

знаем, вероятности переходов с испусканием и поглощением фононов пропорциональны, соответственно, $n[\omega(\mathbf{q}, s)] + 1$ и $n[\omega(\mathbf{q}, s)]$. Таким образом, искомое обобщение получается, если в правую часть (4.22) ввести множитель

$$\frac{2}{\exp\left[\frac{\hbar\omega_0(s)}{kT}\right] - 1} + 1$$

(в данном случае $\omega(\mathbf{q}, s) = \omega_0(s)$).

Для поляризационных фононов формула (4.15') с учетом таблицы 14.1 дает

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{V_0 \sqrt{2m} B_2}{4\pi M \sqrt{\hbar\omega_0(s)}} \left[\frac{E}{\hbar\omega_0(s)} - 1 \right]^{1/2} \frac{1}{\sqrt{E(E - \hbar\omega_0(s))}} \ln \frac{\sqrt{E} + \sqrt{E - \hbar\omega_0(s)}}{\sqrt{E} - \sqrt{E - \hbar\omega_0(s)}}. \quad (4.23)$$

Здесь $B_2 = \left[\frac{4\pi Ze^2(M_1 + M_2)}{V_0 \sqrt{M_1 M_2}} \right]^2$; суммирование по s отпадает, так как в данном случае значок s отвечает только продольной ветви.

При $E - \hbar\omega_0(s) \ll E$ равенство (4.23) принимает вид, аналогичный (4.22):

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{V_0 \sqrt{2m} B_2}{2\pi M \sqrt{\hbar\omega_0(s)}} \frac{E}{E} \left[\frac{E}{\hbar\omega_0(s)} - 1 \right]^{1/2}. \quad (4.23')$$

Формулы (4.22) и (4.23') можно переписать в виде

$$\frac{1}{\tau(E)} = \sum_s \frac{1}{\tau_0(s)} \left[\frac{E}{\hbar\omega_0(s)} - 1 \right]^{1/2}, \quad (4.24)$$

где $\tau_0(s)$ — характерное время, явное выражение для которого вытекает из сопоставления правых частей (4.24) и (4.22), (4.23').

При $\hbar\omega_0(s) \gg kT$ и равновесном распределении носителей заряда по энергиям число электронов, способных испускать оптические фононы, пропорционально $\exp[-\hbar\omega_0(s)/kT]$. Следовательно, в этих условиях рассеяние, характеризующееся временами релаксации (4.22) и (4.23), столь же маловероятно, сколь и составное. Положение, однако, может измениться в достаточно сильном электрическом поле, когда электронному газу сообщается достаточно большая энергия (гл. XVI).

§ 5. Рассеяние носителей заряда примесными атомами

При рассеянии электронов неподвижными примесными атомами оператор H' имеет вид

$$H' = \sum_{i=1}^N \delta U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (5.1)$$

Здесь значок i нумерует атомы примеси, \mathbf{R}_i есть радиус-вектор i -го атома, $\delta U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ — потенциальная энергия взаимодействия электрона с ним, N — полное число атомов примеси в кристалле. Состояние решетки в данном случае не изменяется при рассеянии, поэтому сумма по n' в формуле (2.19) исчезает ($n' = n$), и мы получаем, на основании (2.19) и (5.1),

$$\mathcal{F}_2(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} V \left| \int \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) \sum_{i=1}^N \delta U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \delta(E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}')). \quad (5.2)$$

В рамках метода эффективной массы, которым мы будем пользоваться, функции Блоха $\psi_{\mathbf{p}}$ и $\psi_{\mathbf{p}'}$ следует заменить просто плоскими волнами (4.5).

Как видно из формулы (5.2), рассеяние в данном случае носит упругий характер. Причина этого ясна: мы рассматриваем атомы примеси просто как фиксированные в пространстве силовые центры, пренебрегая возможным их движением. Такая постановка задачи оправдывается большой (по сравнению с m) массой атома примеси M_t .

