

Приложение I. К доказательству теоремы Блоха

Пусть индексы i, j, k нумеруют различные собственные функции ψ_i, ψ_j, ψ_k , принадлежащие одному и тому же собственному значению E . Производя замену аргумента $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}_n$, мы получим, вообще говоря,

$$\psi_i(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = \sum_j c_{ij} \psi_j(\mathbf{r}), \quad (\text{П.1.1})$$

где c_{ij} — некоторые коэффициенты.

Введем вместо ψ_i, ψ_j линейные комбинации их

$$\psi'_k = \sum_i b_{ki} \psi_i. \quad (\text{П.1.2})$$

Коэффициенты b_{ki} (пока неизвестные) образуют некоторую матрицу. Элементы обратной матрицы обозначим через b_{ki}^{-1} . По определению

$$\sum_k b_{jk}^{-1} b_{ki} = \delta_{ij}, \quad (\text{П.1.3})$$

где δ_{ij} — символ Кронекера (П.11.9) и, следовательно,

$$\psi_i = \sum_l b_{il}^{-1} \psi'_l. \quad (\text{П.1.2'})$$

Согласно (П.1.1) — (П.1.2')

$$\psi'_k(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = \sum_i b_{ki} \psi_i(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = \sum_{i,j} b_{ki} c_{ij} \psi_j(\mathbf{r}) = \sum_{i,j,l} b_{ki} c_{ij} b_{il}^{-1} \psi'_l(\mathbf{r}). \quad (\text{П.1.4})$$

Наложим на коэффициенты b_{ki} условия

$$\sum_{i,j} b_{ki} c_{ij} b_{jl}^{-1} = C \delta_{kl}, \quad (\text{П.1.5})$$

где C — постоянная (зависящая, может быть, от k и l). Тогда равенство (П.1.4) принимает вид

$$\psi'_k(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = C_{kn} \psi'_k(\mathbf{r}), \quad (\text{П.1.6})$$

что совпадает с (III.2.9).

Равенства (П.1.5) можно привести к более удобному виду, умножая их на b_{lk} и суммируя по l . Принимая во внимание определение (П.1.3), мы получаем при этом

$$\sum_{i,j} b_{ki} c_{ij} \delta_{jk'} = C b_{kk'}, \quad (\text{П.1.7})$$

т. е.

$$\sum_i b_{ki} c_{ik'} = C b_{kk'}.$$

Это есть система линейных однородных уравнений относительно неизвестных $b_{kk'}$. Условие разрешимости ее дает нам значения C , фигурирующие в (II.1.6), а решения — коэффициенты преобразования b_{ki} .

Таким образом, взяв произвольный набор собственных функций, принадлежащих данному собственному значению энергии, мы можем составить из них новые собственные функции — линейные комбинации (II.1.2), удовлетворяющие условию (III.2.9).

Приложение II. Интегралы с функциями Блоха

Напишем уравнение (III.4.1), а также сопряженное ему уравнение с другим собственным значением энергии E' и другим квазиимпульсом \mathbf{p}' :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 u_{\mathbf{p}l} - \frac{i\hbar}{m_0} (\mathbf{p}, \nabla u_{\mathbf{p}l}) + U u_{\mathbf{p}l} = \left(E - \frac{p^2}{2m_0} \right) u_{\mathbf{p}l}, \quad (\text{II.1.1})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 u_{\mathbf{p}'l'} + \frac{i\hbar}{m_0} (\mathbf{p}', \nabla u_{\mathbf{p}'l'}) + U u_{\mathbf{p}'l'} = \left(E' - \frac{p'^2}{2m_0} \right) u_{\mathbf{p}'l'}. \quad (\text{II.1.2})$$

При этом $E = E(\mathbf{p}, l)$, $E' = E(\mathbf{p}', l')$.

Умножим уравнение (II.1.1) на $u_{\mathbf{p}'l'}^*$, уравнение (II.1.2) — на $u_{\mathbf{p}l}$, затем вычтем почленно второе уравнение из первого и проинтегрируем результат по основному объему. Получим

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_0} \int \{ u_{\mathbf{p}'l'}^* \nabla^2 u_{\mathbf{p}l} - u_{\mathbf{p}l} \nabla^2 u_{\mathbf{p}'l'}^* \} d\mathbf{r} - \\ - \frac{i\hbar}{m_0} \int \{ u_{\mathbf{p}'l'}^* (\mathbf{p}, \nabla u_{\mathbf{p}l}) + u_{\mathbf{p}l} (\mathbf{p}', \nabla u_{\mathbf{p}'l'}^*) \} d\mathbf{r} = \\ = \left(E - E' - \frac{p^2 - p'^2}{2m_0} \right) \int u_{\mathbf{p}'l'}^* u_{\mathbf{p}l} d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (\text{II.1.3})$$

Подынтегральное выражение в первом интеграле в левой части (II.1.3) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \nabla (u_{\mathbf{p}'l'}^* \nabla u_{\mathbf{p}l}) - (\nabla u_{\mathbf{p}'l'}^*, \nabla u_{\mathbf{p}l}) - \nabla (u_{\mathbf{p}l} \nabla u_{\mathbf{p}'l'}^*) + (\nabla u_{\mathbf{p}l}, \nabla u_{\mathbf{p}'l'}^*) = \\ = \text{div} [u_{\mathbf{p}'l'}^* \nabla u_{\mathbf{p}l} - u_{\mathbf{p}l} \nabla u_{\mathbf{p}'l'}^*]. \end{aligned}$$

Получающийся интеграл можно преобразовать по теореме Гаусса:

$$\int \text{div} [u_{\mathbf{p}'l'}^* \nabla u_{\mathbf{p}l} - u_{\mathbf{p}l} \nabla u_{\mathbf{p}'l'}^*] d\mathbf{r} = \int ([u_{\mathbf{p}'l'}^* \nabla u_{\mathbf{p}l} - u_{\mathbf{p}l} \nabla u_{\mathbf{p}'l'}^*], d\mathbf{S}), \quad (\text{II.1.4})$$

где $d\mathbf{S}$ — элемент поверхности, охватывающей основной объем. В силу условий (III.3.9) абсолютная величина подынтегрального выражения на противоположных гранях куба периодичности одна и та же. Следовательно, рассматриваемый интеграл равен нулю.

Второй интеграл в левой части (П.И.3) можно переписать в виде

$$\int \{u_{\mathbf{p}'l'}^*(\mathbf{p}, \nabla u_{\mathbf{p}l}) + \nabla(u_{\mathbf{p}l} \mathbf{p}' u_{\mathbf{p}'l'}^*) - u_{\mathbf{p}'l'}^*(\mathbf{p}', \nabla u_{\mathbf{p}l})\} d\mathbf{r}.$$

Подобно (П.И.4) второе слагаемое здесь обращается в нуль. Таким образом, уравнение (П.И.3) принимает вид

$$-\frac{i\hbar}{m_0} \left(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \int u_{\mathbf{p}'l'}^* \nabla u_{\mathbf{p}l} d\mathbf{r} \right) = \left(E - E' - \frac{p^2 - p'^2}{2m_0} \right) \int u_{\mathbf{p}'l'}^* u_{\mathbf{p}l} d\mathbf{r}. \quad (\text{П.И.5})$$

При $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$ мы получаем отсюда

$$(E - E') \int u_{\mathbf{p}l'}^* u_{\mathbf{p}l} d\mathbf{r} = 0. \quad (\text{П.И.6})$$

При $l' = l$ равенство (П.И.6) удовлетворяется тождественно. Значение интеграла в левой части (П.И.6) при этом определяется условием нормировки (III.2.8). С другой стороны, при $l' \neq l$, $E(\mathbf{p}, l) \neq E(\mathbf{p}, l')$ из него вытекает условие ортогональности:

$$\int u_{\mathbf{p}l'}^* u_{\mathbf{p}l} d\mathbf{r} = 0. \quad (\text{П.И.7})$$

При $l' \neq l$, но $E(\mathbf{p}, l) = E(\mathbf{p}, l')$ имеет место вырождение: одному и тому же значению энергии отвечают две (или больше) волновые функции. Известно (см. ссылку [1] к гл. III), что эти функции всегда можно выбрать так, чтобы условие (П.И.7) удовлетворялось.

Комбинируя равенства (П.И.7) и (III.2.8), можем написать

$$\int u_{\mathbf{p}l'}^* u_{\mathbf{p}l} d\mathbf{r} = \delta_{ll'}. \quad (\text{П.И.8})$$

Здесь $\delta_{ll'}$ есть символ Кронекера:

$$\delta_{ll'} = \begin{cases} 1, & l' = l, \\ 0, & l' \neq l. \end{cases} \quad (\text{П.И.9})$$

Положим теперь в (П.И.5) $l' = l$ и будем рассматривать близкие значения \mathbf{p} и \mathbf{p}' , ограничиваясь членами, линейными по $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$. Тогда

$$E - E' \equiv E(\mathbf{p}, l) - E(\mathbf{p}', l) \simeq (\mathbf{p} - \mathbf{p}', \nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}, l)), \quad p^2 - p'^2 \simeq 2(\mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{p}'),$$

а функции $u_{\mathbf{p}'l}^*$ под знаками интегралов в левой и правой частях (П.И.5) можно заменить на $u_{\mathbf{p}l}^*$. В результате равенство (П.И.5) с учетом (III.2.8) примет вид

$$-\frac{i\hbar}{m_0} \left(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \int u_{\mathbf{p}l}^* \nabla u_{\mathbf{p}l} d\mathbf{r} \right) - (\mathbf{p} - \mathbf{p}', \nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}, l)) + \left(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \frac{\mathbf{p}}{m_0} \right) = 0. \quad (\text{П.И.5'})$$

Поскольку ориентация вектора $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ произвольна, это равенство может выполняться, только если обращается в нуль коэффициент при $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$:

$$-\frac{i\hbar}{m_0} \int u_{\mathbf{p}l}^* \nabla u_{\mathbf{p}l} d\mathbf{r} = \nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}, l) - \frac{\mathbf{p}}{m_0}. \quad (\text{П.И.10})$$

Приложение III. Таблица значений интеграла $\Phi_{1/2}$

(см. V.4.5) [1]; приведенное в таблице значение нужно умножить на 10 в степени, указанной в скобках.

