

следовательно, магнитный момент на единицу объема есть

$$\beta^2 n(E) H,$$

что соответствует восприимчивости

$$\chi = \beta^2 n(E). \quad (3.11)$$

Этот парамагнитный вклад в  $\chi$  положителен в противоположность диамагнитному вкладу в восприимчивость (3.10). Можно оценить величину парамагнитного члена, приняв для  $\beta$  значение, равное магнетону Бора:

$$\beta = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (3.12)$$

(такой выбор как раз отвечает случаю свободных электронов), и положив плотность состояний свободных электронов

$$n(E) = \frac{3N}{2E_F} = \frac{3Nm}{\hbar^2 k_F^3}.$$

В результате получим

$$\chi = \frac{e^2}{4\pi mc^2} \left( \frac{3N}{\pi} \right)^{1/3} \left( \frac{1}{Z^2} \right)^{1/3}, \quad (3.13)$$

где  $Z$  — валентность. Сравнивая с диамагнитной восприимчивостью (3.10), видим, что парамагнитный член отличается от диамагнитного в  $Z^{2/3}$  раз. На практике оказывается, что парамагнитный вклад преобладает для большинства простых металлов, причем выражение (3.13) в количественном отношении весьма неточно. Формулу (3.11) можно считать правильной, имея в виду, однако, что она содержит погрешности, связанные как с использованием значения  $\beta$  для свободных электронов (оно должно быть исправлено путем учета поправок к магнитному моменту за счет орбитального движения), так и с использованием плотности состояний свободных электронов. Когда мы будем рассматривать теорию ферми-жидкости Ландау, мы получим поправки к  $n(E)$ , учитывающие электрон-электронное взаимодействие. Последние фактически отличаются от соответствующих поправок к величине  $n(E)$ , фигурирующей в выражении для электронной теплоемкости.

Магнитная восприимчивость металла содержит кроме рассмотренных здесь двух слагаемых и диамагнитный вклад, связанный с электронами внутренних оболочек. Этот вклад можно рассчитать точно так же, как и восприимчивость свободных атомов.

## § 2. ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Перейдем теперь к обсуждению таких явлений переноса, как электро- и теплопроводность. На первых порах мы будем считать, что все изменения в системе и все приложенные потенциалы

медленно меняются на расстояниях порядка межатомных, поэтому квазиклассическая теория, развитая в § 2 гл. II, оказывается наиболее подходящей для наших целей. В большинстве случаев мы будем аппроксимировать энергетические зоны параболами, поэтому квазиклассическое рассмотрение будет по существу идентичным классическому, за исключением учета принципа Паули.

Как уже отмечалось раньше, это имеет смысл только тогда, когда можно описать электронные состояния с помощью волновых пакетов. Образование волнового пакета сопровождается появлением неопределенности в энергии рассматриваемых частиц. Если мы собираемся рассчитывать энергии электронов с точностью, большей  $KT$ , то мы не должны рассматривать внешних полей, которые существенно меняются на расстояниях порядка  $\delta r$ , где  $\delta r \delta p \approx \hbar$  или  $\delta r \approx \hbar v / KT$  (здесь  $v$  — скорость частицы). Мы не можем применить такой подход для описания, например, движения частиц в полях отдельных ионов, так как эти поля существенно изменяются на атомных расстояниях, и построение волновых пакетов, локализованных на таких длинах, приведет к неопределенности в энергии, большей даже энергии Ферми в металле. Допустимо, однако, рассматривать движение электронов в системах, неоднородность которых имеет макроскопические размеры; это как раз то, чем мы собираемся здесь заниматься.

Вследствие указанного ограничения на характерный размер неоднородности оказывается возможным ввести вероятность заполнения состояний, зависящую не только от импульса и времени, но и от координаты. Обозначим эту функцию распределения через  $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ . Равновесная функция при некоторой температуре будет просто фермиевской функцией  $f_0(E)$ . Полное число электронов, находящихся в некоторой данной области импульсов и координат, можно получить простым интегрированием по пространству импульсов и пространству координат, причем

$$dn = \frac{2}{h^3} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) d^3p d^3r. \quad (3.14)$$

Здесь мы, как и раньше, положили, что плотность состояний в пространстве волновых векторов равна  $2/(2\pi)^3$  на единицу объема, и заменили снова интегрирование по волновому вектору интегрированием по импульсу. Потребовав, чтобы выполнялось условие  $f \leq 1$ , мы также удовлетворим принципу Паули.

Для нахождения нашей функции распределения требуется квазиклассическое приближение, так как мы фиксируем в некотором смысле одновременно и импульс, и координату отдельных частиц. Таким образом, необходимо, чтобы изменение  $f$  было малым на всех расстояниях, кроме макроскопических; только в этом случае импульс частиц будет действительно хорошо определенной величиной. В некоторых из наших задач функция распределения не будет

зависеть от координат и такого ограничения вообще не возникнет; в других, однако, мы будем вынуждены его учитывать. Заметим, что в чисто классической системе нет ограничения ни на изменение функции распределения, ни на ее максимальное значение, а константа  $2/h^3$  обычно входит в определение  $f$ .

### 1. Уравнение Больцмана

Теперь мы получим уравнение, которое будет определять изменение во времени введенной нами функции распределения. Оно является, конечно, аналогом уравнения Шредингера, которое описывает изменение во времени волновой функции. Уравнение переноса, которое мы получим, будет служить основой для всех наших расчетов кинетических свойств. Давайте зафиксируем некоторое значение импульса и координаты в системе и будем искать производную функции распределения по времени. Вероятно, наиболее систематический подход состоял бы в том, чтобы рассматривать ячейку в фазовом пространстве и вычислять потоки частиц, входящих в эту ячейку и выходящих из нее <sup>1)</sup>. Мы сможем, однако, получить результат более непосредственно (хотя, быть может, он будет менее прозрачным) и из более общих соображений. Затем мы обсудим каждый член нашего выражения и согласуем его с тем, что должно было бы следовать из анализа потоков через ячейку в фазовом пространстве.

Мы рассматриваем отдельное занятое состояние, т. е. считаем  $f = 1$ . При наличии внешних полей это состояние будет перемещаться в фазовом пространстве согласно нашим квазиклассическим уравнениям. Конечно, если мы следим за траекторией этого отдельного электрона, величина  $f$  не меняется и остается равной единице. Если мы наблюдаем за незаполненным состоянием  $f = 0$ , то заполнение снова не меняется во времени. Так как значение  $f$ , связанное с любым отдельным состоянием, не меняется во времени, то и *полная* производная от  $f$  по времени, взятая вдоль траектории в фазовом пространстве, должна быть равна нулю. Записав это уравнение как

$$\frac{df}{dt} = 0,$$

мы непосредственно получим уравнение переноса.

