

Если $w(\Theta)$ — число столкновений, вызывающих отклонение электрона на угол Θ , то время между такими столкновениями $\tau(\Theta) = \frac{1}{w(\Theta)}$; таким образом, формулу (5.37) можно записать и в следующем виде:

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum \overline{(1 - \cos \Theta)} \frac{1}{\tau(\Theta)}. \quad (5.38)$$

Выражения (5.36) и (5.37) могут быть написаны и в интегральной форме, например:

$$\frac{1}{\tau(k)} = \int_{k'} w(k, k') [1 - \cos(k, k')] dk'. \quad (5.39)$$

Формула (5.38) является обобщением (5.7) с учетом того, что столкновения определенного сорта не обязательно приводят к полной потере скорости *).

Если ввести для каждого вида столкновений эффективное время свободного пробега и определить его следующим образом:

$$\tau_i \text{ эф} = \frac{\tau_i(\Theta)}{(1 - \cos \Theta)}, \quad (5.40)$$

то (5.38) примет вид, совершенно аналогичный (5.7):

$$\frac{1}{\tau_{\text{эф}}} = \sum_i \frac{1}{\tau_{\text{эф}} i}. \quad (5.40a)$$

Соотношения (5.38) и (5.39) все еще не являются строгими и точными — в них не учтено то обстоятельство, что для различных типов столкновений время свободного пробега электрона по-разному зависит от его энергии. Учет энергетической зависимости $\tau(\varepsilon)$ и вычисление средних значений с учетом этой зависимости и является задачей следующих параграфов.

5.2. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ (УЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ)

В самом начале этой главы мы убедились в том, что неправильный учет статистического разброса времени релаксации сразу же приводит к ошибке в абсолютном значении подвижности в 2 раза.

Еще к более серьезным последствиям может привести неучет (или неправильный учет) энергетической зависимости

*) Если мы положим средний угол отклонения $\Theta = 90^\circ$ (что и означает полную потерю направленной составляющей скорости), то (5.38) сразу же переходит в (5.7).

времени релаксации, так как этой зависимостью определяется температурный ход подвижности, зависимость подвижности от степени вырождения (концентрации носителей) и от характера и числа рассеивающих центров.

Выше мы уже упоминали, что при рассеянии на тепловых колебаниях и на ионах примеси зависимость времени релаксации от энергии электронов имеет совершенно различный характер. В первом случае, чем больше энергия (и волновой вектор) электрона, тем с большим числом phonонов он может взаимодействовать и, следовательно, тем больше число соударений и меньше длина и время свободного пробега, во втором — чем больше энергия и скорость, тем меньше электрон отклоняется в поле иона, тем меньше $\cos \Theta$ в формуле (5.38) и тем больше, следовательно, эффективное время релаксации.

В дальнейшем нам предстоит рассмотреть конкретно время релаксации для каждого механизма рассеяния отдельно, сейчас же мы предположим, что вид зависимости $\tau(\varepsilon)$ уже известен, и посмотрим, как вычислить $\bar{\tau}(\varepsilon)$, т. е. произвести усреднение по всем энергиям. Казалось бы, что вопрос решается просто:

$$\bar{\tau} = \frac{\int \tau(\varepsilon) dn(\varepsilon)}{\int dn(\varepsilon)}, \quad (5.41)$$

где $dn(\varepsilon)$ — число электронов с данной энергией, определяется плотностью состояний $dG(\varepsilon)$ и функцией распределения Ферми f_0

$$dn(\varepsilon) = f_0(\varepsilon) dG(\varepsilon), \quad (5.42)$$

но в действительности формулы (5.41) и (5.42) в данном случае неприменимы. В самом деле, ведь нас интересует среднее значение времени релаксации для электронов, участвующих в электрическом токе j_x *), а следовательно, и усреднение надо проводить соответствующим образом:

$$\tau = \frac{\int \tau(\varepsilon) dj_x(\varepsilon)}{\int dj_x(\varepsilon)} = \frac{\int \tau(\varepsilon) v_x dn(\varepsilon)}{\int v_x dn(\varepsilon)}, \quad (5.43)$$

так как $dj_x = ev_x dn$ и $j_x = e \int v_x dn$, и при этом инте-

*) Поскольку везде будем рассматривать ток, проходящий через 1 см^2 поперечного сечения, то мы не будем делать различия между плотностью тока j и током I .