ζ^*	$\Phi_{1/2}(\zeta^*)$	ζ^*	$\Phi_{1/2}(\zeta^*)$	ζ^*	$\Phi_{1/2}(\zeta^*)$
-4,0	1,8199 (-2)	-0,3	6,0022 (-1)	3,5	5,4580 (0)
-3,9	2,0099 (-2)	-0,2	6,5161 (-1)	3,6	5,6623 (0)
-3,8	2,2195 (-2)	-0,1	7,0654 (-1)	3,7	5,8699 (0)
-3,7	2,4510 (-2)			3,8	6,0806 (0)
-3,6	2,7063 (-2)	0,0	7,6515 (-1)	3,9	6,2945 (0)
		0,1	8,2756 (-1)		
-3,5	2,9880 (-2)	0,2	8,9388 (-1)	4,0	6,5115 (0)
-3,4	3,2986 (-2)	0,3	9,6422 (-1)	4,2	6,9548 (0)
-3,3	3,6412 (-2)	0,4	1,0387 (0)	4,4	7,4100 (0)
-3,2	4,0187 (-2)			4,6	7,8769 (0)
-3,1	4,4349 (-2)	0,5	1,1173 (0)	4,8	8,3550 (0)
		0,6	1,2003 (0)		
-3,0	4,8933 (-2)	0,7	1,2875 (0)	5,0	8,8442 (0)
-2,9	5,3984 (-2)	0,8	1,3791 (0)	5,2	9,3441 (0)
-2,8	5,9545 (-2)	0,9	1,4752 (0)	5,4	9,8546 (0)
-2,7	6,5665 (-2)			5,6	1,0375 (+1)
-2,6	7,2398 (-2)	1,0	1,5756 (0)	5,8	1,0906 (+1)
		1,1	1,6806 (0)		
-2,5	7,9804 (-2)	1,2	1,7900 (0)	6,0	1,1447 (+1)
-2,4	8,7944 (-2)	1,3	1,9038 (0)	6,2	1,1997 (+1)
-2,3	9,6887 (-2)	1,4	2,0221 (0)	6,4	1,2556 (+1)
-2,2	1,0671 (-1)			6,6	1,3125 (+1)
-2,1	1,1748 (-1)	1,5	2,1449 (0)	6,8	1,3703 (+1)
		1,6	2,2720 (0)		
-2,0	1,2930 (-1)	1,7	2,4035 (0)	7,0	1,4290 (+1)
-1,9	1,4225 (-1)	1,8	2,5393 (0)	7,2	1,4886 (+1)
-1,8	1,5642 (-1)	1,9	2,6794 (0)	7,4	1,5491 (+1)
-1,7	1,7193 (-1)			7,6	1,6104 (+1)
-1,6	1,8889 (-1)	2,0	2,8237 (0)	7,8	1,6725 (+1)
		2,1	2,9722 (0)		
-1,5	2,0740 (-1)	2,2	3,1249 (0)	8,0	1,7355 (+1)
-1,4	2,2759 (-1)	2,3	3,2816 (0)	8,2	1,7993 (+1)
-1,3	2,4959 (-1)	2,4	3,4423 (0)	8,4	1,8639 (+1)
-1,2	2,7353 (-1)			8,6	1,9293 (+1)
-1,1	2,9955 (-1)	2,5	3,6070 (0)	8,8	1,9954 (+1)
		2,6	3,7755 (0)		
-1,0	3,2780 (-1)	2,7	3,9480 (0)	9,0	2,0624 (+1)
-0,9	3,5841 (-1)	2,8	4,1241 (0)	9,2	2,1301 (+1)
-0,8	3,9154 (-1)	2,9	4,3040 (0)	9,4	2,1986 (+1)
-0,7	4,2733 (-1)			9,6	2,2678 (+1)
-0,6	4,6595 (-1)	3,0	4,4876 (0)	9,8	2,3378 (+1)
		3,1	4,6747 (0)		
-0,5	5,0754 (-1)	3,2	4,8653 (0)	10,0	2,4085 (+1)
-0,4	5,5224 (-1)	3,3	5,0595 (0)		
		3,4	5,2571 (0)		

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Блекмор, Статистика электронов в полупроводниках, «Мир», М., 1964.

Приложение IV. Дельта-функция

Одномерная дельта-функция Дирака $\delta(x)$ определяется соотношениями

$$\int_a^b f(x) \delta(x) dx = \begin{cases} f(0), & a < 0 < b, \\ 1/2 f(0), & a = 0 \text{ или } b = 0, \\ 0, & 0 < a < b \text{ или } a < b < 0, \end{cases} \quad (\text{П.IV.1})$$

$$\delta(x) = 0, \quad x \neq 0. \quad (\text{П.IV.2})$$

Здесь $f(x)$ — любая регулярная функция; значения пределов a и b произвольны (в частности, возможен и предельный переход $a \rightarrow -\infty$ и/или $b \rightarrow +\infty$).

Определения (П.IV.1), (П.IV.2) легко обобщаются на многомерный случай: многомерная δ -функция есть произведение одномерных. Так, если \mathbf{r} есть вектор с компонентами x, y, z , то

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x) \delta(y) \delta(z), \quad (\text{П.IV.3})$$

$$\int dx dy dz f(x, y, z) \delta(\mathbf{r}) = f(0, 0, 0) \quad (\text{П.IV.4})$$

при условии, что точка $\mathbf{r} = 0$ лежит внутри области интегрирования.

Согласно (П.IV.1) и (П.IV.2) $\delta(x)$ не относится к числу функций, рассматриваемых в классическом анализе. Действительно, интеграл

$$\int \delta(x) dx,$$

взятый по любому отрезку, содержащему точку $x=0$, конечен, в то время как «функция» $\delta(x)$ отлична от нуля лишь на множестве меры нуль. Все же определениям (П.IV.1), (П.IV.2) можно придать точный смысл, рассматривая $\delta(x)$ как символ некоторого предельного перехода, выполняемого над интегралом от регулярных функций. Так, по теореме Фурье мы имеем при любой достаточно регулярной функции $f(x)$

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{\sin ax}{x} dx = \pi f(0). \quad (\text{П.IV.5})$$

Сравнивая это соотношение с (П.IV.1), получаем следующее символическое представление δ -функции:

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin ax}{x}. \quad (\text{П.IV.6})$$

Существует много соотношений такого типа. Все они, как и (П.IV.6), приобретают точный смысл, лишь будучи проинтегрированы с какой-либо регулярной функцией *).

Из определений (П.IV.1), (П.IV.2) вытекают следующие правила преобразования δ -функций:

*) Понимая соотношение (П.IV.6) буквально, мы получили бы

$$\delta(0) = \frac{1}{\pi} \lim_{a \rightarrow \infty} a = \infty.$$

Это «соотношение» часто используется как дополнение к (П.IV.2).

1) Пусть C — постоянная. Тогда

$$\delta(Cx) = |C|^{-1} \delta(x). \quad (\text{П. IV. 7})$$

2) Пусть $\varphi(x)$ — непрерывная функция, все вещественные корни которой простые. Обозначим их через x_n ($n=1, 2, \dots$). Тогда

$$\delta[\varphi(x)] = \sum_n \frac{\delta(x-x_n)}{|\varphi'(x_n)|}. \quad (\text{П. IV. 8})$$

Можно определить и производные любого порядка от δ -функции. Действительно, пользуясь формальным правилом интегрирования по частям и соотношением (П. IV. 1), мы имеем

$$\int_a^b f(x) \delta^{(n)}(x) dx = (-1)^n f^{(n)}(0) \quad a < 0 < b, \quad (\text{П. IV. 9})$$

где n — любое целое число.

Приложение V. Рекомбинация через многозарядные ловушки

Пусть ловушка может захватывать 0, 1, 2, ..., M электронов, создавая в запрещенной зоне энергий M локальных уровней. Тогда суммарный темп захвата электронов из зоны проводимости на уровень j (при этом захваченный электрон становится j -м) можно выразить формулой, аналогичной (IX. 4.7):

$$R_{nj} = \alpha_{nj} N_t (f_{j-1} n - f_j n_j). \quad (\text{П. V. 1})$$

Здесь α_{nj} — коэффициент захвата электронов на уровень j (до захвата ловушка имела $(j-1)$ электронов); N_{ifj} и N_{ifj-1} — неравновесные концентрации ловушек в j -м и, соответственно, в $(j-1)$ -м зарядных состояниях; n_j — величина, аналогичная n_1 для однозарядных ловушек, равная (с точностью до отношения статистических весов) равновесной концентрации электронов в зоне при совпадении уровня Ферми с уровнем E_j . Совершенно так же суммарный темп захвата дырок на уровень j (до захвата дырки ловушка имела j электронов) выражается формулой, аналогичной (IX. 4.7а):

$$R_{pj} = \alpha_{pj} N_t (f_j p - f_{j-1} p_j), \quad (\text{П. V. 2})$$

где α_{pj} — коэффициент захвата дырки на уровень E_j , а p_j — равновесная концентрация дырок при совпадении уровня Ферми с уровнем E_j . Полные темпы захвата электронов и дырок на ловушки в различных зарядных состояниях равны

$$R_n = \sum_{j=1}^M R_{nj}, \quad R_p = \sum_{j=1}^M R_{pj}. \quad (\text{П. V. 3})$$