Однако хотелось бы еще учесть возможное рассеяние электронов, причем такое рассеяние, механизмы которого не связаны (и не могут быть связаны) с наложенными внешними полями. Аналогичные процессы рассеяния мы уже описывали ранее. В процессе рассеяния электрон скачком меняет свой импульс и, следовательно, скачком перемещается в фазовом пространстве. Таким образом, уравнение

<sup>1)</sup> Такой подход используется Зейтцем [3].

переноса, которое мы ищем, имеет вид

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{столкн}},$$

где последний член описывает изменение функции распределения вследствие столкновений. Перепишем наш результат в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial f}{\partial r} \frac{dr}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{столкн}}.$$

Теперь мы должны выяснить смысл некоторых величин, входящих в это уравнение. Величина  $dp/dt$  есть скорость изменения импульса во времени в данной точке траектории. Она, конечно, в точности равна силе, приложенной к данной точке в данный момент. Производная  $dr/dt$  — скорость изменения координаты на траектории при данном значении импульса, т. е. просто скорость частицы  $v$ . Таким образом, наше уравнение переноса принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial r} \cdot v - \frac{\partial f}{\partial p} \cdot F + \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{столкн}}. \quad (3.15)$$

Смысл этого уравнения делается теперь более физическим. Уравнение для скорости изменения функции распределения в данной точке с данным импульсом содержит три члена. Первый связан с дрейфом электрона; рассматриваемый электрон покидает данную область пространства со скоростью  $v$ , и если функция распределения меняется в пространстве, то число электронов, уходящих из данной области, оказывается не равным числу приходящих в нее. Подобным же образом второй член представляет изменение, возникающее вследствие того, что частицы с рассматриваемым импульсом, ускоряясь, переходят в состояние с другим импульсом. Если функция распределения зависит от импульса, то число электронов, выходящих при ускорении из рассматриваемой области, отличается от числа электронов, входящих при ускорении в нее. Наконец, функция распределения может измениться и из-за рассеяния в результате столкновений.

Такая запись члена столкновений несколько неудобна, хотя мы можем вычислить его аналогично тому, как мы раньше вычисляли время рассеяния на дефектах. Почти всегда в расчетах кинетических свойств вводится *приближение времени релаксации*. При этом если бы функция распределения была равновесной, то величина  $f$  не изменялась бы при рассеянии. Если, напротив, функция распределения отличается от равновесной, мы ожидаем, что она будет релаксировать к равновесной функции экспоненциально во времени. Математически это можно записать в виде

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = -\frac{f - f_0}{\tau},$$

где  $\tau$  — время релаксации.

Такой подход согласуется с нашим предположением о том, что импульс отдельного электрона хаотизируется с характерным временем, которое мы ввели. Приближение времени релаксации весьма правдоподобно и подтверждается большим числом экспериментов; тем не менее оно, конечно, не может быть справедливым во всех случаях. Если, например, процессы рассеяния преимущественно упругие, они будут стремиться обеспечить затухание любого тока до равновесного нулевого значения, однако такие процессы оказываются не столь эффективными, когда речь идет о затухании любого изотропного отклонения от равновесного распределения, зависящего от энергии. Таким образом, может оказаться необходимым определять различные времена релаксации для разных изучаемых эффектов. Кроме того, следует с большим вниманием отнестись к тому, какая равновесная функция распределения  $f_0$  входит в член  $\partial f / \partial t|_{\text{столкн}}$ . Если, скажем, функция распределения неоднородна (в разных точках пространства полная плотность электронов различна), то в член столкновения должна входить равновесная функция распределения, соответствующая *локальной* плотности частиц, т. е.  $f_0 [n(\mathbf{r})]$ . Вместе с тем, нам придется ввести процессы рассеяния, которые одновременно переводят электроны из одной точки в другую. И все-таки, если приближение времени релаксации вводится аккуратно, оно хорошо описывает многие свойства.

Используя предыдущее выражение, мы можем теперь записать уравнение Больцмана в приближении времени релаксации:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} = -\frac{f - f_0(n)}{\tau}.$$

Чаще всего мы будем интересоваться приложенными к системе внешними полями и искать лишь линейный отклик на них, поэтому мы запишем функцию распределения в виде

$$f = f_0(\bar{n}) + f_1,$$

где  $f_0(\bar{n})$  — равновесная функция распределения, вычисленная для *средней* электронной плотности (она не является функцией координаты), а  $f_1$  — отклонение от равновесия. Это выражение можно подставить в уравнение Больцмана в приближении времени релаксации и оставить только члены первого порядка по приложенным полям. В результате получается *линеаризованное уравнение Больцмана*

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} = -\frac{f_1}{\tau} + \frac{\delta n f_0}{\tau}, \quad (3.16)$$

где мы обозначили разность между равновесной функцией распределения с локальной плотностью  $f_0(n)$  и равновесной функцией распределения со средней плотностью системы  $f_0(\bar{n})$  через

$$\delta n f_0 = f_0(n) - f_0(\bar{n}).$$

Этот член при написании линеаризованного уравнения Больцмана часто опускают. Однако, когда плотность зависит от координаты, важно, чтобы этот член был включен.

## 2. Электропроводность

Воспользуемся теперь линеаризованным уравнением Больцмана для расчета конкретного свойства. Именно, мы рассмотрим проводимость в однородном электрическом поле; таким образом, приложенная сила определяется для электронов как

$$\mathbf{F} = -e\mathfrak{E},$$

а для дырок

$$\mathbf{F} = +e\mathfrak{E}.$$

Для решения задачи нам необходимо вычислить функцию распределения в присутствии приложенного поля. Затем мы через эту функцию распределения выразим ток, и эта процедура даст нам коэффициент пропорциональности между током и приложенным полем, который как раз и является проводимостью.

Мы рассматриваем стационарное состояние, поэтому первый член в (3.16) исчезает. Кроме того, функция распределения не будет зависеть от координаты, следовательно, третий член, равно как и член  $\delta_n f_0$ , также обращается в нуль. В результате имеем

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = -\frac{f_1}{\tau}.$$

Удобно переписать левую часть этого уравнения, воспользовавшись тем, что

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v}.$$

Такая запись будет особенно удобна для металлов, так как величина  $-\partial f_0/\partial E$  тогда приближенно равна  $\delta$ -функции. Теперь же мы немедленно получаем член первого порядка в функции распределения:

$$f_1 = \tau \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{F} = \mp e\tau \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \mathbf{v} \cdot \mathfrak{E},$$

где первый знак соответствует электронам, а второй — дыркам.