Подставляя в (5.2) функции $\psi_{\mathbf{p}}$ и $\psi_{\mathbf{p}'}$ в виде (4.5) и возводя в квадрат сумму в (5.2), получаем

$$\mathcal{F}_1 = \mathcal{F}_2 = \frac{2\pi}{\hbar V} (A_1 + A_2) \delta(E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}')), \quad (5.3)$$

где

$$A_1 = \sum_{j=1}^N \left| \int d\mathbf{r} \delta U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r})\right] \right|^2, \quad (5.4a)$$

$$A_2 = \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \int d\mathbf{r}_1 \delta U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r}_1)\right] \times \\ \times \int d\mathbf{r}_2 \delta U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{j'}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r}_2)\right]. \quad (5.4b)$$

Как известно из квантовой механики ([M2], § 95; [M3], § 296), выражение

$$\sigma(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left| \int d\mathbf{r} \delta U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r})\right] \right|^2 \quad (5.5)$$

представляет собой отнесенное к единице телесного угла эффективное сечение упругого рассеяния электрона силовым центром, расположенным в точке \mathbf{R}_j . Следовательно, правая часть (5.4a) описывает рассеяние электрона всеми N примесными атомами при условии, что рассеяние на каждом из них происходит независимо от всех остальных. Иначе говоря, величина A_1 характеризует рассеяние, которое имело бы место в отсутствие интерференции электронных

волн, рассеянных разными атомами примеси. Такое рассеяние называется некогерентным. Легко убедиться, что все члены, входящие в сумму по j в (5.4а), одинаковы. Действительно, произведем в каждом интеграле замену переменных, полагая

$$\mathbf{r} - \mathbf{R}_j = \mathbf{r}'. \quad (5.6)$$

Получим

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \delta U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r})\right] &= \\ &= \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{R}_j)\right] \int d\mathbf{r}' \delta U(\mathbf{r}') \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r}')\right]. \end{aligned}$$

Зависимость от значка j входит сюда только через фазовый множитель, который обращается в единицу при составлении модуля. Таким образом,

$$A_1 = N \left| \int d\mathbf{r}' \delta U(\mathbf{r}') \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r}')\right] \right|^2. \quad (5.7)$$

Заметим, что этот результат не зависит от расположения примесных атомов в решетке. Последнее влияет лишь на слагаемое A_2 , которое описывает эффект интерференции электронных волн, рассеянных различными атомами примеси. Действительно, произведем в интегралах, фигурирующих в (5.4б), замену переменных

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j = \mathbf{r}'_1, \quad \mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{j'} = \mathbf{r}'_2.$$

Тогда

$$\begin{aligned} A_2 &= \sum_{\substack{j=1 \\ (j' \neq j)}}^N \sum_{\substack{j'=1 \\ (j' \neq j)}}^N \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})\right] \times \\ &\quad \times \int \delta U(\mathbf{r}'_1) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r}'_1)\right] d\mathbf{r}'_1 \times \\ &\quad \times \int \delta U(\mathbf{r}'_2) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r}'_2)\right] d\mathbf{r}'_2 = \\ &= \frac{A_1}{N} \sum_{\substack{j, j' \\ (j' \neq j)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})\right]. \quad (5.4б') \end{aligned}$$

Вспомним теперь, что величины \mathcal{P}_1 , \mathcal{P}_2 и, следовательно, A_1 и A_2 должны быть вещественными. Составляя полусумму правой части (5.4б') и сопряженного ей выражения, находим

$$A_2 = \frac{A_1}{N} \sum_{\substack{j, j' \\ (j' \neq j)}} \cos\left(\frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar}, \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}\right). \quad (5.8)$$

Зависимость A_2 от расположения примесных атомов весьма осложняет дальнейший расчет, ибо фактические координаты примес-

ных атомов в решетке нам неизвестны. Однако при хаотическом распределении примеси в кристалле положительные и отрицательные слагаемые в правой части (5.8) будут встречаться одинаково часто. Тогда результат интерференции (5.8) обратится в нуль и атомы примеси будут рассеивать электроны и дырки независимо друг от друга *). В этих условиях, согласно (5.3) и (5.7),

$$\mathcal{F}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2\pi N}{\hbar V} \left| \int \delta U(\mathbf{r}') \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r}') \right] d\mathbf{r}' \right|^2 \delta(E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}')). \quad (5.9)$$

Отношение $N/V = N_t$ представляет собой концентрацию примеси в решетке. При $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ эта величина (а с ней и вероятность перехода) остается конечной и не зависит от размеров образца.