В стационарном состоянии концентрация ловушек в каждом зарядном состоянии не зависит от времени. Это дает

$$R_{n1} = R_{p1}, \quad R_{nM} = R_{pM}, \\ R_{nj} + R_{p(j+1)} = R_{n(j+1)} + R_{pj} \quad (j \neq 1, M).$$

Отсюда следует, что

$$R_{nj} = R_{pj} \quad (j=1, 2, \dots, M). \quad (\text{П. V. 4})$$

Кроме того, мы имеем еще условие постоянства полной концентрации ловушек

$$\sum_{j=0}^M f_j = 1. \quad (\text{П.V.5})$$

Написанные уравнения вполне определяют задачу. Условия (П.V.4) и (П.V.5) дают $(M+1)$ уравнений для определения всех неравновесных чисел заполнения f_j . В частности, уравнения (П.V.4) дают

$$f_j = f_{j-1} \frac{\alpha_{nj}n + \alpha_{pj}p_j}{\alpha_{nj}n_j + \alpha_{pj}p}. \quad (\text{П.V.6})$$

Подставляя это в выражения (П.V.1) и (П.V.2), после несложных преобразований получаем

$$R_{nj} = R_{pj} = R_j = (f_j + f_{j-1}) \frac{np - n_i^2}{(\alpha_{pj}N_t)^{-1}(n + n_j) + (\alpha_{nj}N_t)^{-1}(p + p_j)}. \quad (\text{П.V.7})$$

При выводе этой формулы мы считали полупроводник невырожденным и, соответственно, полагали $n_j p_j = n_i^2$, где n_i^2 есть квадрат собственной концентрации электронов.

Формула (П.V.7) выражает темп рекомбинации, обусловленный одним энергетическим уровнем ловушек. Если ловушки могут захватывать только один электрон, то $M=1$, $f_j + f_{j-1} = f_1 + f_0 = 1$ и формула (П.V.7) переходит в формулу (IX.6.6) для простых ловушек.

Полученные формулы упрощаются для малой концентрации ловушек (когда $\delta p \approx \delta n$) и малого нарушения равновесия. Тогда, полагая в формуле (П.V.7)

$$n = n_0 + \delta n, \quad p = p_0 + \delta p, \quad f_j = f_j^0 + \delta f_j$$

и удерживая только члены первого порядка малости, получаем

$$R_j = (f_j^0 + f_{j-1}^0 - 1) \frac{n_0 + p_0}{(\alpha_{pj}N_t)^{-1}(n_0 + n_j) + (\alpha_{nj}N_t)^{-1}(p_0 + p_j)} \delta n, \quad (\text{П.V.8})$$

Поэтому общее время жизни электронов и дырок τ выражается формулой

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\delta n} \sum_{j=1}^M R_j = (n_0 + p_0) \sum_{j=1}^M \frac{f_j^0 + f_{j-1}^0 - 1}{(\alpha_{pj}N_t)^{-1}(n_0 + n_j) + (\alpha_{nj}N_t)^{-1}(p_0 + p_j)}, \quad (\text{П.V.9})$$

в которую входят только равновесные концентрации носителей заряда n_0 и p_0 и равновесные числа заполнения уровней f_j^0 .

Отметим в заключение два важных предельных случая. Положим, что мы имеем сильно легированный полупроводник p -типа, так что равновесный уровень Ферми расположен ниже наинизшего уровня ловушек E_1 (как на рис. 9.8, $F = F_1$). Тогда $f_0^0 \approx 1$, а все другие $f_j^0 \ll 1$, и поэтому в формуле (П.V.9) остается только одно слагаемое с $j=1$. При этом $p_0 \gg n_0$, $n_0 \ll n_1$, $p_0 \gg p_1$. Если равновесная концентрация дырок достаточно велика, так что $(\alpha_{n1}N_t)^{-1}p_0 \gg (\alpha_{p1}N_t)^{-1}n_1$, то из формулы (П.V.9) следует, что время жизни, так же как и для простых ловушек, достигает предельного значения, не зависящего от концентрации основных носителей p_0 и равного $\tau_{n0} = (\alpha_{n1}N_t)^{-1}$.

Аналогично, для сильно легированного полупроводника n -типа, когда равновесный уровень Ферми становится выше наивысшего (M -го) уровня ловушек, мы имеем $f_M \approx 1$, $f_j \ll 1$ ($j \neq M$). Кроме того, $n_0 \gg p_0$, $n_M \ll n_0$, $p_0 \ll p_M$. Поэтому при больших концентрациях электронов, когда выполняется неравенство $(\alpha_{pM}N_t)^{-1}n_0 \gg (\alpha_{nM}N_t)^{-1}p_M$, τ становится равным другому предельному значению $\tau_{p0} = (\alpha_{pM}N_t)^{-1}$, которое тоже не зависит от концентрации основных носителей n_0 .

Приложение VI. Интеграл поверхностной проводимости

Как и в гл. X, мы ограничимся случаем невырожденных полупроводников для которых справедливы соотношения (X.2.3). Кроме того, будем считать, что доноры и акцепторы полностью ионизованы (что имеет место, например, в германии и кремнии с примесями элементов III и V групп при температурах выше температуры жидкого азота). Тогда, следуя работе [1], изменение электропроводности ΔG можно вычислить следующим образом. В рассматриваемом случае объемная плотность заряда равна

$$\rho = e [(p - p_0) - (n - n_0)] = e [p_0 (e^{-Y} - 1) - n_0 (e^Y - 1)].$$

Поэтому уравнение Пуассона для безразмерного потенциала Y

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} = -\frac{4\pi e}{\varepsilon kT} \rho$$

принимает вид

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} = -\frac{1}{L_i^2} \left[\xi (e^{-Y} - 1) - \frac{1}{\xi} (e^Y - 1) \right]. \quad (\text{П.VI.1})$$

Здесь $\xi = (p_0/n_0)^{1/2}$, а L_i — длина Дебая в собственном полупроводнике:

$$L_i^2 = \frac{\varepsilon kT}{4\pi e^2 n_i}. \quad (\text{П.VI.2})$$

Граничные условия задачи:

$$x=0: Y=Y_s; \quad x=\infty: \frac{dY}{dx} = Y = 0. \quad (\text{П.VI.3})$$

Умножая обе части уравнения (П.VI.1) на dY/dx , получаем

$$d \left(\frac{dY}{dx} \right)^2 = -\frac{2}{L_i^2} \left[\xi (e^{-Y} - 1) - \frac{1}{\xi} (e^Y - 1) \right] dY.$$

Интегрируя обе части этого уравнения от $Y=0$ до произвольного значения Y , находим

$$\frac{dY}{dx} = \frac{\sqrt{2}}{L_i} F(Y, \xi), \quad (\text{П.VI.4})$$

где

$$F(Y, \xi) = \mp \left[\xi (e^{-Y} - 1) + \frac{1}{\xi} (e^Y - 1) + \left(\xi - \frac{1}{\xi} \right) Y \right]^{1/2}. \quad (\text{П.VI.5})$$

Так как при $Y_s > 0$ потенциал Y убывает с увеличением x , то в формуле (П.VI.5) для этого случая нужно брать знак минус. При $Y_s < 0$ следует выбирать знак плюс. Формулы (П.VI.4) и (П.VI.5) выражают первый интеграл уравнения Пуассона и дают распределение градиента потенциала (электрического поля) в функции самого потенциала Y .

С другой стороны, в интегралах Γ_p и Γ_n (§ X.2) интегрирование по x можно заменить интегрированием по Y :

$$\Gamma_p = \int_0^\infty [p(x) - p_0] dx = \int_{Y_s}^0 [p(Y) - p_0] \frac{dx}{dY} dY, \quad (\text{П.VI.6})$$

$$\Gamma_n = \int_{Y_s}^0 [n(Y) - n_0] \frac{dx}{dY} dY.$$

Подставляя сюда dx/dY из формулы (П. VI.4) и выражая $p(Y)$ и $n(Y)$ по формулам (X.2.3), мы получаем для изменения проводимости ΔG выражение

$$\Delta G = c\mu_p (\Gamma_p + b\Gamma_n) = \frac{1}{\sqrt{2}} e\mu_p L_i n_i \int_{Y_s}^0 \frac{\xi (e^{-Y} - 1) + \frac{b}{\xi} (e^Y - 1)}{F(Y, \xi)} dY. \quad (\text{П. VI.7})$$

Входящий сюда «интеграл поверхностной проводимости» в общем случае не выражается аналитически и требует численных расчетов. Кривые рис. 10.7 дают значения этого интеграла (умноженного на $\xi^{1/2}$) как функцию Y_s .

Из формулы (П. VI.7) непосредственно получается величина Y_{sm} , соответствующая минимуму ΔG . Дифференцируя эту формулу по Y_s и приравнявая производную нулю, мы имеем

$$\frac{\xi (e^{-Y_{sm}} - 1) + \frac{b}{\xi} (e^{Y_{sm}} - 1)}{F(Y_{sm}, \xi)} = 0. \quad (\text{П. VI.8})$$

Условие обращения в нуль числителя приводит к квадратному уравнению относительно $\exp Y_{sm}$, которое дает два корня:

$$\exp Y_{sm} = 1, \quad \exp Y_{sm} = \xi^2/b.$$

Однако первый корень не есть решение уравнения (П. VI.8), так как при этом $F=0$. Поэтому остается только один, второй корень, который и дает формулу (X.2.5).