Мы можем теперь непосредственно найти протекающий ток, суммируя вклады в него от каждого занятого состояния. Равновесная функция распределения не даст никакого тока, так что можно в расчете просто взять поправку первого порядка. Тогда

$$\mathbf{j} = \frac{2}{h^3} \int d^3 p f_1 (\mp e) \mathbf{v} = \frac{2e^2 \tau}{h^3} \int d^3 p \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\mathbf{v} \cdot \mathfrak{E}) \mathbf{v}.$$

Знак носителей выпадает, и формула верна для любой зонной структуры. Примем теперь, что зоны изотропны. Для удобства положим, что поле  $\mathcal{E}$  направлено вдоль оси  $z$ . При интегрировании по углу единственной неисчезающей компонентой тока будет  $z$ -компонента. Можно поэтому заменить  $v$  на  $v_z$ . Усредняя далее по углу, замечаем, что

$$\langle v_z^2 \rangle = \frac{v^2}{3}.$$

В результате для плотности тока находим

$$j_z = \frac{2e^2\tau\mathcal{E}_z}{3h^3} \int d^3p v^2 \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right).$$

Этот интеграл легко можно вычислить, интегрируя по частям. Запишем, во-первых,

$$d^3p = 4\pi p^2 dp.$$

Будем теперь считать зону параболической с энергией

$$E = \frac{p^2}{2m^*}$$

и перепишем первый множитель  $v$  в виде  $p/m^*$ , а второй — в виде  $\partial E/\partial p$ . Тогда

$$\left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \left( \frac{\partial E}{\partial p} \right) = -\frac{\partial f_0}{\partial p}.$$

Используя эту окончательную форму, можно провести интегрирование по частям:

$$\begin{aligned} j_z &= \frac{2e^2\tau\mathcal{E}_z}{3h^3m^*} \int_0^\infty dp 4\pi p^3 \left( -\frac{\partial f_0}{\partial p} \right) = \\ &= \frac{2e^2\tau\mathcal{E}_z}{3h^3m^*} \left( -4\pi p^3 f_0 \Big|_0^\infty + 3 \int_0^\infty dp 4\pi p^2 f_0 \right). \end{aligned}$$

Первый член обращается в нуль как на нижнем пределе, где  $p = 0$ , так и на верхнем, где  $f_0 = 0$ . Остающийся интеграл после умножения на  $2/(3h^3)$  есть просто  $N$  — число электронов (или дырок) в зоне на единицу объема. Таким образом, мы можем сразу найти проводимость  $\sigma$ , связывающую плотность тока с полем ( $\mathbf{j} = \sigma \mathcal{E}$ ):

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau}{m^*}. \quad (3.17)$$

Мы считали зоны изотропными и параболическими, но не наложили никаких ограничений на форму  $f_0$ . Поэтому результат в равной степени приложим как к простым металлам, так и к электронам или дыркам в полупроводниках.

Выражение (3.17) для проводимости на первый взгляд весьма разумно. Величина  $e\mathcal{E}/m^*$  есть ускорение частицы с зарядом  $e$  и массой  $m^*$  в поле  $\mathcal{E}$ . Оно сообщает частице скорость  $e\tau\mathcal{E}/m^*$  за время рассеяния  $\tau$ . Таким образом, переносимый ток есть  $e^2\tau\mathcal{E}/m^*$ . Полный ток на единицу объема мы получим, умножая эту величину на число электронов в единице объема. Такое в целом верное рассуждение не может дать правильного численного коэффициента, который в данном случае вследствие нашего определения времени рассеяния обращается в единицу.

Вычисление электропроводности является достаточно простой задачей, которую можно прямо решить, используя уравнение Больцмана для функции распределения первого порядка. При расчете более сложных свойств обычно постулируется некоторая функция распределения первого порядка и подстановкой проверяется, является ли она правильной или по крайней мере приближенно правильной.

### 3. Эффект Холла

Ранее мы отмечали, что если магнитное поле приложено к системе, в которой течет ток, то носители заряда стремятся отклониться в сторону. Проследим шаг за шагом, как это получается. Представим себе внешнее электрическое поле  $\mathcal{E}_0$ , направленное вдоль оси образца. Электроны будут перемещаться в противоположном направлении; это видно на фиг. 74, а. Если мы наложим магнитное поле перпендикулярно оси образца, то носители будут стремиться отклоняться к одной из боковых сторон образца. У поверхности кристалла они, конечно, не смогут выйти в пустое пространство, в результате начнет накапливаться поверхностный заряд. Этот поверхностный заряд вызовет появление поперечного электрического поля  $\mathcal{E}_H$  — поля Холла, в котором возникнет компенсирующий поток, так что в результате носители останутся внутри образца. На первый взгляд эта задача кажется исключительно сложной. Однако, если ее правильно сформулировать, она становится совсем простой. В качестве примера мы рассмотрим бесконечную систему с полным электрическим полем  $\mathcal{E}$  и найдем направление тока в ней. После этого мы представим себе образец разрезанным по оси, вдоль которой течет ток. Электрическое поле, разложенное на соответствующие составляющие, будет содержать продольное внешнее поле и поперечное поле Холла. При этом детали строения поверхности оказываются несущественными.

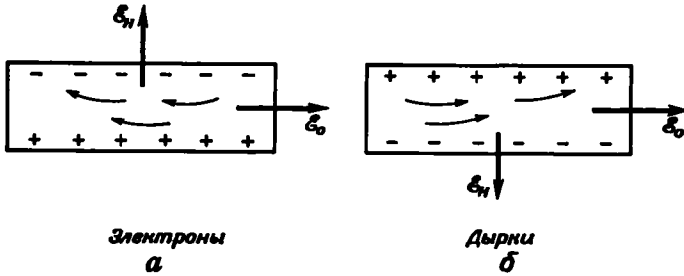
Начнем с того, что снова запишем уравнение Больцмана в приближении времени релаксации для однородной стационарной системы. Производные функции распределения по координате



и по времени обращаются в нуль, и мы имеем

$$\frac{\partial f}{\partial p} \cdot \mathbf{F} + \frac{f - f_0}{\tau} = 0.$$

Сила  $\mathbf{F}$  включает теперь в себя как магнитную, так и электрическую силу. Оказывается, что магнитное поле можно учесть точно, тогда



Ф и г. 74. Физическое происхождение эффекта Холла.

*a* — электроны, ускоренные влево внешним электрическим полем  $\mathcal{E}_0$ , отклоняются затем вверх магнитным полем, направленным перпендикулярно странице от читателя. Результирующее накопление заряда у поверхностей вызывает поперечное поле Холла  $\mathcal{E}_H$ , которое обеспечивает стационарное состояние, препятствуя дальнейшему накоплению заряда; *б* — соответствующее построение для твердого тела, в котором носителями являются дырки, приводит к полю Холла противоположного знака.