грирование необходимо вести не по энергиям, а по скоростям.

Нетрудно убедиться, что если мы воспользуемся для dn выражением (5.42), то получим в числителе и знаменателе (5.43) нули. Это и неудивительно: ведь функция Ферми именно и характеризует равновесное распределение электронов, в котором все макроскопические токи и потоки отсутствуют.

Равновесная функция распределения электронов по скоростям для двух случаев: вырожденного электронного газа $\mu > 0$ и невырожденного $\mu < -2$ представлена на рис. 5.4. В обоих случаях она симметрична относительно оси ординат: $dn(v_x) = dn(-v_x)$, и никакой ток в этих условиях не может существовать. На этом же рисунке показано изменение функции распределения под действием электрического поля.

Электрический ток при наличии разности потенциалов возникает в результате того, что функция распределения в этом случае «деформируется», это проиллюстрировано рис. 5.4, в, где для определенности рассмотрен случай невырожденного электронного газа.

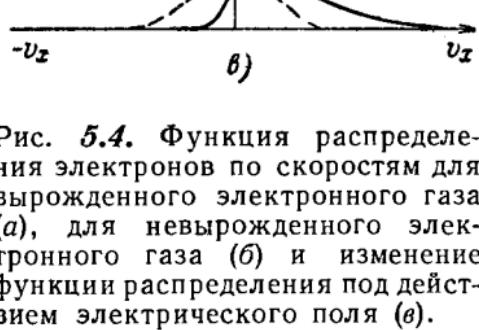


Рис. 5.4. Функция распределения электронов по скоростям для вырожденного электронного газа (а), для невырожденного электронного газа (б) и изменение функции распределения под действием электрического поля (в).

Рассмотрим состояние электронного газа при наличии разности потенциалов более подробно. Под действием электрического поля (рис. 5.4, в) все электроны получают дополнительную скорость в направлении v_x — вся функция распределения смещается в этом направлении. Если бы не было столкновений, то этот процесс ничем бы не компенсировался, а вся кривая $f(v)$ сместилась бы в направлении $+\infty$ по оси v_x . Но в действительности при каждом столкновении (или в результате нескольких столкновений)

любой электрон теряет свою направленную составляющую скорости, возвращаясь на свое «равновесное место», и весь процесс повторяется сначала. Если бы все электроны испытывали столкновения одновременно, то функция распределения все время пульсировала бы между двумя крайними состояниями — равновесным f_0 и смещенным f_τ — на отрезок $v_x = (eE/m) \tau$ из состояния равновесия. В действительности же устанавливается динамическое равновесие между действием столкновений и поля, т. е. какое-то новое промежуточное стационарное распределение f , которое можно найти из того условия, что действие соударений и поля на него должны компенсировать друг друга:

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{поля}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = 0. \quad (*) \quad (5.44)$$

Время релаксации для электронов с различной энергией различно, поэтому под действием поля функция распределения не только смещается, но и деформируется; так, например, при рассеянии на ионах больше сместится часть функции, соответствующая электронам с большими скоростями (так как $\tau(v)$ для них в этом случае больше), при рассеянии на акустических колебаниях, наоборот, больше сместятся электроны с малыми скоростями.