Найдем еще величину подвижного объемного заряда в приповерхностном слое, находящегося под единицей площади поверхности. Она равна

$$\begin{aligned} Q_V &= e (\Gamma_p - \Gamma_n) = \frac{en_i L_i}{\sqrt{2}} \int_{Y_s}^0 \frac{\xi (e^{-Y} - 1) - \frac{1}{\xi} (e^Y - 1)}{F(Y, \xi)} dY = \\ &= -\sqrt{2} en_i L_i \int_{Y_s}^0 \frac{dF(Y, \xi)}{dY} dY. \end{aligned}$$

Учитывая, что $F(0, \xi) = 0$, получаем

$$Q_V = \sqrt{2} en_i L_i F(Y_s, \xi). \quad (\text{П. VI.9})$$

В более сложных случаях, когда доноры и акцепторы не полностью ионизованы или электронный (дырочный) газ вырожден, задача решается аналогично. Примеры таких расчетов можно найти в работах [2, 3].

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Garrett, W. Brattain, Phys. Rev. **99**, 376 (1955).
2. R. Seiwatz, M. Green, Journ. Appl. Phys. **29**, 1034 (1958).
3. Ю. И. Горкун, ФТТ. **3**, 1061 (1961).

Приложение VII. Диффузия неравновесных носителей заряда в магнитном поле

Строгая теория фотоэлектромагнитного эффекта в произвольном магнитном поле требует решения кинетических уравнений Больцмана для дырок и электронов (см. например, [1]). Однако интересующие нас соотношения (XI.7.12) — (XI.7.14) можно получить из более простых феноменологических рассуждений.

Будем, как и раньше, считать полупроводник изотропным. Запишем плотности токов дырок и электронов в магнитном поле в виде

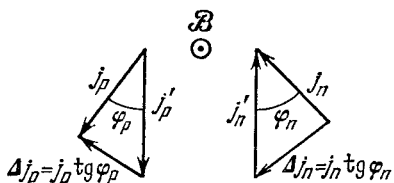


Рис. П. VII.

$$\mathbf{j}_p = \mathbf{j}'_p + \Delta \mathbf{j}_p, \quad \mathbf{j}_n = \mathbf{j}'_n + \Delta \mathbf{j}_n,$$

где

$$\mathbf{j}'_p = \sigma_p \mathbf{E} - e D_p \cdot \nabla p, \quad \mathbf{j}'_n = \sigma_n \mathbf{E} + e D_n \cdot \nabla n$$

— плотности токов, обусловленные дрейфом в электрическом поле и диффузией, а $\Delta \mathbf{j}_p$ и $\Delta \mathbf{j}_n$ — добавки, возникающие под действием силы Лоренца. Эффектом магнетосопротивления будем пренебрегать и, соответственно, считать σ и D не зависящими от магнитного поля. Так как сила в магнитном поле перпендикулярна направлению тока, то $\Delta \mathbf{j}_p \perp \mathbf{j}_p$ и $\Delta \mathbf{j}_n \perp \mathbf{j}_n$. Тогда (рис. П. VII)

$$\Delta \mathbf{j}_p = j_p \operatorname{tg} \varphi_p = j_p \frac{1}{c} \mu_{pH} \mathcal{B}, \quad \Delta \mathbf{j}_n = j_n \operatorname{tg} \varphi_n = j_n \frac{1}{c} \mu_{nH} \mathcal{B},$$

где φ_p и φ_n — абсолютные значения холловских углов. Поэтому для плотностей токов в магнитном поле мы получаем

$$\mathbf{j}_p = \mathbf{j}'_p + \frac{1}{c} \mu_{pH} [\mathbf{j}_p \times \mathcal{B}], \quad (\text{П. VII.1})$$

$$\mathbf{j}_n = \mathbf{j}'_n - \frac{1}{c} \mu_{nH} [\mathbf{j}_n \times \mathcal{B}]. \quad (\text{П. VII.2})$$

Обобщение этих соотношений для анизотропных полупроводников дано в [2]. Кроме того, мы имеем уравнение непрерывности

$$-\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_p - \frac{\delta p}{\tau_p} = 0, \quad (\text{П. VII.3})$$

$$\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n - \frac{\delta n}{\tau_n} = 0. \quad (\text{П. VII.4})$$

Применим теперь эти уравнения к задаче о пластинке в магнитном поле (§ XI.7). В дальнейшем для простоты мы положим $\mu_{nH} = \mu_n$, $\mu_{pH} = \mu_p$. Полупроводник будем считать невырожденным и, соответственно, $\mu_n/\mu_p = D_n/D_p$. Далее, для сокращения введем обозначения:

$$\frac{1}{c} \mu_n \mathcal{B} \equiv \Theta_n, \quad \frac{1}{c} \mu_p \mathcal{B} \equiv \Theta_p, \quad b \equiv \frac{\mu_n}{\mu_p}. \quad (\text{П. VII.5})$$

Тогда в координатах (направленных, как на рис. 11.15) уравнения (П. VII.1) и (П. VII.2) будут

$$b j_{px} = e \mu (p_0 + \delta p) \mathcal{E}_x + \Theta j_{py}, \quad (\text{П. VII.6})$$

$$b j_{py} = e \mu (p_0 + \delta p) \mathcal{E}_y - e D \frac{dp}{dy} - \Theta j_{px}, \quad (\text{П. VII.7})$$

$$j_{nx} = e \mu (n_0 + \delta n) \mathcal{E}_x - \Theta j_{ny}, \quad (\text{П. VII.8})$$

$$j_{ny} = e \mu (n_0 + \delta n) \mathcal{E}_y + e D \frac{dn}{dy} + \Theta j_{nx}. \quad (\text{П. VII.9})$$

Здесь величины μ , D и Θ относятся к электронам, а индекс n мы не выписываем. Уравнения непрерывности:

$$\frac{d}{dy} j_{py} = -e \frac{\delta p}{\tau_p}, \quad (\text{П.VII.10})$$

$$\frac{d}{dy} j_{ny} = e \frac{\delta n}{\tau_n}. \quad (\text{П.VII.11})$$

Кроме того, для нашей задачи

$$j_{py} + j_{ny} = 0. \quad (\text{П.VII.12})$$

Исключим из уравнений (П.VII.7) и (П.VII.9) \mathcal{E}_y и учтем соотношение (П.VII.12). Это дает

$$j_{py} [b(n_0 + \delta n) + (p_0 + \delta p)] = -eD \left[(n_0 + \delta n) \frac{dp}{dy} + (p_0 + \delta p) \frac{dn}{dy} \right] - \Theta [(n_0 + \delta n) j_{px} + (p_0 + \delta p) j_{nx}]. \quad (\text{П.VII.13})$$

Здесь, согласно уравнениям (П.VII.13) и (П.VII.11),

$$\frac{dp}{dy} = \frac{d\delta p}{dy} = -\frac{\tau_p}{e} \frac{d^2 j_{py}}{dy^2},$$

$$\frac{dn}{dy} = \frac{\tau_n}{e} \frac{d^2 j_{ny}}{dy^2} = -\frac{\tau_n}{e} \frac{d^2 j_{py}}{dy^2}.$$

Далее, используя уравнения (П.VII.6), (П.VII.8) и (П.VII.12), мы имеем

$$(n_0 + \delta n) j_{px} + (p_0 + \delta p) j_{nx} = e\mu (p_0 + \delta p) (n_0 + \delta n) \left(1 + \frac{1}{b}\right) \mathcal{E}_x + \Theta \left[\frac{1}{b} (n_0 + \delta n) + (p_0 + \delta p) \right] j_{py}.$$

Подставляя эти выражения в уравнение (П.VII.13), мы получаем для тока j_{py} дифференциальное уравнение 2-го порядка

$$D [\tau_p (n_0 + \delta n) + \tau_n (p_0 + \delta p)] \frac{d^2 j_{py}}{dy^2} - \left\{ b(n_0 + \delta n) + (p_0 + \delta p) + \Theta^2 \left[\frac{1}{b} (n_0 + \delta n) + (p_0 + \delta p) \right] \right\} j_{py} - e\mu \Theta (p_0 + \delta p) (n_0 + \delta n) \left(1 + \frac{1}{b}\right) \mathcal{E}_x = 0. \quad (\text{П.VII.14})$$

Это уравнение нелинейно, и поэтому для произвольной интенсивности света точное вычисление $j_{py}(y)$ сложно.

Для интересующего нас случая короткого замыкания $\mathcal{E}_x = 0$. Если, кроме того, освещенность не слишком велика, так что выполняются условия

$$\delta n, \delta p \ll n_0 + p_0, \quad \tau_p \delta n + \tau_n \delta p \ll \tau_p n_0 + \tau_n p_0, \quad (\text{П.VII.15})$$

то уравнение (П.VII.14) становится линейным и принимает вид

$$\frac{d^2 j_{py}}{dy^2} - \frac{1}{L^{*2}} j_{py} = 0, \quad (\text{П.VII.16})$$

где

$$L^{*2} = D_n \frac{\tau_p n_0 + \tau_n p_0}{bn_0 + p_0 + \Theta_n^2 \left(\frac{n_0}{b} + p_0 \right)}. \quad (\text{П.VII.17})$$

Поэтому для толстого образца ($j_{py}(d) \ll j_{py}(0)$) уравнение (П. VII.16) дает

$$j_{py} = j_{py}(0) e^{-y/L^*}. \quad (\text{П. VII.18})$$

Отсюда видно, что L^* есть длина диффузии в магнитном поле, на которой ток j_{py} затухает в e раз. Выражение (П. VII.17) соответствует формулам (XI.7.12)–(XI.7.14), в которых D_n выражено через коэффициент амбиполярной диффузии D и отношение подвижностей b и учтено, что $\Theta_n = b\Theta_p$.

Вычисление $j_{p0}(0)$ у освещенной поверхности производится так же, как и без магнитного поля. Однако при $\delta p \neq \delta n$ нужно учесть, что скорости поверхностной рекомбинации для дырок s_p и электронов s_n неодинаковы (§ X.5). Поэтому граничное условие будет

$$g_s = \frac{1}{e} j_{py}(0) + R_s, \quad (\text{П. VII.19})$$

где

$$R_s = s \frac{n_0}{n_0 + p_0} \delta p(0) + s \frac{p_0}{n_0 + p_0} \delta n(0), \quad (\text{П. VII.20})$$

а s есть результирующая скорость поверхностной рекомбинации на освещаемой поверхности, выражаемая формулой (X.5.8).