как для электрического поля мы снова должны будем ввести разложение. Если бы мы искали разложение также и для магнитного поля, мы бы нашли, как это будет видно впоследствии, что член, представляющий основной интерес, билинеен по электрическому и магнитному полю и в этом смысле является членом второго порядка. Проще написать  $f_1$  как вклад в функцию распределения, линейный по электрическому полю. Заменяя  $\mathbf{F}$  на силу Лоренца для частицы с зарядом  $-e$ , получаем

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v} \cdot \left( -e\mathcal{E} - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right) + \frac{\partial f_1}{\partial p} \cdot \left( -e\mathcal{E} - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right) + \frac{f_1}{\tau} = 0.$$

Мы выделили в  $\partial f / \partial p$  члены нулевого и первого порядков, чтобы можно было воспользоваться зависимостью от энергии только равновесной функции распределения. Первый член с магнитным полем сразу исчезает, так как величина  $\mathbf{v} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{H})$  тождественно равна нулю. Вторым членом с электрическим полем можно пренебречь, так как он второго порядка малости. В результате имеем

$$-e \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v} \cdot \mathcal{E} - \frac{e}{c} \frac{\partial f_1}{\partial p} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) + \frac{f_1}{\tau} = 0.$$

Мы не можем просто решить это уравнение относительно функции распределения первого порядка, как это мы делали при расчете электропроводности. Однако можно разными способами попытаться угадать возможный ответ. Например, заметив, что влия-

ние магнитного поля, грубо говоря, состоит во вращении распределения, мы будем искать распределение в виде, аналогичном тому, который был получен при расчете электросопротивления. Мы заметим, однако, электрическое поле некоторым вектором  $\mathbf{G}$ , который должен быть найден; таким образом, мы считаем, что

$$f_1 = e\tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v} \cdot \mathbf{G}.$$

Теперь можно вычислить производную  $f_1$  по  $\mathbf{p}$ , полагая  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ :

$$\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = e\tau \left[ \frac{\mathbf{G}}{m} \frac{\partial f_0}{\partial E} + \frac{\partial^2 f_0}{\partial E^2} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{G}) \mathbf{v} \right].$$

Последнее слагаемое не дает вклада, так как в уравнении оно приведет к члену, содержащему множитель  $\mathbf{v} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{H})$ . Подставим теперь нашу пробную функцию распределения обратно в уравнение Больцмана. Сокращая на множитель  $(-e) \partial f_0 / \partial E$ , который появляется в каждом члене, получаем

$$\mathbf{v} \cdot \mathfrak{E} + \frac{e\tau}{mc} \mathbf{G} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) - \mathbf{v} \cdot \mathbf{G} = 0$$

или

$$\mathbf{v} \cdot \left( \mathfrak{E} + \frac{e\tau}{mc} (\mathbf{H} \times \mathbf{G}) - \mathbf{G} \right) = 0.$$

Здесь мы учли, что

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A}).$$

Заметим, что полученное выражение будет решением для всех  $\mathbf{v}$  в том и только том случае, если

$$\mathfrak{E} = \mathbf{G} - \frac{e\tau}{mc} (\mathbf{H} \times \mathbf{G}).$$

Отметим, что ток, описываемый нашей пробной функцией распределения первого порядка, можно получить точно так же, как и в случае электропроводности, и результат имеет тот же вид:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{G}.$$

Таким образом, можно выразить электрическое поле через ток:

$$\mathfrak{E} = \frac{\mathbf{j}}{\sigma} - \frac{e\tau}{mc\sigma} (\mathbf{H} \times \mathbf{j}). \quad (3.18)$$

В отсутствие магнитного поля второй член исчезает, и мы получаем в точности тот же результат, что и раньше. Второй член в выражении (3.18) отвечает компоненте электрического поля, перпендикулярной приложенному магнитному полю и току. Коэффициент пропорциональности называется постоянной Холла, и его величина есть

$$R = \frac{(-e)\tau}{mc\sigma} = \frac{1}{N(-e)c},$$

где мы использовали явное выражение для проводимости.

Заметим, что знак постоянной Холла тот же, что и знак заряда носителя, который мы приняли равным  $-e$ . Если наш расчет относится к дыркам, то знак заряда, входящего в выражение для силы Лоренца, должен быть положительным, и соответствующая постоянная Холла тоже будет положительной. Этот случай относится к физической ситуации, проиллюстрированной на фиг. 74, б. Заметим, наконец, что, поскольку величина электрона и скорость света хорошо известны, постоянная Холла дает непосредственно величину числа имеющих носителей (если все носители одного знака).

При выводе выражения для постоянной Холла мы задавались некоторыми значениями эффективной массы и времени релаксации, хотя мы не конкретизировали, относится ли все рассмотрение к металлам или полупроводникам. В простых металлах (при небольших полях) измерения дают значения постоянной Холла, близкие к тем, которые мы получили бы, принимая для валентных электронов приближение почти свободных электронов. В полупроводниках  $n$ - или  $p$ -типа эта величина дает разумное число электронов и дырок соответственно. Одновременные измерения постоянной Холла и электропроводности позволяют найти как число носителей, так и отношение времени релаксации к эффективной массе. Последняя величина непосредственно определяет *подвижность*, т. е. отношение средней скорости дрейфа к электрическому полю. Оказывается, что конечная формула для постоянной Холла остается справедливой и тогда, когда мы рассматриваем более сложные и анизотропные зонные структуры. Однако при этом интерпретация величины  $N$  несколько усложняется. Если мы рассматриваем, например, кристалл, содержащий носители в двух зонах, то  $N$  будет некоторой «взвешенной» суммой числа носителей в каждой зоне, причем «веса» зависят от эффективной массы и времени рассеяния носителей в каждой из зон. Оказывается также, что поперечное электрическое поле теперь уже не зависит линейно от магнитного поля. В сильных и слабых полях поведение носителей существенно различно. «Сильное» поле или «слабое» зависит от того, будет ли произведение циклотронной частоты и времени рассеяния для разных носителей, т. е.

$$\omega_c \tau = \frac{eH\tau}{(m^*c)}, \quad (3.19)$$

велико или мало по сравнению с единицей. Этот критерий можно также записать через *угол Холла*  $\theta$ , т. е. угол между  $\mathbf{j}$  и  $\mathcal{E}$ . (Сравнивая (3.18) и (3.19), видим, что  $\operatorname{tg} \theta = \omega_c \tau$ .)

Заметим, что для простых металлов в слабых полях  $N$  соответствует плотности валентных электронов. В очень сильных полях постоянная Холла для простых металлов определяется разностью между числом электронов и числом дырок, которые можно найти, анализируя ферми-поверхность. Если все участки поверхности Ферми замкнуты, эту величину можно вычислить, вычитая объем

пространства волновых векторов, соответствующий замкнутым поверхностям, окружающим занятые электронные состояния, из объема, образованного замкнутыми поверхностями, окружающими пустые состояния. Если поверхность Ферми не замкнута, поведение поперечного электрического поля более сложно. Оно зависит от направления открытых орбит на поверхности Ферми и от соотношения объемов, образованных электронными, дырочными и замкнутыми поверхностями<sup>1)</sup>.