Выражение (5.9) имеет вид (XIII.6.1), причем

$$S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = N_t \left| \int \delta U(\mathbf{r}') \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r}') \right] d\mathbf{r}' \right|^2. \quad (5.10)$$

Если потенциальная энергия взаимодействия $\delta U(\mathbf{r}')$ изотропна, то функция S зависит только от энергии $E(\mathbf{p})$ и от угла $\theta = \widehat{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}$ — в соответствии с (XIII.6.5).

Пользуясь соотношением (5.5), можем переписать формулу (5.10) в виде

$$S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \left(\frac{2\pi\hbar^2 v}{m} \right)^2 N_t \sigma(\mathbf{p}, \mathbf{p}'). \quad (5.11)$$

При этом для времени релаксации мы получим, согласно (XIII.6.13),

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi N_t v \sqrt{2E(\mathbf{p})}}{m} \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sigma(E(\mathbf{p}), \cos \theta) \sin \theta \cdot d\theta. \quad (5.12)$$

Введение эффективного сечения рассеяния на одном центре имеет не только формальный смысл. Именно, формулы (5.5) и (5.10) получены в первом исчезающем (борновском) приближении теории возмущений. Это приближение применимо ([M2], § 95), если выполняется хотя бы одно из двух неравенств:

$$|\delta U| \ll \frac{\hbar^2}{md^2}, \quad |\delta U| \ll \frac{\hbar}{d} \sqrt{\frac{E}{m}}. \quad (5.13)$$

Здесь d — радиус действия поля $\delta U(\mathbf{r})$. В задаче о рассеянии электрона атомами заряженной примеси роль d играет радиус экранирования r_0 (см. Приложение XII), а характерное значение $|\delta U| \simeq e^2/\epsilon r_0$. Таким образом, неравенства (5.13) принимают вид

$$a_B \gg r_0, \quad \sqrt{E_B} \ll \sqrt{E}. \quad (5.14)$$

*) Более точное обоснование возможности пренебречь интерференционным членом (5.8) можно получить, вводя представление об усреднении всех наблюдаемых величин по координатам примесных атомов (см. [1], статьи №№ 5, 6 и Приложение XIII).

Здесь $a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{me^2}$, $E_B = \frac{me^4}{2e^2 \hbar^2}$ — соответственно боровский радиус и боровская энергия в кристаллической решетке, статическая диэлектрическая проницаемость которой есть ϵ . Как мы видели в гл. IV, в Ge $a_B \simeq 40 \text{ \AA}$, а $E_B \simeq 0,01 \text{ эВ}$. Отсюда видно, что первое из неравенств (5.14) может выполняться лишь при очень большой концентрации экранирующих зарядов, достигаемой в предельно сильно легированных полупроводниках (гл. XIX), а второе накладывает ограничение на температуру образца. Действительно, в отсутствие фермиевского вырождения энергия «существенных» электронов или дырок — порядка kT и мы получаем

$$E_B \ll kT. \quad (5.14')$$

В области низких температур, представляющей, как мы увидим, серьезный интерес именно в случае рассеяния на примеси, это условие может и не выполняться. При этом, благодаря малости концентрации примесных атомов, неравенство (2.22а), может все же оставаться в силе и применение кинетического уравнения, как такового, может быть оправдано. Надо лишь отказаться от борновского приближения в задаче о рассеянии одним отдельным атомом примеси. Соотношениями (5.5) и (5.10) в этом случае пользоваться уже нельзя, однако равенство (5.11), как можно показать ([1], статья № 9), сохраняет силу, если только под $\sigma(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ понимать точное сечение упругого рассеяния. Соответственно остается в силе и формула (5.12).

Все изложенное (кроме явных формул (5.14), (5.14')) относится к рассеянию носителей заряда не только атомами примеси, но и любыми другими «точечными» дефектами решетки — вакансиями, собственными атомами, смещенными в междоузлия, и т. д.