В формуле (П. VII.20) можно выразить $\delta p(0)$ и $\delta n(0)$ через $j_{py}(0)$, пользуясь уравнениями непрерывности (П. VII.10) и (П. VII.11) и законом затухания (П. VII.18). Это дает

$$\delta p = -\frac{\tau_p}{e} \frac{dj_{py}}{dy} = j_{py}(0) \frac{\tau_p}{eL^*} e^{-y/L^*}, \quad (\text{П. VII.21})$$

$$\delta n = -\frac{\tau_n}{e} \frac{dj_{py}}{dy} = j_{py}(0) \frac{\tau_n}{eL^*} e^{-y/L^*}. \quad (\text{П. VII.22})$$

Отсюда

$$\delta p(0) = \frac{\tau_p}{eL^*} j_{py}(0), \quad \delta n(0) = \frac{\tau_n}{eL^*} j_{py}(0). \quad (\text{П. VII.23})$$

Тогда из граничного условия (П. VII.19) получается

$$j_{py}(0) = \frac{eg_s}{1 + s\tau_{фэм}/L^*} = \frac{eg_s}{1 + sL^*/D^*}, \quad (\text{П. VII.24})$$

где $\tau_{фэм}$ определяется формулой (XI.7.13).

Подставляя в формулу (XI.7.8) j_{py} из (П. VII.18) и учитывая (П. VII.24), мы опять приходим к формуле (XI.7.9) для $i^{кз}$. Однако в данном случае время жизни пар τ везде заменяется на комбинированное время $\tau_{фэм}$, а вместо L и D входят L^* и D^* .

Остановимся еще на фотопроводимости в магнитном поле.*

Сила тока фотопроводимости есть

$$i_{фп} = e \mathcal{E}_x \int_0^d (\mu_n \delta n + \mu_p \delta p) dy. \quad (\text{П. VII.25})$$

Подставляя сюда для δp и δn их выражения (П. VII.21) и (П. VII.22) и выполняя интегрирование, находим для толстого образца

$$i_{фп} = \mathcal{E}_x \tau_{фп} (\mu_n + \mu_p) j_{py}(0), \quad (\text{П. VII.26})$$

где $\tau_{фп}$ есть введенное ранее (§ VII.4) время жизни фотопроводимости.

В методе компенсации ФЭМ эффекта и фотопроводимости (§ XI.7) мы имеем

$$\Theta L^* = \mathcal{E}_x \tau_{фп} (\mu_n + \mu_p). \quad (\text{П. VII.27})$$

В эту формулу удобно ввести новое характерное время

$$\tau_k = \frac{\tau_{\text{фп}}^2}{\tau_{\text{фэм}}} \quad (\text{П.VII.28})$$

и новую характерную длину

$$l^* = \sqrt{D^* \tau_k}. \quad (\text{П.VII.29})$$

Тогда равенство (П.VII.27) можно записать в виде

$$l^* = \frac{\Theta D^*}{\mathfrak{E}_x (\mu_n + \mu_p)} = \frac{1}{c} D^* \frac{\mathfrak{B}}{\mathfrak{E}_x}. \quad (\text{П.VII.30})$$

Оно по форме совпадает (при $\mu_{pH} = \mu_p$ и $\mu_{nH} = \mu_n$) с формулой (XI.7.11) и является обобщением последней на случай не слабого магнитного поля.

Из формул (П.VII.28) — (П.VII.30) видно, что измеряемое методом компенсации время τ_k в общем случае не совпадает ни с $\tau_{\text{фэм}}$, ни с $\tau_{\text{фп}}$. Однако при $\tau_p = \tau_n = \tau$ мы имеем $\tau_{\text{фэм}} = \tau_{\text{фп}} = \tau$, и в этом случае τ_k дает время жизни электронно-дырочных пар τ .

ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Ансельм, ЖТФ 24, 2064 (1954).
2. W. van Roosbroeck, Phys. Rev. 101, 1713 (1956).

Приложение VIII. Вычисление сумм (XII.2.6)

Согласно (XII.1.1) сумму (XII.2.6) можно переписать в виде

$$S \equiv \sum_{\mathbf{g}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}', \rho)} = \prod_{\alpha=x, y, z} \sum_{g_\alpha=0}^{G_\alpha} e^{i(k_\alpha + k'_\alpha) g_\alpha a_\alpha} \equiv \prod_{\alpha=x, y, z} S_\alpha \quad (\text{П.VIII.1})$$

(без суммирования по α в экспоненте).

Поскольку

$$L_\alpha = G_\alpha a_\alpha, \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L_\alpha} n_\alpha \quad (\alpha = x, y, z),$$

мы имеем по формуле геометрической прогрессии

$$S_\alpha = \frac{1 - \exp 2\pi i (n_\alpha + n'_\alpha)}{1 - \exp \frac{2\pi i}{L_\alpha} (n_\alpha + n'_\alpha) a_\alpha} = \begin{cases} G_\alpha, & n_\alpha + n'_\alpha = 0, \\ 0, & n_\alpha + n'_\alpha \neq 0. \end{cases} \quad (\text{П.VIII.2})$$

Подставляя это выражение в формулу (П.VIII.1), получаем результат (XII.2.6).

Приложение IX. Вывод условия ортогональности (XII.2.11)

Опуская для краткости аргумент q , перепишем еще раз уравнение (XII.2.10):

$$\sum_{\mathbf{h}, \alpha} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} \zeta_{h\alpha}(s) = \omega_s^2 M_{h'} \zeta_{h'\alpha'}(s). \quad (\text{П.IX.1})$$

С учетом вещественности ω_s^2 , вытекающей из (XII.2.10), можем написать сопряженное уравнение (при том же q и другом, вообще говоря, значении s) в виде

$$\sum_{\mathbf{h}, \alpha} (\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'})^* \zeta_{h\alpha}^*(s') = \omega_{s'}^2 M_{h'} \zeta_{h'\alpha'}^*(s'). \quad (\text{П.IX.2})$$

Умножим уравнения (П.IX.1) и (П.IX.2) соответственно на $\zeta_{h'\alpha'}^*(s')$, $\zeta_{h'\alpha'}(s)$ и просуммируем по h' , α' . Получим

$$\sum_{h', \alpha'} \sum_{h, \alpha} \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} \zeta_{h'\alpha'}^*(s') \zeta_{h\alpha}(s) = \omega_s^2 \sum_{h', \alpha'} M_{h'} \zeta_{h'\alpha'}^*(s') \zeta_{h'\alpha'}(s), \quad (\text{П.IX.1}')$$

$$\sum_{h', \alpha'} \sum_{h, \alpha} (\Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'})^* \zeta_{h'\alpha'}(s) \zeta_{h\alpha}^*(s') = \omega_{s'}^2 \sum_{h', \alpha'} M_{h'} \zeta_{h'\alpha'}^*(s') \zeta_{h'\alpha'}(s). \quad (\text{П.IX.2}')$$

Примем теперь во внимание равенство (XII.2.12) и вычтем почленно уравнение (П.IX.2') из (П.IX.1'):

$$\begin{aligned} \sum_{h, h', \alpha, \alpha'} \left\{ \Gamma_{hh'}^{\alpha\alpha'} \zeta_{h'\alpha'}^*(s') \zeta_{h\alpha}(s) - \Gamma_{h'h}^{\alpha'\alpha} \zeta_{h\alpha}^*(s') \zeta_{h'\alpha'}(s) \right\} = \\ = (\omega_s^2 - \omega_{s'}^2) \sum_{h', \alpha'} M_{h'} \zeta_{h'\alpha'}^*(s') \zeta_{h'\alpha'}(s). \end{aligned} \quad (\text{П.IX.3})$$

Выполняя во втором слагаемом в левой части (П.IX.3) замену индексов суммирования

$$h \rightleftharpoons h', \quad \alpha \rightleftharpoons \alpha',$$

видим, что оно совпадает с первым. Таким образом, равенство (П.IX.3) принимает вид

$$(\omega_s^2 - \omega_{s'}^2) \sum_{h', \alpha'} M_{h'} \zeta_{h'\alpha'}^*(s') \zeta_{h'\alpha'}(s) = 0. \quad (\text{П.IX.4})$$

Следовательно, при $\omega_s^2 \neq \omega_{s'}^2$,

$$\sum_{h', \alpha'} M_{h'} \zeta_{h'\alpha'}^*(s') \zeta_{h'\alpha'}(s) = 0. \quad (\text{П.IX.5})$$

При однозначной зависимости s от ω_s^2 отсюда вытекает условие (XII.2.11). В противном случае частоты могут оказаться одинаковыми и при $s' \neq s$. Это, однако, означает вырождение: одному и тому же значению ω_s^2 будет отвечать несколько решений $\zeta_{h\alpha}(s)$ уравнения (XII.2.10). Всегда можно выбрать такую их линейную комбинацию, чтобы равенство (П.IX.5), т. е. условие (XII.2.11), все же удовлетворялось при $s' \neq s$.

Приложение X. Переход от суммирования по дискретным компонентам квазиимпульса к интегрированию

Рассмотрим сумму

$$S = \sum_{n_x, n_y, n_z} f(\mathbf{p}), \quad (\text{П.X.1})$$

где $f(\mathbf{p})$ — любая регулярная функция, $p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x$, $p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_y$, $p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_z$, а n_x, n_y, n_z — положительные или отрицательные целые числа или нули. Разность между соседними значениями p_α ($\alpha = x, y, z$) составляет

$$\Delta p_\alpha = \frac{2\pi\hbar}{L}.$$

Таким образом, выражение (П.X.1) можно переписать в виде

$$S = \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 \sum_{n_x, n_y, n_z} f(\mathbf{p}) \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z. \quad (\text{П.X.2})$$

Пусть при $L \rightarrow \infty$ функция $f(\mathbf{p})$ не зависит от L . В правой части (П.Х.2) стоит интегральная сумма, и при $L \rightarrow \infty$ мы получаем

$$S = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int f(\mathbf{p}) d\mathbf{p}, \quad V = L^3. \quad (\text{П.Х.3})$$

Величина S/V при этом остается конечной и не зависит от V .