Можно заметить, что в наших расчетах продольное электрическое поле оказалось в точности одинаковым как при наложении магнитного поля, так и без него. Этот результат перестает быть верным, когда энергетическая зонная структура анизотропна. В последнем случае продольное электрическое поле также зависит от магнитного поля и обычно растет с ним. Это дополнительное сопротивление, возникающее при приложении магнитного поля, называется *магнетосопротивлением*<sup>2)</sup>. Измерение в магнитном поле, в частности, эффекта Холла дает определенную информацию о топологии поверхности Ферми в металлах. Мы не будем вдаваться в детали этого метода изучения ферми-поверхностей.

#### 4. Тепловые и термоэлектрические эффекты

Рассмотрим еще одно традиционное применение уравнения Больцмана, а именно для описания эффектов, связанных с переносом тепла. В этом случае мы лишь сформулируем проблему и рассмотрим физический смысл результатов. Промежуточные вычисления довольно сложны, но их можно найти во многих учебниках<sup>3)</sup>.

В данном случае мы должны будем рассмотреть систему с температурным градиентом. Мы сделаем это на основе интуитивных соображений, которые представляются нам довольно разумными. Давайте для простоты представим себе систему свободных электронов (вырожденных, как в простом металле, или невырожденных, как в полупроводнике). Выберем за нуль энергии минимум данной зоны и предположим, что функция распределения имеет вид

$$f = f_0 \left[ \frac{E - \xi(x)}{KT(x)} \right] + f_1(x). \quad (3.20)$$

Мы считаем, что и энергия Ферми, и температура являются функциями координаты, причем они изменяются только вдоль направления  $x$ . В любой данной точке первый член представляет собой равновесное распределение, отвечающее хорошо определенной температуре. Кроме того, мы добавили к функции распределения

<sup>1)</sup> Обзор этих «галваномагнитных» эффектов в металлах дан Чамберсом в книге [5]. (См. также [41]. — Прим. ред.)

<sup>2)</sup> См. предыдущее примечание.

<sup>3)</sup> См., например, [6].

поправку первого порядка. Ясно, что такая поправка необходима, если кроме температурного градиента имеется еще и поле. Сразу можно увидеть, что в большинстве интересных случаев присутствие таких полей неизбежно. При измерениях теплопроводности образец обычно электрически изолирован от окружения. Таким образом, граничные условия, которым удовлетворяет наша система, должны требовать исчезновения тока, но не электрического поля. Из физических соображений можно ожидать, что, если исчезнет поле, электроны будут увлекаться вдоль температурного градиента и возникнут токи. Таким образом, мы будем рассматривать потоки как тепла, так и заряда в присутствии температурного градиента и электрического поля. Потребовав, чтобы исчез ток, мы можем найти электрическое поле, а затем поток тепла и в результате получить обычную теплопроводность. Также, естественно, мы придем и к термоэлектрическим эффектам.

Мы снова интересуемся стационарным случаем, и уравнение Больцмана имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial p} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial f}{\partial t} \cdot \mathbf{v} + \frac{f - f_0}{\tau} = 0.$$

Величина  $f_0$  в члене релаксации есть локальное равновесное распределение, т. е. первый член (3.20). Допустим, что электрическое поле направлено по оси  $x$  и является единственной силой, входящей в уравнение. В выражении для  $\partial f / \partial t$  мы оставим только член наименьшего порядка, который можно получить, продифференцировав первое слагаемое в (3.20) по  $x$ . Для уравнения Больцмана тогда получим

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v} \cdot (-e\mathcal{E}) - \frac{\partial f_0}{\partial E} \left( \frac{d\xi}{dx} + \frac{E - \xi}{T} \frac{dT}{dx} \right) v_x + \frac{f_1}{\tau} = 0,$$

откуда можно сразу найти  $f_1$ :

$$f_1 = v_x \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \left( e\mathcal{E} + \frac{d\xi}{dx} + \frac{E - \xi}{T} \frac{dT}{dx} \right). \quad (3.21)$$

Теперь мы можем записать выражения для тока и потока тепла, считая, что тепловая энергия просто равна кинетической энергии электронов:

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{2}{h^3} \int d^3p (-e) v_x f_1, \\ c_x &= \frac{2}{h^3} \int d^3p \left( \frac{m}{2} v^2 \right) v_x f_1. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Мы видим, что имеется вклад в электрический ток, пропорциональный полю, а вклад в поток тепла обусловлен градиентом температуры. Однако есть еще член в электрическом поле, вызванный тепловым градиентом, и член в тепловом токе, вызванный электрическим полем.

Положив электрический ток равным нулю, можно исключить электрическое поле и величину  $d\xi/dx$  и найти отношение потока тепловой энергии к температурному градиенту, т. е. коэффициент теплопроводности  $\kappa$ . Для простого металла имеем

$$\kappa = \frac{16\pi^3}{9} \frac{mv_F \tau}{h^3} \xi K^2 T = \frac{\pi^2}{3} \frac{N\tau}{m} K^2 T,$$

где  $N$  — снова плотность электронов. Отношение коэффициентов теплопроводности и электропроводности есть

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \frac{K^2}{e^2} T.$$

Величина  $\pi^2 K^2 / (3e^2)$  называется отношением *Видемана — Франца*; все входящие в него параметры суть фундаментальные константы. Оказывается, что с хорошей точностью это отношение имеет место для многих металлов.

Довольно естественно, что теплопроводность и электропроводность связаны подобным образом. Займан [6], например, показал, что в случае теплопроводности можно считать, что электрон переносит энергию  $KT$  и что сила, связанная с температурным градиентом, есть  $\partial |KT|/\partial x$ . С помощью интуитивных соображений, вроде



Ф и г. 75. Два стержня из различных материалов с приложенным градиентом температуры.

Левый контакт является термопарой. Разность потенциалов можно измерить между точками  $a$  и  $b$  справа.

тех, к которым мы прибегли при расчете электропроводности, мы приходим к тому же виду отношения Видемана — Франца, но, конечно, без численного коэффициента.

С помощью тех же уравнений мы можем изучать также и термоэлектрические эффекты. Рассмотрим, например, два стержня из различных материалов, соединенных между собой, как показано на фиг. 75. Будем считать, что температура левого и правого концов различна, следовательно, в обоих стержнях возникает температурный градиент. Сначала мы будем считать, что оба металла разделены и тока в каждом из них нет. Иными словами, в каждом веществе мы положим ток, определяемый соотношением (3.22), равным нулю [при этом мы считаем, что  $f_1$  дается выражением (3.21)]. В результате мы получим интегральную связь между

$$e\mathcal{E} + \frac{d\xi}{dx} = \frac{dV}{dx} + \frac{d\xi}{dx},$$

где  $V$  — электростатическая потенциальная энергия электрона, являющаяся функцией координаты, и

$$\frac{dT}{dx}.$$

Интегрируя вдоль каждого из стержней, мы найдем разность энергий Ферми на обоих концах, измеренную относительно дна зоны, плюс разность электростатических потенциальных энергий (которая определяет положение минимума зоны). Эта сумма для каждого металла будет пропорциональна разности температур на обоих концах. На левом конце, где металлы находятся в контакте, абсолютная величина энергии Ферми должна быть у обоих металлов одной и той же, на правом же конце полная разность энергий Ферми может быть измерена по разности потенциалов. Это и есть э. д. с. в контуре; она пропорциональна разности температур на его концах. Мы, таким образом, построили *термопару*, и ее э. д. с. есть разность *термоэлектрических потенциалов*.