Подставляя в (5.43) $dn(\varepsilon)$, выраженное через неравновесную функцию f ,

$$dn(\varepsilon) = f dG(\varepsilon),$$

получаем

$$\tau = \frac{\int \tau v_x f dG(\varepsilon)}{\int v_x f dG(\varepsilon)} = \frac{j_1(f)}{j_2(f)}. \quad (5.43a)$$

В дальнейшем будем предполагать, что направленная добавка к скорости электрона, получаемая в поле, мала по сравнению с тепловой скоростью и, следовательно, функция f должна не сильно отличаться от равновесной функции распределения f_0 , поэтому мы можем представить ее в виде

$$f = f_0 + f_1, \quad (5.45)$$

* Условие (5.44) для определения функции распределения в неравновесных условиях f было впервые сформулировано Больцманом и называется кинетическим уравнением Больцмана.

где f_1 — небольшая добавка. Но если мы подставим (5.45) в (5.43а), то интегралы в числителе и знаменателе (5.43а) $j_1(f)$ и $j_2(f)$ разобьются на два:

$$j_1(f) = j_1(f_0) + j_1(f_1) \quad (5.46)$$

и

$$j_2(f) = j_2(f_0) + j_2(f_1);$$

при этом, так как f_0 характеризует равновесное состояние,

$$j_1(f_0) = j_2(f_0) = 0.$$

Следовательно,

$$\frac{\tau}{\tau} = \frac{\int \tau v_x f_1 d g(\varepsilon)}{\int v_x f_1 d g(\varepsilon)}. \quad (5.47)$$

Можно точно так же показать, что все кинетические коэффициенты (электро- и теплопроводность, коэффициенты в термоэлектрических, гальвано- и терромагнитных явлениях) будут выражаться через f_1 ; поэтому нахождение этой небольшой неравновесной добавки к равновесной функции распределения является основной задачей теории явлений переноса*).

Для того чтобы найти f_1 , напишем уравнение Больцмана более подробно, считая при этом, что в полупроводнике существует не только электрическое поле, но и градиент температуры. Это обобщение нам понадобится для исследования электронной теплопроводности и термоэлектрических явлений.

Рассмотрим вначале «полевую» производную от функции распределения, входящую в (5.44), т. е. изменение функции распределения под действием поля.

Будем рассматривать стационарное состояние, следовательно, время явно не может входить в выражение для f , а будет влиять на нее через скорости электронов и их координаты, которые уже явно зависят от времени $d\mathbf{r}/dt = \mathbf{v}$ и $d\mathbf{v}/dt = \mathbf{w} = \mathbf{F}/m$, где \mathbf{F} — полная сила, действующая на электрон, т. е. сила Лоренца:

$$\mathbf{F} = e \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} H] \right\}. \quad (5.48)$$

*) Второй, не менее важной задачей является нахождение конкретного выражения τ — времени релаксации, как функции от всех микро- и макроскопических параметров: энергии, эффективной массы электрона, температуры, характера и числа дефектов и т. д.

Электроны перемещаются в пространстве координат за время dt на отрезок $d\mathbf{r} = \mathbf{v} dt$ и в пространстве скоростей на отрезок $d\mathbf{v} = (\mathbf{F}/m) dt$.

Следовательно, распределение, которое в начальный момент t было в точке 1 ($\mathbf{v} - \mathbf{w} dt$, $\mathbf{r} - \mathbf{v} dt$), через промежуток времени dt попадает в точку 2 (\mathbf{v} , \mathbf{r}); это значит, что

$$f_{t+dt}(\mathbf{v}, \mathbf{r}) = f_t(\mathbf{v} - \mathbf{w} dt, \mathbf{r} - \mathbf{v} dt). \quad (5.48a)$$

Согласно (5.48a) изменение (точнее, производная) f по времени за счет ее перемещения под действием поля (скоростей и ускорений) из точки 1 в точку 2 будет иметь вид

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{поля}} = \frac{f(t+dt) - f(t)}{dt} = -\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f - \mathbf{w} \nabla_{\mathbf{v}} f, \quad (5.49*)$$

или, подставляя вместо ускорения \mathbf{w} его выражение, получим окончательно

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{поля}} = \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{m} \left\{ \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right\} \nabla_{\mathbf{v}} f. \quad (5.49a)$$