Соотношение (П.Х.3) составляет правило перехода от суммирования по n_x, n_y, n_z к интегрированию по трехмерному \mathbf{p} -пространству. Такое же правило применимо и в случае одного или двух измерений: надо лишь заменить в (П.Х.3) $V = L^3$ на L или L^2 , а тройной интеграл — на однократный или двойной.

Приложение XI. Гамильтониан взаимодействия электронов с акустическими фононами

Согласно (XIV.3.5) напомним гамильтониан взаимодействия электронов с акустическими фононами в виде (опускаем временно сумму по s):

$$H' = E_{\alpha\beta} \frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\beta}. \quad (\text{П.Х.1.1})$$

Не предполагая пока симметричности тензора $E_{\alpha\beta}$, представим его в виде суммы симметричной и антисимметричной частей:

$$E_{\alpha\beta} = E_{\alpha\beta}^s + E_{\alpha\beta}^a, \quad (\text{П.Х.1.2})$$

где

$$E_{\alpha\beta}^s = \frac{1}{2} (E_{\alpha\beta} + E_{\beta\alpha}), \quad E_{\alpha\beta}^a = \frac{1}{2} (E_{\alpha\beta} - E_{\beta\alpha}). \quad (\text{П.Х.1.3})$$

Соответственно

$$H' = \frac{1}{2} E_{\alpha\beta}^s \left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial Q_\beta}{\partial x_\alpha} \right) + \frac{1}{2} E_{\alpha\beta}^a \left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{\partial Q_\beta}{\partial x_\alpha} \right). \quad (\text{П.Х.1.4})$$

Компоненты антисимметричного тензора можно представить в виде [1]

$$E_{\alpha\beta}^a = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} A_\gamma, \quad (\text{П.Х.1.5})$$

где A_γ — компоненты некоторого псевдовектора, а $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — совершенно антисимметричный единичный тензор ($\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = -\varepsilon_{\beta\alpha\gamma} = -\varepsilon_{\alpha\gamma\beta}$; $\varepsilon_{123} = 1$).

Замечая, что, по определению операции взятия вихря,

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\beta} - \frac{\partial Q_\beta}{\partial x_\alpha} \right) = (\text{rot } \mathbf{Q})_\gamma, \quad (\text{П.Х.1.6})$$

можем переписать второе слагаемое в правой части (П.Х.1.4) в виде

$$\frac{1}{2} (\mathbf{A}, \text{rot } \mathbf{Q}). \quad (\text{П.Х.1.7})$$

Как известно, если компоненты $\text{rot } \mathbf{Q}$ не зависят от координат, то выражение $\text{rot } \mathbf{Q}$ описывает не деформацию, а поворот тела как целого. Соответственно слагаемое вида (П.Х.1.7) не может входить в выражение для энергии взаимодействия электронов с фононами*), и антисимметричная часть тензора $E_{\alpha\beta}$ тождественно равна нулю:

$$\mathbf{A} = 0, \quad E_{\alpha\beta} = E_{\alpha\beta}^s. \quad (\text{П.Х.1.8})$$

*) Этот вывод может быть несправедлив, если вектор \mathbf{Q} описывает заведомо неоднородную деформацию, созданную, например, дислокацией.

Гамильтониан H' сводится к произведению некоторого постоянного симметричного тензора на тензор деформации:

$$H' = \frac{1}{2} E_{\alpha\beta}^s \left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial Q_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \equiv E_{\alpha\beta} \frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\beta}. \quad (\text{П. XI.9})$$

Тензор $E_{\alpha\beta}$ называется иногда тензором потенциалов деформации; компоненты его суть потенциалы деформации.

Приведем тензор $E_{\alpha\beta}$ к главным осям, обозначив главные его значения через E_α . Тогда соотношение (П. XI.9) примет вид

$$H' = \sum_{\alpha=x, y, z} E_\alpha \frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\alpha}. \quad (\text{П. XI.10})$$

Формула (П. XI.10) превращается в (XIV.3.1), если тензор $E_{\alpha\beta}$ вырождается в скаляр, т. е. если $E_x = E_y = E_z = E_1$. Так обстоит дело в кубическом кристалле, если дно зоны проводимости лежит в центре зоны Бриллюэна. Главные оси в данном случае суть оси $[100]$, $[010]$ и $[001]$ в обратной решетке.

Оговорка о расположении минимума зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна весьма существенна. Действительно, в других точках зоны Бриллюэна симметрия системы, вообще говоря, ниже кубической: имеется физически выделенное направление вдоль радиус-вектора, связывающего данную точку с центром зоны. Главные оси тензора $E_{\alpha\beta}$ здесь уже не обязаны совпадать с осями куба и могут оказаться неэквивалентными. Соответственно тензор $E_{\alpha\beta}$ может и не вырождаться в скаляр даже в кубическом кристалле. Так, в частности, обстоит дело для электронов в германии и кремнии. Формулу (П. XI.9) для такой «многоэллипсоидной» системы следует писать в виде

$$H' = \sum_j E_{\alpha\beta}(j) \frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_\beta}, \quad (\text{П. XI.9}')$$

где индекс j нумерует эллипсоиды и симметричный тензор $E_{\alpha\beta}(j)$ описывает взаимодействие фононов с электронами, находящимися вблизи j -го минимума энергии. Очевидно, все эти тензоры получаются один из другого преобразованием симметрии, переводящим друг в друга соответствующие минимумы; поэтому достаточно рассмотреть структуру лишь одного из них.

Естественно ожидать, что главные оси $E_{\alpha\beta}(j)$ будут совпадать с осями j -го эллипсоида. Соответственно, выбирая ось вдоль большой оси эллипсоида, можем написать (опуская для краткости индекс j)

$$E_{xx} = E_{yy} = E', \quad E_{zz} = E'' \neq E'. \quad (\text{П. XI.11})$$

Подставляя в (П. XI.9') вектор смещения Q в виде (XII.5.18) и приводя тензор $E_{\alpha\beta}(j)$ к главным осям, получаем под знаком суммы по j , q выражения

$$E'(q_x \xi_x + q_y \xi_y) + E'' q_z \xi_z. \quad (\text{П. XI.12})$$

Рассмотрим отдельно случаи взаимодействия электронов с продольными и поперечными фононами.

Для продольных фононов по определению векторы q и ξ параллельны, т. е.

$$q = \frac{\xi}{|\xi|} |q|. \quad (\text{П. XI.13})$$

Соответственно выражение (П. XI.12) примет вид

$$q |\xi| \left\{ E' - (E' - E'') \frac{\xi_z^2}{|\xi|^2} \right\} \equiv q |\xi| \{ E' - (E' - E'') \cos^2 \theta \}, \quad (\text{П. XI.14a})$$

где θ — полярный угол вектора ξ в системе координат с полярной осью, параллельной главной оси рассматриваемого эллипсоида.

Для поперечных фононов мы имеем $(\mathbf{q}, \xi) = 0$ и выражение (П.ХІ.12) принимает вид

$$(E' - E'') (q_x \xi_x + q_y \xi_y) = (E' - E'') q \xi \sin \theta \cdot \sin \alpha \cdot \cos (\varphi - \beta). \quad (\text{П.ХІ.14б})$$

Здесь θ и φ — полярные углы вектора ξ , α и β — полярные углы вектора \mathbf{q} в прежней системе координат.

Видим, что в данном случае тензор потенциала деформации определяется двумя независимыми константами. В качестве таковых можно выбрать, например, $E' - E'' = \Xi_t$ и $E' = \Xi_t$.

Подробную теорию потенциала деформации в применении к электронам проводимости в германии и кремнии можно найти в работе [2].

Особенно сложной становится теория потенциала деформации в случае вырожденных зон. Соответствующие результаты можно найти в книге [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Механика, Физматгиз, М., 1958.
2. С. Herring, E. Vogt, Phys. Rev. 101, 944 (1956) (см. русский перевод в сб. «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, М., 1957).
3. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, гл. V, «Наука», 1972.