Изучению термоэлектрических и термомагнитных свойств посвящено довольно много работ. Мы здесь лишь наметили подход к рассмотрению одного или двух простейших явлений.

## 5. Туннелирование электронов

Явление переноса, которое в последние годы вызвало особый интерес, состоит в прохождении электронов через тонкие пленки изолятора. Одна из систем, на которой изучались такие эффекты, изготавливается путем осаждения слоя алюминия на стеклянную подложку, окисления его в течение нескольких минут и затем осаждения второго слоя на первый. Такая окисная пленка алюминия обычно получается непрерывной и имеет толщину порядка  $20 \text{ \AA}$ . Таким образом, два слоя алюминия не находятся в электрическом контакте, но если к ним приложено электрическое напряжение, то возникает ток, который оказывается пропорциональным приложенному напряжению. Такое же поведение следовало бы ожидать, если бы пленка *не* была сплошной и ток проходил через небольшие перемычки. Однако, если металлы сделать сверхпроводящими, становится ясно, что ток переносится с помощью механизма туннелирования. Мы вернемся к туннелированию в сверхпроводниках в гл. V.

Если мы рассмотрим волновую функцию зоны проводимости одного из слоев алюминия, мы увидим, что в месте контакта с окислом она не обращается в нуль скачком. Можно ожидать, что в пленке окисла волновая функция экспоненциально будет затухать, как и в случае поверхностных состояний, о которых мы говорили в п. 3 § 8 гл. II. Тогда на противоположной стороне пленки окисла она будет все же иметь конечное значение, и поэтому электрон может

проникнуть во второй слой. Такое же поведение можно было бы ожидать и в случае, если бы две пленки алюминия были разделены вакуумным промежутком  $20 \text{ \AA}$ . Тогда интересующие нас электроны проводимости должны были бы иметь энергию ниже вакуумного уровня, а волновая функция соответствовала бы в области вакуума отрицательной кинетической энергии и опять затухала бы экспоненциально. Фактически это та же ситуация, что и при квантовомеханическом туннелировании. Единственное отличие случая с окисным слоем заключается в том, что экспоненциальное затухание вызывается не непосредственно отрицательной величиной кинетической энергии, а тем фактом, что интересующие нас энергии лежат внутри запрещенной зоны окисла. В настоящее время кажется очевидным, что правильнее рассматривать окисел как аморфный полупроводник. О таких полупроводниках мы будем говорить в § 7 настоящей главы. Там мы увидим, что подобные материалы ведут себя почти так же, как полупроводники или изоляторы, в которых энергия Ферми лежит вблизи середины запрещенной зоны. Этим, вероятно, можно объяснить успех теории туннелирования, в которой всегда предполагалось, что окисел представляет собой кристаллический собственный полупроводник. Мы также сделаем это допущение.

Приступим теперь к вычислению вероятности туннелирования электрона сквозь пленку окисла. По-видимому, наиболее естественный подход будет заключаться в том, чтобы построить падающую и отраженную волны в одном слое, сшить их с экспоненциально затухающими волнами при той же энергии в окисле и, наконец, последние сшить с волной, прошедшей во второй слой. В обычной задаче о туннелировании эти две системы условий сшивки однозначно дают отношение интенсивностей прошедшей и падающей волн и, следовательно, вероятность прохождения.

Условия сшивки в данном случае усложняются необходимостью знать значения блоховской функции  $\mu_k(r)$  на поверхности сшивания, т. е. параметр  $\beta$ , который мы ввели в п. 1 § 6 гл. II. Однако если задаться некоторым значением  $\beta$ , то все вычисления можно выполнить [7]. Получающаяся вероятность перехода содержит экспоненту  $e^{-2|k|\delta}$ , где  $\delta$  — толщина окисла, а  $k$  — мнимая часть волнового вектора, соответствующего состоянию внутри окисла. Этот множитель весьма важен, так как он в основном определяет вероятность прохождения, которая оказывается порядка  $10^{-9}$ . Однако не меньший интерес представляют и другие сомножители в выражении для вероятности.

С физической и математической точек зрения эти расчеты совершенно аналогичны расчетам в случае туннелирования фотонов. Представим себе луч света, испытывающий полное внутреннее отражение на поверхности стеклянной призмы. Хорошо известно, что электромагнитное поле экспоненциально затухает в вакууме с противоположной стороны призмы. Если же, однако, мы подведем



другую призму достаточно близко к первой, то возникнет малое пропускание света во вторую призму. Это явление можно описать как в терминах классической теории электромагнетизма, так и с помощью представлений о туннелировании фотонов. Результат расчета электронного туннелирования имеет тот же вид, что и полученный для электромагнитной волны, только показатели преломления следует заменить параметрами, пропорциональными плотности состояний в каждой среде. (В случае окисла это — абсолютное значение плотности состояний, «просочившихся» в запрещенную зону.) Дополнительные множители, о которых мы упомянули выше, «способствуют» туннелированию, когда плотности состояний в различных металлических слоях сравнимы с соответствующей величиной для изолятора.

С точки зрения изучения металлов это не слишком приятное обстоятельство, но оно приводит к эффектам, которые согласуются с экспериментом. Конечно, хорошо было бы попытаться заменить одну из пленок переходным металлом и проследить, как ведет себя плотность состояний в  $d$ -зонах. Однако туннелирование в  $d$ -зоны, характеризующиеся большими массами, вероятно, из-за различия в плотности состояний очень слабое, поэтому соответствующих данных получить не удастся. Есть и другой эффект, который может подавить туннелирование при участии  $d$ -состояний. В § 9 гл. II мы отмечали, что атомные  $d$ -состояния сильно локализованы в атомной ячейке, так что соответствующие волновые функции не могут заметно проникнуть в окисел. Гибридизация с состояниями  $k$ -типа увеличит туннелирование из  $d$ -состояний, но даже это увеличение будет несколько скомпенсировано соответствующим ослаблением туннелирования  $k$ -состояний.

Бардин [8] предложил другое описание туннелирования. Он предположил, что появление в окончательном ответе параметра  $\beta$  не физично, и было бы более правильным предположить, что имеет место постепенный переход от металла к изолятору. В этом случае оказывается удобным вычислять волновые функции в квазиклассическом приближении ВКБ. Расчет снова эквивалентен расчету для случая электромагнитной волны, но теперь показатель преломления медленно меняется в пространстве. При этом зависимость коэффициента прохождения от плотности состояний, равно как и от  $\beta$ , полностью выпадает. Такой подход дает еще меньше надежды на изучение с помощью туннелирования электронной структуры.