Перейдем теперь ко второму члену в (5.44) — изменению функции распределения под действием столкновений. Полное изменение функции распределения в данной точке (точнее, в единице объема, так как f — это плотность) фазового пространства за счет столкновений состоит из двух частей:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = b - a, \quad (5.50)$$

где b — число частиц, пришедших в результате столкновений из всех точек фазового пространства в данную точку, и a — число частиц, ушедших под действием столкновений из данной точки во все точки фазового пространства. Нетрудно в общем виде написать число и тех и других переходов (но неизмеримо трудней вычислить). Число переходов из точки v' в точку v будет пропорционально вероятности такого перехода $w(v', v)$ и числу частиц в точке v' : $dn = f(v') dg(v')$, а также числу пустых мест в точке v , т. е. $[1 - f(v)]$.

Таким образом,

$$db = f(v') w(v', v) dg(v') [1 - f(v)]. \quad (5.51)$$

*) Здесь и в дальнейшем выражения $\nabla_{\mathbf{r}} f$ и $\nabla_{\mathbf{v}} f$ означают градиенты функции f в пространстве координат и импульсов.

Для того чтобы получить b , мы должны проинтегрировать это выражение по всему фазовому пространству:

$$b = \int_{v'} w(v', v) f(v') [1 - f(v)] dg(v'). \quad (5.52)$$

Число обратных переходов da пропорционально их вероятности $w(v, v')$ плотности частиц в точке v , т. е. $f(v)$, и числу пустых мест в точке v' , т. е. $[1 - f(v')] dg$:

$$da = w(v, v') f(v) [1 - f(v')] dg(v'). \quad (5.53)$$

Суммируя переходы из рассматриваемой точки v во все точки фазового пространства v' , получаем

$$a = \int_{v'} w(v, v') f(v) [1 - f(v')] dg(v'). \quad (5.54)$$

Можно показать из очень общих соображений так называемого принципа микроскопической обратимости, что вероятности прямых и обратных переходов должны быть одинаковы: $w(v', v) = w(v, v')$; согласно (5.52) и (5.54) полное изменение функции распределения в результате столкновений

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = \int \{f(v') [1 - f(v)] - f(v) [1 - f(v')]\} \times \\ \times w(v, v') dg(v') = \int [f(v') - f(v)] w(v, v') dg(v'). \quad (5.55)$$

В ряде случаев удобнее рассматривать функцию распределения f как функцию не от скоростей (v, v') , а от волновых векторов (k, k') ; проделав совершенно аналогичные выкладки, получим (здесь для сокращения записи волновые векторы k и k' вынесены в индексы)

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = \int [f_{k'} (1 - f_k) - f_k (1 - f_{k'})] w_{kk'} dg_{k'} = \\ = \int (f_{k'} - f_k) w_{kk'} dg_{k'}. \quad (5.55a)$$

Подставляя (5.49a) и (5.55a) в (5.44), получаем интегральное уравнение для определения неравновесной функции распределения f_k :

$$v(\nabla_r f_k) + \frac{e}{m} \left[E + \frac{1}{c} (v_k H) \right] (\nabla_v f_k) = \\ = \int (f_{k'} - f_k) w_{kk'} dG_{k'}. \quad (5.56)$$

Решение уравнения (5.56) в таком общем виде представляет весьма большие трудности, однако при некоторых упрощающих предположениях оно допускает точное аналитическое решение. Полагая $f_k = f_{0k} + f_{1k}$ и учитывая, что для равновесного состояния $(\partial f / \partial t)_{\text{столкн}} = 0$, можно переписать (5.55) в виде

$$\left(\frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = \int (f_{1, k'} - f_{1, k}) w_{kk'} dG_{k'}, \quad (5.57)$$