Приложение XII. Потенциал заряженного центра при учете экранирования свободными носителями заряда

Как показано в § VI.6, для вычисления потенциала φ с учетом экранирования надо решить уравнение Пуассона, в правой части которого фигурирует заряд экранирующих носителей, сам зависящий от φ . В гл. VI соответствующий расчет был выполнен для невырожденного газа при условии, что концентрация носителей заряда и потенциал зависят только от одной координаты. Здесь мы рассмотрим трехмерный случай при произвольной степени вырождения. Пусть, для определенности, образец будет n -типа со средней концентрацией электронов, равной n_0 . Концентрация электронов проводимости вблизи примесного иона дается формулой (V.4.4a). Допустим, что в области, нас интересующей, $e\varphi/kT \ll 1$ (это неравенство может и не иметь места; при этом расчет несколько усложняется). Тогда функцию $\Phi_{1/2} \left(\frac{\xi + e\varphi}{kT} \right)$ в (V.4.4a) можно заменить первыми двумя членами разложения в ряд Тэйлора:

$$\Phi_{1/2} \left(\frac{\xi + e\varphi}{kT} \right) \simeq \Phi_{1/2} \left(\frac{\xi}{kT} \right) + \frac{e\varphi}{kT} \frac{d\Phi_{1/2}(z)}{dz} \Big|_{z=\xi/kT}.$$

Соответственно вместо (V.4.4a) мы получим

$$n(r) = n_0 + N_c \frac{e\varphi}{kT} \Phi'_{1/2} \left(\frac{\xi}{kT} \right), \quad (\text{П.ХІІ.1})$$

где $\Phi'_{1/2}(z) = d\Phi(z)/dz$. Уравнение Пуассона примет вид

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4\pi e^2 N_c}{\epsilon kT} \Phi'_{1/2} \left(\frac{\xi}{kT} \right) \varphi. \quad (\text{П.ХІІ.2})$$

Введем обозначение

$$r_0^{-3} = \frac{4\pi e^2 N_c}{\epsilon kT} \Phi'_{1/2} \left(\frac{\xi}{kT} \right) \quad (\text{П.ХІІ.3})$$

и перепишем уравнение (П.ХИ.2) для потенциальной энергии электрона $\delta U = -e\varphi$:

$$\nabla^2 \delta U = r_0^{-2} \delta U. \quad (\text{П.ХИ.4})$$

Пусть примесный ион (с зарядом Ze) помещен в начале координат ($r=0$). Тогда при $r \rightarrow 0$ решение уравнения (П.ХИ.4) должно иметь кулоновский вид (IV.7.1). С другой стороны, при $r \rightarrow \infty$ потенциальная энергия $\delta U(r)$ должна убывать по абсолютной величине. Естественно считать также, что функция $\delta U(r)$ будет сферической симметричной. Анизотропия изоэнергетических поверхностей, если она есть, в данном случае «смазывается» благодаря суммированию по всем минимумам, неявно выполненному в правой части (V.4.4a). Решение (П.ХИ.4), удовлетворяющее поставленным условиям, имеет вид

$$\delta U(r) = \frac{Ze^2}{\epsilon r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right). \quad (\text{П.ХИ.5})$$

Величина r_0 , определяемая равенством (П.ХИ.3), имеет размерность длины и называется *радиусом экранирования*. Как видно из формул (П.ХИ.1) и (П.ХИ.5), она определяет размеры области, в которой в основном находится экранирующий заряд. Видно, что при $r \gg r_0$ потенциальная энергия $\delta U(r)$ быстро убывает по абсолютной величине и система «заряженный центр + экранирующие носители» ведет себя как нейтральная.

Выражение (П.ХИ.3) заметно упрощается, если рассматривать невырожденный или, наоборот, полностью вырожденный газ. Как показано в §§ V.5, V.6, в первом случае мы имеем

$$\Phi_{1/2}\left(\frac{\zeta}{kT}\right) = \exp\left(\frac{\zeta}{kT}\right) \quad \text{и} \quad \exp\frac{\zeta}{kT} = \frac{n_0}{N_c},$$

а во втором случае

$$\Phi_{1/2}\left(\frac{\zeta}{kT}\right) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\zeta}{kT}\right)^{3/2} \quad \text{и} \quad \zeta = \frac{(3\pi^2 n_0)^{2/3} \hbar^2}{2m_d}.$$

Соответственно в невырожденном полупроводнике

$$r_0 = \left(\frac{\epsilon kT}{4\pi n_0 e^2}\right)^{1/2}, \quad (\text{П.ХИ.6a})$$

а в условиях полного вырождения

$$r_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/6} \left(\frac{\epsilon \hbar^2}{m_d e^2} n^{-1/3}\right)^{1/2}. \quad (\text{П.ХИ.6б})$$

При наличии экранирующих носителей заряда обоих знаков формулы (П.ХИ.3) и (П.ХИ.6a, б) несколько изменяются. Выражение (П.ХИ.5), однако, остается в силе, коль скоро $\frac{|\delta U|}{kT} \ll 1$ или $\frac{|\delta U|}{\zeta} \ll 1$. Так же обстоит дело и при других механизмах экранирования (последнее может быть обусловлено, например, корреляцией в пространственном распределении примесных атомов, возникающей при введении их в решетку)*.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Займан, Принципы теории твердого тела, изд. 2. «Мир», М., 1974.

* В металлах, где мы можем иметь сильно вырожденный электронный газ при сравнительно малой концентрации примеси, вид функции $\delta U(r)$ отличается от (П.ХИ.5) [1].

Приложение XIII. Усреднение по координатам примесных атомов

Вероятность перехода (XIV.5.3) зависят, очевидно, от $3N$ координат примесных атомов:

$$\mathcal{P}_1 = \mathcal{P}_2 = \mathcal{P} = \mathcal{P}(p, p'; R_1, \dots, R_N). \quad (\text{П. XIII.1})$$

Точный вид этой зависимости характеризует данный конкретный образец и обычно не представляет физического интереса. Используя совокупность большого числа кристаллов, мы получим среднее значение

$$\langle \mathcal{P} \rangle = \int \mathcal{P}(p, p'; R_1, \dots, R_N) F(R_1, \dots, R_N) dR_1 \dots dR_N. \quad (\text{П. XIII.2})$$

Здесь интегрирование по каждой из координат R_1, \dots производится в пределах основного объема (куба) V ; $F(R_1, \dots, R_N) dR_1 \dots dR_N$ есть вероятность обнаружить 1-й, 2-й, ... атомы примеси, соответственно, в элементах объема dR_1, dR_2, \dots, dR_N около точек R_1, R_2, \dots, R_N . Она удовлетворяет очевидному условию

$$\int F(R_1, R_2, \dots, R_N) dR_1 dR_2 \dots dR_N = 1. \quad (\text{П. XIII.3})$$

Заметим, что роль «совокупности большого числа кристаллов» может играть и совокупность многих малых объемов, на которые можно разбить данный (достаточно большой) образец. Действительно, каждый из таких объемов можно охарактеризовать, вообще говоря, своей конфигурацией примеси; макроскопический же опыт относится ко всему кристаллу, и, следовательно, в нем автоматически производится усреднение, описываемое формулой (П. XIII.2) *).

Пока концентрация атомов примеси не слишком велика, вероятности попадания их в те или иные элементы объема можно считать независимыми:

$$F(R_1, \dots, R_N) = f(R_1) \dots f(R_N), \quad (\text{П. XIII.4})$$

причем

$$\int f(R_i) dR_i = 1, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (\text{П. XIII.3'})$$

Строго говоря, представление вероятности $F(R_1, \dots, R_N)$ в виде (П. XIII.4) носит приближенный характер. Так, здесь не исключена возможность одновременного попадания многих атомов примеси в один и тот же узел решетки, что физически невозможно. Если, однако, среднее расстояние между атомами примеси $N_i^{-1/3}$ заметно превышает постоянную решетки a , то такие события будут сравнительно редкими. Поэтому учет корреляции в расположении примесных атомов, исключаяющий названную «нефизическую возможность», практически несуществен и аппроксимация (П. XIII.4) достаточна для вычисления кинетических коэффициентов. Более того, в макроскопически однородной системе примесный атом с одинаковой вероятностью может попасть в любую точку кристалла, т. е. функция f фактически есть константа. Согласно условию нормировки (П. XIII.3')

$$f = V^{-1}. \quad (\text{П. XIII.5})$$

Итак, при не слишком большой концентрации примеси ($N_i^{-1/3} \gg a$) в макроскопически однородной системе

$$\langle \mathcal{P} \rangle = \frac{1}{V^N} \int \mathcal{P}(p, p'; R_1, \dots, R_N) dR_1 \dots dR_N. \quad (\text{П. XIII.6})$$

*) Речь идет о кристалле, макроскопически однородном, и о макроскопически однородных условиях опыта. В макроскопически неоднородной системе (например, в кристалле с $n-p$ -переходом) интегрирование в (П. XIII.2) удобно производить особо для каждой однородной области.

Подставляя сюда выражение (XIV.5.3), получаем

$$\langle \mathcal{F}^0 \rangle = \frac{2\pi}{\hbar V} \delta(E(p) - E(p')) (\langle A_1 \rangle + \langle A_2 \rangle). \quad (\text{П. XIII.6}')$$

Поскольку A_1 не зависит от координат примесных атомов,

$$\langle A_1 \rangle = \frac{1}{V^N} \int d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N A_1 = A_1. \quad (\text{П. XIII.7})$$

Далее, согласно (XIV.5.8)

$$\begin{aligned} \langle A_2 \rangle &\equiv \\ &= \left| \int \delta U(r') e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}', r')} d\mathbf{r}' \right|^2 \sum_{\substack{i, j \\ (i \neq j)}} \frac{1}{V^N} \int \cos\left(\frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}{\hbar}, \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\right) d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N. \end{aligned}$$

Очевидно, все члены суммы по i, j здесь одинаковы, ибо отличаются друг от друга только заменой переменных интегрирования. Пусть $i=1, j=2$. Тогда интегралы по $\mathbf{R}_3, \dots, \mathbf{R}_N$ сразу берутся, и мы получаем, принимая во внимание, что полное число членов в сумме равно $N(N-1)$,

$$\begin{aligned} \langle A_2 \rangle &= \frac{N(N-1)}{V^2} \left| \int \delta U(r') \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}', r')\right] d\mathbf{r}' \right|^2 \times \\ &\quad \times \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \cos\left(\frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}{\hbar}, \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2\right). \quad (\text{П. XIII.8}) \end{aligned}$$

Введем вместо \mathbf{R}_1 и \mathbf{R}_2 новые переменные интегрирования

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2), \quad \mathbf{R}' = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2.$$

Тогда фигурирующей в (П. XIII.8) интеграл по \mathbf{R}_1 и \mathbf{R}_2 примет вид

$$\int \cos\left(\frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}{\hbar}, \mathbf{R}'\right) d\mathbf{R} d\mathbf{R}' = V \prod_{\alpha=x, y, z} \frac{2\hbar}{(p_\alpha - p'_\alpha)} \sin\left(\frac{p_\alpha - p'_\alpha}{2\hbar} L\right), \quad (\text{П. XIII.9})$$

где L есть ребро куба.