В обоих описанных подходах была использована некоторая аппроксимация, о которой следует упомянуть. Мы предполагали поверхность контакта металл — изолятор плоской и считали, что поперечная компонента волнового вектора при переходе через границу сохраняется. Это соответствует как зеркальному отражению на границе, так и зеркальному пропусканию. Однако эксперименты на металлических поверхностях показывают, что отражение имеет

довольно диффузный характер. Эта трудность ставит под сомнение применимость наших результатов.

Несмотря на ненадежность микроскопического описания туннелирования через изоляторы, концепцию коэффициента прохождения при туннелировании можно использовать при обработке результатов экспериментов по туннелированию. Такие эксперименты с несверхпроводящими металлами не позволяют получить информацию, с помощью которой можно было бы найти изменения плотности состояний, и детали процесса туннелирования не делаются яснее. Соответственно эти эксперименты описываются без учета всех деталей.

В большинстве приложений теории туннелирования отдавалось предпочтение описанию эффекта как перехода электрона через барьер, а не как проникновения электронных волн, хотя оба описания совершенно эквивалентны. При рассмотрении электронных переходов оказывается необходимым ввести в гамильтониан член, ответственный за туннелирование. Нетрудно видеть, что такое описание вполне применимо. Представим себе сначала в качестве невозмущенной системы два металла, разделенные пленкой окисла, достаточно толстой, чтобы туннелирования не происходило. Полный гамильтониан содержит тогда член  $H_1$ , описывающий металл 1, и член  $H_2$ , соответствующий металлу 2. Каждый из них имеет набор одноэлектронных собственных состояний. Обозначим одно из собственных состояний металла 1 через  $\psi_1$  и одно из состояний металла 2 через  $\psi_2$ . Пусть теперь толщина пленки окисла уменьшается до тех пор, пока туннелирование не сделается возможным, т. е. пока  $\psi_1$  и  $\psi_2$  не начнут перекрываться.

Мы будем искать новое решение так же, как мы это делали в приближении сильной связи, т. е. с помощью построения линейной комбинации  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Теперь должны быть учтены матричные элементы гамильтониана между состояниями  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Они непосредственно соответствуют интегралам перекрытия в методе сильной связи. Эти матричные элементы не будут равны нулю, только если поперечные компоненты волновых векторов одинаковы для обоих состояний. Последнее соответствует предположению о зеркальном пропускании, обсуждавшемся выше. Если обе компоненты волнового вектора одинаковы, мы обозначим интеграл перекрытия через  $T$ . Ясно, что эта величина будет пропорциональна экспоненте  $e^{-\delta|k|}$ , где снова  $k$  — мнимая часть волнового вектора в окисле и  $\delta$  — толщина пленки.

Конечно, необходимо также еще учесть члены, соответствующие одноэлектронным состояниям, которые лежат в одном слое, но взаимодействуют с потенциалом другого слоя. Однако, как и в случае сильной связи, такой учет лишь слегка сдвигает зоны и не является существенным. Мы можем принять во внимание интересующий нас

член и записать гамильтониан в виде

$$H = H_1 + H_2 + H_T,$$

где член возмущения  $H_T$  определен матричными элементами между одноэлектронными состояниями  $H_1$  и  $H_2$ . Обозначая собственные состояния через  $k_1$  и  $k_2$  соответственно, запишем матричные элементы  $H_T$  в виде  $T_{k_1 k_2}$ .

Этот гамильтониан можно было бы в принципе использовать для вычисления собственных состояний системы. Тогда каждое собственное состояние имело бы вид некоторой смеси состояний, отвечающих обоим сторонам контакта, что привело бы к небольшому изменению энергии вследствие возможного туннелирования через контакт. Однако гораздо более удобно рассматривать гамильтониан туннелирования как возмущение и рассчитать вероятности перехода.

Мы можем сразу связать матричный элемент  $T$  с вероятностью перехода  $P$ , о которой говорилось выше. Мы опустим поперечные компоненты, которые одинаковы для обеих сторон, считая, что  $k_1$  и  $k_2$  обозначают компоненты волнового вектора, нормальные к барьеру. Вероятность перехода электрона из состояния  $k_1$  в металл 2 есть

$$\begin{aligned} P_{12}(k_1) &= \sum_{k_2} \frac{2\pi}{\hbar} |T_{k_1 k_2}|^2 \delta(E_{k_1} - E_{k_2}) = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L_2}{2\pi} \int dE_{k_2} \frac{|T_{k_1 k_2}|^2 \delta(E_{k_1} - E_{k_2})}{\partial E / \partial k_2} = \\ &= \frac{L_2}{\hbar} |T_{k_1 k_2}|^2 \left( \frac{\partial E}{\partial k_2} \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

где в окончательном выражении все параметры вычислены при значении  $k_2$ , которое соответствует закону сохранения энергии, а  $L_2$  — толщина металла 2.

Ту же вероятность можно вычислить и через коэффициент прохождения  $P$ . При этом вероятность определяется произведением коэффициента прохождения и частоты, с которой электрон в состоянии  $k_1$  ударяется о барьер. Эта частота равна просто нормальной к барьеру скорости электрона, поделенной на толщину металла  $L_1$ :

$$P_{12}(k_1) = P \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_1} \frac{1}{L_1}. \quad (3.24)$$

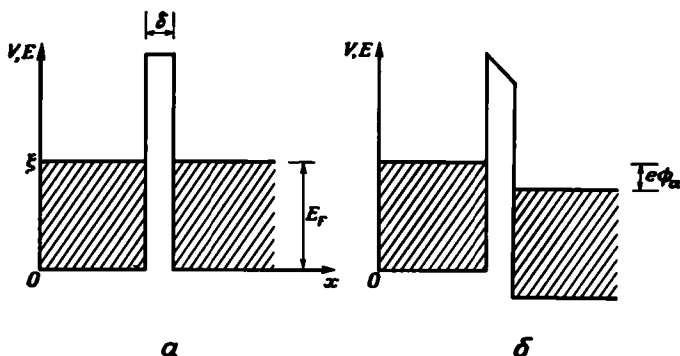
(В этом выражении можно по ошибке написать множитель 2, взяв удвоенную длину  $L_1$ , что может показаться естественным при нашем расчете коэффициента прохождения. Однако такой расчет соответствовал бы условию обращения в нуль функций на границе в отсутствие туннелирования, тогда как наша классификация состояний по волновому вектору подразумевает периодические граничные

условия.) Объединяя (3.23) и (3.24), для величины туннельного матричного элемента получаем выражение

$$|T_{k_1 k_2}|^2 = \frac{P}{L_1 L_2} \frac{\partial E}{\partial k_1} \frac{\partial E}{\partial k_2}.$$

Мы видим, что этот результат имеет правильную симметрию относительно перестановки металлов 1 и 2 и что он содержит соответствующую экспоненциальную зависимость от толщины окисла. Зависимость от  $L_1$  и  $L_2$  также верна, и она исчезнет после суммирования по состояниям, которое необходимо для вычисления полных токов.