исключив, таким образом, из правой части (5.56) f_0 . Напротив, из левой части (5.56) при известных условиях можно исключить f_1 . Действительно, все члены в $(\partial f / \partial t)_{\text{поля}}$, за исключением члена, содержащего магнитное поле (см. ниже), не обращаются в нуль при замене $f_k \rightarrow f_{0k}$, поэтому мы можем (учитывая, что $f_{0k} \gg f_{1k}$) переписать (5.56) в виде

$$\bar{v} \left(\nabla_r f_{0k} + \frac{eE}{m} (\nabla_v f_{0k}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{c} [\mathbf{v}_k \mathbf{H}] (\nabla_v f_{1k}) \right) = \int (f_{1k'} - f_{1k}) w_{kk'} dg_{k'}, \quad (5.58)$$

и в случае отсутствия магнитных полей можно переписать кинетическое уравнение в виде

$$v (\nabla_r f_{0k}) + \frac{eE}{m} (\nabla_v f_{0k}) = \int [f_{1k'} - f_{1k}] w_{kk'} dg_{k'}. \quad (5.59)$$

Даже в таком упрощенном виде решение кинетического уравнения представляет большие трудности.

Действительно, в правую часть (5.59) входит интеграл по всему фазовому пространству, это значит, что изменение функции распределения под влиянием столкновений в точке k зависит от ее вида не только в данной точке, но и во всех точках фазового пространства; этим самым предположение о существовании времени релаксации τ , сделанное нами в гл. 4 и в начале настоящей главы, становится весьма сомнительным. Действительно, согласно (4.1) изменение функции f под действием столкновений запишется так:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = \frac{f_0 - f}{\tau}. \quad (5.60)$$

Но в свете сказанного выше определенное таким образом τ должно зависеть от значений f во всем фазовом простран-

стве, т. е. должно быть функцией от времени и от мгновенного распределения электронов по скоростям; если это действительно так, то введение времени релаксации как некоторой характеристики системы теряет смысл. Однако в ряде случаев есть достаточно серьезные основания для такого упрощения задачи [т. е. введения понятия времени релаксации и выражения $(\partial f / \partial t)_{\text{столкн}}$ в виде (5.60)].

Во-первых, следует учесть, что, как это было показано выше, в ряде интересующих нас случаев столкновения являются почти упругими, при этом: а) мы должны проводить интегрирование не по всему фазовому пространству, а лишь по сфере постоянной энергии (точнее, по шаровому слою толщиной ΔE), характеризующему «неупругость» соударений); б) так как столкновения происходят только внутри этого слоя, то $(\partial f / \partial t)_{\text{столкн}}$ зависит только от распределения электронов в нем. При этих условиях может существовать время релаксации для данного (и любого другого) слоя, являющееся функцией только энергии.

При этом остается открытым вопрос: как же устанавливается равновесное распределение электронов по энергиям, если электроны в разных слоях не обмениваются энергией друг с другом? Дело в том, что соударения являются все же почти упругими, и поэтому обмен энергией все же происходит, но значительно медленней (т. е. со значительно большим временем релаксации), чем обмен импульсами. К этому надо добавить, что межэлектронные столкновения, когда они происходят в достаточном количестве, значительно ускоряют установление равновесного распределения по энергиям.

Мы покажем, что для упругих соударений время релаксации вводится строго; в ряде других случаев этот метод решения кинетического уравнения не может быть строго обоснован, но тем не менее он дает хорошие результаты.

Если учесть, что $f_1 = f - f_0$ есть малое изменение функции распределения, то мы можем разложить его в ряд по v и ограничиться первыми неисчезающими членами. Так как поле направлено по оси x и функция f смешена и деформирована по оси v_x , то очевидно, что в первом члене должно быть v_x в первой степени, а v_y и v_z — не ниже второй, так как функция распределения должна сохранять симметрию по этим осям; иными словами, f_1 может быть только функцией v_x и энергии. Таким образом,

в этом приближении

$$f_1(v_x) = v_x \chi(\varepsilon), \quad (5.61)$$

где $\chi(\varepsilon)$ — пока неизвестная функция энергии.