При неограниченном возрастании размеров системы правая часть (П. XIII.9) стремится к произведению δ -функций

$$V \prod_{\alpha} \pi \delta\left(\frac{p_\alpha - p'_\alpha}{2\hbar}\right).$$

Таким образом, при $N \rightarrow \infty$ величина $\langle A_2 \rangle$ отлична от нуля лишь при $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$, т. е. когда рассеяние отсутствует. Иначе говоря, вклад в рассеяние от этого слагаемого — порядка $1/V$, и для макроскопической системы им можно пренебречь. Окончательно:

$$\langle \mathcal{F}^0 \rangle = \frac{2\pi}{\hbar V} A_1 \delta(E(p) - E(p')). \quad (\text{П. XIII.10})$$

В основном тексте книги мы опускаем угловые скобки, понимая под всеми величинами типа (П. XIII.1) только усредненные их значения.

Вычислим среднее значение квадрата флуктуации потенциальной энергии электрона в поле одинаковых хаотически расположенных ионов примеси. Сог-

ласно (XIV.5.1) эта энергия дается выражением

$$H' = \sum_{i=1}^N \delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (\text{П. XIII.11})$$

Представим правую часть (П. XIII.11) в виде

$$\langle H' \rangle + \delta H',$$

где $\delta H'$ — интересующая нас флуктуация энергии, а $\langle H' \rangle$ — среднее (по координатам примесных ионов) значение H' :

$$\langle H' \rangle = \frac{1}{V^N} \int H' d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N. \quad (\text{П. XIII.12})$$

В силу (П. XIII.11) в правой части (П. XIII.12) фигурирует сумма N одинаковых слагаемых. Следовательно, это соотношение можно переписать в виде

$$\langle H' \rangle = N_t \int \delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}) d\mathbf{R}. \quad (\text{П. XIII.13})$$

Интеграл в правой части (П. XIII.13) есть некоторая постоянная, зависящая от явного вида экранированного потенциала δU . Обозначив ее через u_0 , имеем *)

$$\delta H' = \sum_{i=1}^N \delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) - N_t u_0. \quad (\text{П. XIII.14})$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \langle (\delta H')^2 \rangle \equiv \psi_1 = V^{-N} \int & \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) - \right. \\ & \left. - 2N_t u_0 \sum_{i=1}^N \delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) + N_t^2 u_0^2 \right\} d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N. \quad (\text{П. XIII.15}) \end{aligned}$$

Очевидно, второе и третье слагаемые в правой части (П. XIII.15) в сумме составляют

$$-2N_t^2 u_0^2 + N_t^2 u_0^2 = -N_t^2 u_0^2. \quad (\text{П. XIII.16})$$

В двойной сумме по i, j удобно выделить слагаемые с $i=j$. Тогда первый член в правой части (П. XIII.15) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} V^{-N} \int & \left\{ \sum_{i=1}^N [\delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)]^2 + \sum_{\substack{i, j=1 \\ i \neq j}}^N \delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \right\} d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N = \\ & = N_t \int [\delta U (\mathbf{r} - \mathbf{R})]^2 d\mathbf{R} + \frac{N(N-1)}{V^2} u_0^2. \quad (\text{П. XIII.17}) \end{aligned}$$

*) Фактически в макроскопически однородном образце второе слагаемое в (П. XIII.14) следует отбросить в силу условия полной нейтральности материала. Действительно, заряд примесных ионов точно компенсируется свободными электронами и дырками (либо — в условиях компенсации — ионами другого знака). Следовательно, к выражению (П. XIII.11) надо добавить еще постоянное слагаемое, описывающее энергию взаимодействия электрона с размазанным в пространстве зарядом всех других электронов и дырок. Можно доказать, что это слагаемое равно $-N_t u_0$. При вычислении интересующей нас величины $\langle (\delta H')^2 \rangle$ это, однако, не играет роли.

Асимптотически при $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N_t = \frac{N}{V} < \infty$ правая часть (П. XIII.17) принимает вид

$$N_t \int [\delta U(\mathbf{r} - \mathbf{R})]^2 d\mathbf{R} + N_t^2 u_0^2. \quad (\text{П. XIII.17}')$$

Очевидно, интеграл по \mathbf{R} здесь не зависит от \mathbf{r} : можно ввести новую переменную $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{R}$. Складывая выражения (П. XIII.16) и (П. XIII.17'), мы получаем

$$\psi_1 = N_t \int [\delta U(\mathbf{r}')]^2 d\mathbf{r}'. \quad (\text{П. XIII.18})$$

Пусть, например, потенциальная энергия электрона в поле одного заряженного центра описывается формулой (П. XII.5)

$$\delta U(\mathbf{r}') = \frac{Ze^2}{\epsilon r'} \exp\left(-\frac{r'}{r_0}\right). \quad (\text{П. XIII.19})$$

Подставляя это выражение в (П. XIII.18), находим

$$\psi_1 = \frac{2\pi Z^2 e^4 N_t r_0}{\epsilon^2}. \quad (\text{П. XIII.20})$$

Приложение XIV. Теорема об интеграле от периодической функции

Рассмотрим выражение

$$\mathcal{Z} = \int e^{i\mathbf{f}\mathbf{r}} \Phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (\text{П. XIV.1})$$

где $\Phi(\mathbf{r})$ — функция, периодическая с периодом решетки \mathbf{a} , \mathbf{f} — некоторый вектор, а интеграл берется по фундаментальному объему. Компоненты \mathbf{f} подчиняются условиям периодичности вида (III. 3.10).

Произведем в (П. XIV.1) замену переменных, полагая

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{a}.$$

Получим, с учетом свойства периодичности функции Φ ,

$$\mathcal{Z} = \exp(i\mathbf{f}\mathbf{a}) \int e^{i\mathbf{f}\mathbf{r}'} \Phi(\mathbf{r}' + \mathbf{a}) d\mathbf{r}' = \exp(i\mathbf{f}\mathbf{a}) \int e^{i\mathbf{f}\mathbf{r}'} \Phi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (\text{П. XIV.2})$$

В правой части (П. XIV.2) стоит прежний интеграл \mathcal{Z} ; таким образом,

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z} \exp(i\mathbf{f}\mathbf{a}).$$

Отсюда явствует, что интеграл \mathcal{Z} может быть отличен от нуля, лишь если $\exp(i\mathbf{f}\mathbf{a}) = 1$, т. е.

$$\mathbf{f} = \mathbf{b}m, \quad (\text{П. XIV.3})$$

где \mathbf{b} — вектор обратной решетки, а m — целое число или нуль.

Приложение XV. Интегралы с функцией Ферми в условиях сильного вырождения

Рассмотрим интеграл

$$\mathcal{Z} = \int_0^{\infty} \varphi(E) f'_0(E) dE. \quad (\text{П. XV.1})$$

где $\varphi(E)$ — некоторая гладкая функция энергии, а $f'_0 = \frac{df_0}{dE}$. В условиях сильного вырождения функция $f'_0(E) \neq 0$ лишь при $E \simeq \zeta$ и в интеграле

(П. XV.1) существенны только значения E , близкие к ζ . По этой причине удобно ввести новую переменную интегрирования

$$\eta = \frac{E - \zeta}{kT}$$

и разложить выражение $\varphi(E) \equiv \varphi(\zeta + \eta kT)$ по степеням η .

Замечая, что

$$f'_0 = \frac{1}{kT} \frac{df_0}{d\eta} = -\frac{1}{kT} (e^\eta + 1)^{-1} (e^{-\eta} + 1)^{-1}, \quad (\text{П. XV.2})$$

мы получаем

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_1 \varphi(\zeta) + kT \varphi'(\zeta) \mathcal{F}_2 + \frac{1}{2} (kT)^2 \varphi''(\zeta) \mathcal{F}_3 + \dots \quad (\text{П. XV.3})$$

Здесь

$$\mathcal{F}_n = \int_{-\zeta/kT}^{\infty} \eta^{n-1} f'_0(\eta) d\eta, \quad n = 1, 2, 3. \quad (\text{П. XV.4})$$

По условию сильного вырождения нижний предел в интегралах \mathcal{F}_n отрицателен и велик по абсолютной величине. Как видно из формулы (П. XV.2), при больших значениях $|\eta|$ функция $f'_0(\eta)$ экспоненциально мала. Пренебрегая величинами порядка $\exp(-\zeta/kT)$, мы можем распространить область интегрирования до $-\infty$. Тогда

$$\mathcal{F}_1 \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} f'(\eta) d\eta = -1, \quad \mathcal{F}_2 \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \eta f'(\eta) d\eta = 0,$$

так как f'_0 есть четная функция η , и, наконец,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_3 &\simeq - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\eta^2 d\eta}{(1+e^{-\eta})(1+e^\eta)} = -2 \int_0^{\infty} \frac{\eta^2 e^{-\eta} d\eta}{(1+e^{-\eta})^2} = \\ &= -2 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (k+1) \int_0^{\infty} \eta^2 e^{-(k+1)\eta} d\eta = -4 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^2}. \end{aligned}$$

Сумма последнего ряда составляет $\pi^2/12$ [1]. Таким образом,

$$\mathcal{F}_3 = -\pi^2/3$$

и

$$\mathcal{F} = -\varphi(\zeta) - \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \varphi''(\zeta) + \dots \quad (\text{П. XV.5})$$

В пренебрежении величиной порядка $(kT/F)^2$ формула (П. XV.5) дает

$$\mathcal{F} = -\varphi(\zeta),$$

что и оправдывает выражение (XIII.7.17).

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Рыжик, И. С. Градштейн, Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, изд. 3, переработанное, стр. 21, Гостехиздат, М., 1951.