и соотношением (3.21'), можем написать

$$\epsilon_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} + 4\pi\beta_{\alpha, \mu\nu} \frac{\partial u_{\mu\nu}}{\partial x_\alpha} = -4\pi\rho. \quad (3.26)$$

В рассматриваемом нами технологически однородном кристалле локальная нейтральность может быть нарушена только за счет пространственного перераспределения свободных носителей заряда в поле пьезоэлектрической волны. Последнее есть не что иное, как экранирование пьезоэлектрического поля. При не слишком большой концентрации свободных носителей заряда этот эффект

не играет роли и правую часть уравнения (3.26) можно заменить нулем.

Ограничимся рассмотрением пьезоэлектрических колебаний акустических ветвей. Тогда согласно (XII.5.18) в предельном случае длинных волн мы получим

$$\mu_{\mu\nu} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial Q_{\mu}}{\partial x_{\nu}} + \frac{\partial Q_{\nu}}{\partial x_{\mu}} \right) = i \sum_{\mathbf{q}} \sum_{s=1}^3 \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2} \times \\ \times \{ (\zeta_{\mu} q_{\nu} + \zeta_{\nu} q_{\mu}) b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - (\zeta_{\mu}^* q_{\nu} + \zeta_{\nu}^* q_{\mu}) b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \}. \quad (3.27)$$

Представим потенциал φ в виде разложения

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{s=1}^3 (\varphi_{\mathbf{q}s} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \varphi_{\mathbf{q}s}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}). \quad (3.28)$$

Подставляя выражения (3.27) и (3.28) в уравнение (3.26) (при $\rho = 0$), находим

$$\varphi(\mathbf{q}, s) = - \frac{4\pi\beta_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta}}{\varepsilon_{\alpha\beta} q_{\alpha} q_{\beta}} q_{\lambda} (\zeta_{\mu} q_{\nu} + \zeta_{\nu} q_{\mu}) b(\mathbf{q}, s) \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2}. \quad (3.29)$$

Специализируем это выражение на случай кристаллов типа $A^{III}B^V$, когда справедливы равенства (3.23).

Обозначим через θ и φ полярные углы вектора \mathbf{q} относительно оси Z и введем функцию

$$f(\theta, \varphi) = \zeta_x \sin 2\theta \cdot \sin \varphi + \zeta_y \sin 2\theta \cdot \cos \varphi + \zeta_z \sin^2 \theta \cdot \sin 2\varphi. \quad (3.30)$$

Тогда равенство (3.29) (с учетом (3.23)) принимает вид

$$\varphi(\mathbf{q}, s) = - \frac{4\pi\beta}{\varepsilon} f(\theta, \varphi) b(\mathbf{q}, s) \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2}. \quad (3.29')$$

Подставляя это выражение в (3.24), мы получаем

$$H'_{\text{пьезо}} = \mp \frac{4\pi\beta e}{\varepsilon} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{s=1}^3 \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2} \times \\ \times \{ f(\theta, \varphi) b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + f^*(\theta, \varphi) b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \}. \quad (3.31)$$

Легко написать и выражение для гамильтониана взаимодействия носителей заряда с пьезоэлектрическими колебаниями оптических ветвей. Для этой цели надо лишь подставить в общую формулу (XII.5.19) выражения для $\zeta_{\nu}(\mathbf{q}, s)$, вытекающие из соотношений (XII.2.19) и (XII.3.7) при $\mathbf{q} = 0$.

е. Сводка формул. Выражения (3.7), (3.10), (3.20) и (3.31) можно записать единым образом:

$$H' = \sum_{\mathbf{q}, s} \{ H'(\mathbf{q}, s) b(\mathbf{q}, s) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + H'^*(\mathbf{q}, s) b^*(\mathbf{q}, s) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \}, \quad (3.32)$$

где

$$H'(\mathbf{q}, s) = \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, s)} \right]^{1/2} B(\mathbf{q}, s), \quad (3.32')$$

а через $B(q, s)$ обозначена функция, характеризующая данный тип взаимодействия. Выражения для нее, равно как и значения s , по которым следует производить суммирование, приведены в таблице 14.1.

Таблица 14.1

Коэффициенты $B(q, s)$ для разных механизмов рассеяния

	Акустические фононы (потенциал деформации)	Акустические фононы (пьезоэлектрический потенциал)	Неполярные оптические фононы	Поляризационные (продольные) фононы
$B(q, s)$	$iE_{\alpha\beta}(s) q_{\alpha}\zeta_{\beta}$ ($iE_1(q_{\zeta}^0)$ *)	$\mp \frac{4\pi\rho e}{\epsilon} f(\theta, \varphi)$	$E_{\alpha\beta}^{(0)} n_{\beta}\zeta_{\alpha}$ ($E_0(n_{\zeta}^0)$ *)	$\frac{4\pi i Z e^2 (M_1 + M_2)}{q V_0 \sqrt{M_1 M_2}}$
Значения s	1, 2, 3	1, 2, 3	4, 5, ...	4

*) В скобках во втором и четвертом столбцах указаны упрощенные выражения, соответствующие формулам (3.3) и (3.9).

Выражение, стоящее в четвертом столбце, могло бы описывать и взаимодействие носителя заряда с фононами, ответственными за переходы между различными «долинами» в полупроводнике с несколькими эквивалентными минимумами энергии — в n -Ge, n -Si и др. Следует лишь заменить величину $E_{\alpha\beta}^{(0)} n_{\beta}\zeta_{\alpha}$ другой — также определяемой из опыта — константой размерности энергии и разрешить значку s принимать все значения, начиная с единицы. Действительно, точки в зоне Бриллюэна, отвечающие эквивалентным минимумах энергии, обычно отстоят друг от друга на расстояние, сравнимое с размерами самой зоны — близкое к постоянной обратной решетки. Следовательно и квазиволновые векторы фононов, испускаемых или поглощаемых при переходах электронов из одной «долины» в другую, должны быть по модулю порядка этой постоянной. Как мы видели в гл. XII, при этом различие между оптическими и акустическими фононами в значительной мере теряется.

§ 4. Рассеяние носителей заряда фононами

Согласно (2.19) вычисление коэффициентов \mathcal{F}_1 , \mathcal{F}_2 сводится к расчету матричного элемента

$$(\mathbf{p}', l, n' | H | \mathbf{p}, l, n) = \int dr \int \prod_{q, s} dx_{qs} \Psi_{\mathbf{p}', l, n'}^* H' \Psi_{\mathbf{p}, l, n}. \quad (4.1)$$

Как и в § 2, обозначим совокупность чисел \mathbf{p}, l, n (\mathbf{p}', l', n') через λ (λ').