Далее, учитывая (5.61) и то, что соударения упругие (рис. 5.3), получим

$$f(v') = v'_x \chi(\varepsilon) = v_x \cos \Theta \chi(\varepsilon). \quad (5.62)$$

Предположим также, что вероятность рассеяния является только функцией от угла:

$$\omega(v, v') = \omega(\Theta).$$

Подставляя $f(v)$ и $f(v')$ в интеграл столкновений (5.57), получаем

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = \int \omega(v, v') \chi(\varepsilon) v_x (1 - \cos \theta) dG(v'). \quad (5.62a)$$

Так как интегрирование происходит по v' и при $\varepsilon = \text{const}$, то можно $\chi(\varepsilon) v_x = f_1$ вынести за знак интеграла; таким образом, получаем

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = f_1 \int \omega(v, v') (1 - \cos \theta) dG(v'). \quad (5.63)$$

Интеграл в (5.63) в точности соответствует выражению для обратного времени релаксации (5.39):

$$\tau^{-1} = \int \omega(v, v') [1 - \cos(v, v')] dG(v'), \quad (5.64)$$

следовательно,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} = \frac{f_1}{\tau} = \frac{f - f_0}{\tau}. \quad (5.65)$$

Таким образом при сделанных нами предположениях можно не только ввести время релаксации, но и получить для него явное выражение (5.64).

Подставляя (5.65) в (5.59) (и опуская для простоты индексы k), получаем явное выражение для f_1 :

$$f_1 = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{поля}} \tau = \tau \left[\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f_0 + \frac{e}{m} (\mathbf{E} \nabla_{\mathbf{v}} f_0) \right]. \quad (5.66)$$

Учитывая, что

$$\nabla_{\mathbf{r}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial T} \nabla T + \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \nabla \mu = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left[\frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T - \nabla \mu \right]$$

и

$$\nabla_{\mathbf{v}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} m \mathbf{v} \text{ и } \mathbf{E} = -\nabla \Phi,$$

после простых преобразований получаем

$$f_1 = \tau \left[\frac{\mu - e}{T} \nabla T - \nabla (\mu - e\Phi) \right] \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} v_x. \quad (5.67)$$

5.3. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЯВЛЕНИЙ ПЕРЕНОСА

Знание неравновесной функции распределения позволяет вычислить все кинетические коэффициенты: электрическую теплопроводность, термоэлектрические коэффициенты (Зеебека, Пельтье и Томсона), коэффициенты гальванических и термомагнитных явлений. Оставив изучение двух последних классов явлений на будущее (что мы вынуждены сделать, так как исключили из кинетического уравнения члены, содержащие магнитное поле), напишем выражение для плотностей электрического тока и потока энергии при отсутствии магнитного поля:

$$j = \overline{en\mathbf{v}} = e \int \mathbf{v} f_1 dG(\epsilon) \quad (5.68)$$

и

$$q = \overline{\epsilon n\mathbf{v}} = \int \epsilon \mathbf{v} f_1 dG(\epsilon). \quad (5.69)$$

Если считать, что время релаксации существует, то можно сразу же написать феноменологические выражения (5.67) для f_1 и (5.66) и (5.63) для плотностей тока и потока энергии. Таким образом, весь вопрос сводится к нахождению выражения для времени релаксации. Так как f_1 согласно (5.67) является линейной функцией градиентов потенциала и температуры, то электрический ток и поток энергии должны быть линейными функциями от этих параметров. Поэтому в самом общем виде можно написать

$$\mathbf{j} = L_{EE} \mathbf{E} + L_{ET} \nabla T \quad (5.70)$$

и

$$\mathbf{q} = L_{TE} \mathbf{E} + L_{TT} \nabla T, \quad (5.71)$$

где все L — кинетические коэффициенты, подлежащие определению.