Специализируем теперь общие формулы (5.10) или (5.12) на случай рассеяния электронов и дырок атомами заряженной примеси. В германии и кремнии это могут быть, например, атомы элементов III или V групп (при температуре выше водородной), а также, при определенных условиях, атомы Li, Zn, Mn, Fe, Cu, Ni и т. д. Обозначим заряд примесного атома через Ze (целое число Z может быть как положительным, так и отрицательным). Тогда, казалось бы, потенциальная энергия должна иметь кулоновский вид (IV.7.1). На самом деле, однако, это неверно: формула (IV.7.1) несправедлива как на малых (порядка a), так и на больших расстояниях от примесного центра. Действительно, при $r \sim a$ ионизованный атом примеси уже нельзя рассматривать как точечный заряд, что предполагается в формуле (IV.7.1). Далее, при столь малых расстояниях теряет смысл использование обычной (макроскопической) диэлектрической проницаемости ϵ . С другой стороны, наличие в кристаллической решетке других свободных зарядов, а также других примесных центров приводит к экранированию всех электрических полей,

в том числе и кулоновского поля данного иона примеси. В результате изменяется сам вид функции $\delta U(\mathbf{r})$, что существенно на расстояниях, сравнимых с радиусом экранирования.

Первое из указанных только что осложнений не очень существенно, если характерная длина волны носителей заряда велика по сравнению с постоянной решетки. Действительно, при этом взаимодействие на расстояниях порядка a не играет роли: электрон нельзя локализовать в объеме, линейные размеры которого меньше длины волны. В невырожденном газе характерная длина волны есть h/\sqrt{mkT} ; в газе, полностью вырожденном, она составляет примерно $n^{-1/3}$, где n — концентрация частиц (электронов или дырок). Таким образом, в условиях, когда, в зависимости от степени вырождения,

$$\frac{h}{\sqrt{mkT}} \gg a \quad \text{или} \quad n^{-1/3} \gg a, \quad (5.15)$$

осложнениями, возникающими на расстояниях $r \sim a$, можно пренебречь.

Условия (5.15) обычно хорошо выполняются. Так, например, при $T = 300$ К и $m = m_0$ мы имеем $h/\sqrt{mkT} \simeq 10^{-6}$ см. Поэтому в дальнейшем мы не будем принимать во внимание отклонение $\delta U(\mathbf{r})$ от вида (IV.7.1) при $r \simeq a$. Соответственно для $\delta U(\mathbf{r})$ можно воспользоваться выражением, полученным в Приложении XII:

$$\delta U(\mathbf{r}) = \frac{Ze^2}{\epsilon r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right). \quad (5.16)$$

Подставляя это в правую часть (5.9), приходим к интегралу

$$\mathcal{J} = \int r^{-1} \exp\left[-\frac{r}{r_0} + \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{r})\right] dr.$$

Главную роль в нем играют значения r , близкие к r_0 . Поэтому мы вправе считать здесь объем системы бесконечно большим. Тогда интеграл легко вычисляется (в сферических координатах) и мы получаем

$$S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{32\pi^3 \hbar^3 N_i Z^2 e^4}{\epsilon^2 [\hbar^2 r_0^2 + (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2]^2}. \quad (5.17)$$

При этом, в силу упругости рассеяния, $E(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p}')$. При параболическом законе дисперсии $p^2 = 2mE(\mathbf{p})$ и, следовательно, формулу (5.17) можно переписать в виде

$$S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{32\pi^3 \hbar^3 N_i Z^2 e^4}{\epsilon^2 [\hbar^2 r_0^2 + 4mE(\mathbf{p})(1 - \cos \theta)]^2}. \quad (5.18)$$

Это есть выражение вида (XIII.6.5).

Комбинируя теперь формулы (5.11), (5.12) и (5.18), мы получаем

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{\pi N_i Z^2 e^4}{\epsilon^2 E^{3/2} \sqrt{2m}} \left[\ln(1+x) - \frac{x}{1+x} \right], \quad (5.19)$$

где

$$x = \frac{8mEr_0^2}{\hbar^2} = 16\pi^2 \frac{r_0^2}{\lambda^2}. \quad (5.20)$$

Мы ввели здесь длину волны де Бройля $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}$. В невырожденном газе при $E \simeq kT$, как и в вырожденном при $E = \zeta$, параметр x обычно оказывается большим ($x \gg 1$). Тогда формула (5.19) принимает вид

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{\pi N_i Z^2 e^4}{\varepsilon^2 E^{3/2} \sqrt{2m}} \ln \left(\frac{8mEr_0^2}{\hbar^2} \right). \quad (5.19')$$

Если формально положить здесь $r_0 \rightarrow \infty$, то обратное время релаксации τ^{-1} обратится в бесконечность, а время релаксации, подвижность и т. д. — в нуль, что, разумеется, резко противоречит опыту. Случай $r_0 \rightarrow \infty$ означает переход от дебаевского закона (5.16) к кулоновскому (IV.7.1), т. е. пренебрежение экранированием. Именно по этой причине учет экранирования в задаче о рассеянии носителей заряда атомами заряженной примеси несобходим принципиально. Заметим, однако, что точная форма закона экранирования здесь не очень существенна, ибо радиус экранирования r_0 входит только в аргумент медленно меняющейся функции — логарифма.