Мы рассчитываем вклад в ток от состояний, отвечающих только определенному значению поперечного волнового вектора. Это сводит проблему к случаю одного измерения; для реального кристалла



Ф и г. 76. Зависимость потенциала, соответствующего туннельному контакту, от координаты.

Вместо обоих металлов мы рассматриваем одинаковые газы свободных электронов, разделенные вакуумом (в котором потенциал превосходит энергию Ферми на величину, называемую работой выхода). Случай *а* отвечает равновесию, никакого напряжения не приложено, и энергия Ферми  $\xi$  постоянна для системы. В случае *б* приложена разность электростатического потенциала  $\phi_a$ , сдвигающая термодинамические энергии Ферми с обеих сторон друг относительно друга на величину  $e\phi_a$ , что вызывает в контакте поле  $\phi_a/\delta$  и обуславливает ток туннелирования. Заштрихованные области означают занятые состояния. Заметим, что плотность электронов и кинетическая энергия Ферми  $E_F$  остаются неизменными по обе стороны от контакта.

мы должны добавить вклады от всех поперечных волновых векторов, но это не изменит основного характера результата. Переходы из состояния  $k_1$  в состояние  $k_2$  будут давать вклад в ток лишь в тех случаях, когда состояние  $k_1$  занято, а состояние  $k_2$  свободно (или наоборот). Этот результат следует из принципа Паули, но его можно также получить, если учесть, что вклад указанного перехода в точности сокращается с вкладом перехода из состояния  $k_2$  в состояние  $k_1$ , когда оба состояния заняты. Таким образом, выполняя расчет при  $T = 0$ , мы должны просуммировать выражение (3.23) по энергиям, меньшим энергии Ферми для металла 1 и большим энергии Ферми для металла 2. Как видно из фиг. 76, энергетический интер-

вал, дающий вклад в ток, в точности равен приложенному потенциалу. Мы сейчас считаем, что каждый из металлов есть просто газ свободных электронов, и они разделены вакуумом. В следующем параграфе (§ 3) мы увидим, что аналогичная диаграмма возникает и в случае более сложной энергетической зонной структуры.

Вычислим теперь ток для приложенного напряжения величиной  $\phi_a$ . Знак перед выражением легко найти из фигуры. Ток равен произведению заряда электрона на вероятность перехода в единицу времени, просуммированному по соответствующим состояниям (для обоих спинов). Заменяя суммирование интегрированием, имеем

$$J_{12} = e \int \left( \frac{2L_1}{2\pi} \right) dk_1 P_{12}(k_1) = \frac{eL_1}{\pi} \int_{E_F - |e\phi_a|}^{E_F} dE P_{12}(k_1) \left( \frac{\partial E}{\partial k_1} \right)^{-1}.$$

Воспользовавшись для  $P_{12}$  выражением (3.23), мы получаем простой результат, в который входит коэффициент перехода:

$$J_{12} = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{E_F - |e\phi_a|}^{E_F} P dE. \quad (3.25)$$

Теперь снова нужно просуммировать по поперечным волновым векторам (помня, что  $P$ , так же как и энергия, зависит от поперечного волнового вектора), и мы найдем, что окончательный результат пропорционален площади контакта.

Заметим, что характеризующие плотность состояний множители, пропорциональные  $(\partial E/\partial k)^{-1}$ , из выражения (3.25) выпадают. При малых внешних потенциалах коэффициент перехода не зависит существенно ни от приложенного потенциала, ни от энергии; поэтому можно взять его значение, отвечающее энергии Ферми, и вынести из-под интеграла. Тогда мы сразу же найдем, что ток пропорционален приложенному напряжению и соответствует сопротивлению  $\pi\hbar/(e^2P)$ . Как мы уже отмечали, именно это и наблюдается экспериментально.

Как можно видеть из фиг. 76, б, с ростом приложенного потенциала барьер, преодолеваемый каждым электроном, заметно уменьшается, и следует ожидать, что ток будет расти с напряжением быстрее, чем по линейному закону; это также наблюдается при напряжениях, приближающихся к 1В.

Пока мы рассматриваем простые металлы, естественно считать, что величина  $P$  медленно меняется с энергией, и достаточно знать ее значение, отвечающее энергии Ферми. Это означает, что и величина  $T_{h_1h_2}$  также слабо зависит от энергии. Однако ситуация существенно меняется при рассмотрении сверхпроводников. В этом случае мы должны ввести гамильтониан туннелирования и доба-

вить соответствующие члены, ответственные за сверхпроводящее состояние. Естественно предположить, что туннельные матричные элементы не меняются, когда металл становится сверхпроводником. Если, с другой стороны, мы бы предположили, что и  $P$  не меняется при переходе к сверхпроводнику, то могло бы показаться естественным рассматривать энергии возбуждения в сверхпроводнике как зонные энергии, а это привело бы к ошибочным результатам.

В дальнейшем мы увидим, что при рассмотрении  $p$  —  $n$ -перехода в п. 2 настоящего параграфа, а также туннелирования в сверхпроводниках подход, использующий туннельный матричный элемент, оказывается очень удобным.

### § 3. ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СИСТЕМЫ

Теперь мы рассмотрим макроскопически неоднородные системы, которые употребляются в полупроводниковых приборах. Здесь мы не пойдем слишком далеко, а лишь ровно настолько, насколько это необходимо, чтобы увидеть тот метод, с помощью которого можно решать эти проблемы <sup>1)</sup>.

#### 1. $p$ — $n$ -переход

Обсуждая однородные полупроводники, мы видели, что вероятность заполнения любого состояния задается функцией распределения Ферми

$$f_0(E) = \frac{1}{e^{(E-\xi)/kT} + 1}.$$

Значение энергии Ферми  $\xi$  выбирается таким образом, чтобы получалось правильное полное число электронов. В собственном полупроводнике необходимо, чтобы энергия Ферми лежала вблизи середины запрещенной зоны. В полупроводнике  $n$ -типа энергия Ферми лежит много ближе к краю зоны проводимости, в результате чего число электронов намного превосходит число дырок. Аналогично в полупроводнике  $p$ -типа энергия Ферми лежит очень близко к краю валентной зоны.

Рассмотрим три полупроводника: один —  $n$ -типа, другой — собственный и третий —  $p$ -типа. Пусть все они соединены электрически с некоторым внешним источником электронов. Это показано на фиг. 77. В такой системе опять имеется единая энергия Ферми, определяющая заполнение состояний (поскольку

<sup>1)</sup> С большими деталями читатель может познакомиться в книгах [9, 10]. (См. также [44, 45]. — Прим. перев.)