Заметим, что, с точностью до медленно меняющегося логарифмического множителя, формулу (5.19') можно переписать в виде (4.19); в рассматриваемом случае

$$r = +3/2. \quad (5.19'')$$

Пределы применимости формулы (5.19') определяются неравенствами (5.14) и (2.22а, б). В случае невырожденного электронного газа условие (2.22а) можно переписать в виде

$$2\pi N_i a_B^3 \ln \left(\frac{8mkT}{\hbar^2} r_0^2 \right) \ll \left(\frac{kT}{E_B} \right)^{3/2}. \quad (5.21)$$

При $E_B = 0,01$ эВ и $a_B = 4 \cdot 10^{-7}$ см это дает

$$N_i \ll 10^{13} T^{3/2},$$

причем концентрацию N_i следует измерять в см^{-3} , а температуру — в градусах Кельвина.

Условие (5.14') может оказаться довольно жестким. Так, при $E_B = 0,01$ эВ оно нарушается уже при температуре около 120 К. Соответственно возникает необходимость в расчете, не основывающемся на борновском приближении. Оказывается [4], что соответствующее время релаксации по-прежнему растет с энергией электрона, но несколько слабее, чем это предписывается формулой (5.19').

Обратимся теперь к рассеянию носителей заряда нейтральными атомами примеси. Оно может стать существенным при достаточно низких температурах, когда начинается деионизация примесных

атомов (см. § V.15); при этом в отсутствие компенсации концентрация N_i в формуле (5.19') стремится к нулю. Общая схема расчета в этом случае остается прежней. Следует лишь принять во внимание то обстоятельство, что силы взаимодействия между электронами и нейтральными атомами примеси сравнительно короткодействующие. По этой причине эффект экранирования здесь не играет заметной роли и энергию взаимодействия можно определить, рассматривая только систему «нейтральный атом примеси + электрон».

Особенно просто обстоит дело в случае примесей, описываемых водородной моделью (§ IV.7). В рамках метода эффективной массы мы получаем здесь, по существу, задачу о рассеянии электронов нейтральными атомами водорода. Последняя хорошо изучена в теории столкновений, и можно прямо воспользоваться известными результатами, заменяя лишь истинную массу электрона на эффективную и деля квадрат заряда e^2 на диэлектрическую проницаемость ϵ . Точный расчет оказывается возможным провести только численно; однако в интересной области температур для времени релаксации удается получить простую интерполяционную формулу:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{20\epsilon\hbar^3}{m^2e^2} N_0, \quad (5.22)$$

где N_0 — концентрация нейтральной примеси. Это — выражение вида (4.19) при $r = 0$. Его называют формулой Эрджинся.

§ 6. Подвижность, холл-фактор и термоэдс при различных механизмах рассеяния

Равенства (4.19), (5.19) и (5.22) в сочетании с таблицей 14.2 позволяют полностью раскрыть содержание формул гл. XIII, описывающих подвижность, термоэдс и холловский фактор газа носителей заряда. В таблице 14.3 приведены основные результаты, относящиеся к невырожденному электронному газу с параболическим законом дисперсии. Поскольку величина C в формуле (XIII.7.20') может зависеть от температуры, мы представляем дрейфовую подвижность в виде

$$\mu = AT^p, \quad (6.1)$$

где A — множитель, не зависящий или слабо (логарифмически) зависящий от температуры; p — постоянная.

Отметим, в частности, результаты, получающиеся при рассеянии носителей заряда продольными акустическими фононами и атомами заряженной примеси. В первом случае подстановка выражения (4.19) в формулу (XIII.7.20') дает

$$\mu_{\text{ак. фон}} = \frac{4e\sqrt{\pi}Mc_s^2\hbar^4}{3E_i^2V_0\sqrt{2m^5}(kT)^{3/2}}. \quad (6.2)$$