По определению, коэффициент пропорциональности между напряжением и током при $\nabla T = 0$ называется электропроводностью σ, следовательно,

$$\sigma = L_{EE}. \tag{5.72}$$

Коэффициент термо-э. д. с. α измеряется при наличии градиента температуры и отсутствии тока (по существу, это является определением термоэлектродвижущей силы). Таким образом, приравнивая в (5.70) $\mathbf{j}$ нулю, находим

$$\mathbf{E} = -\frac{L_{ET}}{L_{EE}} \nabla T, \tag{5.73}$$

следовательно,

$$\alpha = \frac{L_{ET}}{L_{EE}}. \tag{5.74}$$

Коэффициент теплопроводности измеряется также при отсутствии тока в цепи. Подставив $\mathbf{E}$, соответствующее $j = 0$, из (5.73) в (5.71), находим

$$\mathbf{q} = \left(-\frac{L_{TE} L_{ET}}{L_{EE}} + L_{TT} \right) \nabla T. \tag{5.75}$$

Следовательно, удельная теплопроводность

$$\varkappa = L_{TT} - \frac{L_{TE} L_{ET}}{L_{EE}}. \tag{5.76}$$

Аналогично можно получить феноменологические выражения для коэффициентов Пельтье и Томсона. Для того чтобы получить конкретные выражения для всех перечисленных выше кинетических коэффициентов, необходимо подставить в (5.68) и (5.69) выражения для f_1 и провести интегрирование по энергиям. Но для проведения этой программы мы должны получить зависимость времени релаксации τ от энергии в явном виде — следующий параграф и посвящен рассмотрению этого вопроса.

5.4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ

РАССЕЯНИЕ НА ИОНАХ ПРИМЕСИ

Вычисление времени релаксации является одной из наиболее сложных задач теории явлений переноса, поэтому мы здесь рассмотрим лишь основные вехи расчета для наиболее простого случая — рассеяния электронов на ионах примеси.

Анализ рассеяния электронов на ионах примеси при известных допущениях можно проводить по классической схеме, т. е. рассматривая электрон как точечный заряд e с массой m, движущейся в поле другого неподвижного заряда — иона, масса которого много больше массы первого (см. рис. 5.1). При этом для вычисления времени релаксации мы воспользуемся формулой (5.34):

$$\frac{1}{\tau}=\sum_{\Theta}(1-\cos\Theta)\,w(\Theta), \tag{5.77}$$

где заменим

$$1-\cos\Theta=2\sin^2\frac{\Theta}{2}=\frac{2}{1+\operatorname{ctg}^2\frac{\Theta}{2}}\,.$$

Зависимость угла отклонения Θ от прицельного расстояния b была выведена впервые Резерфордом (для анализа рассеяния α-частиц):

$$\operatorname{tg}\frac{\Theta}{2}=\frac{e^2}{\varkappa m v^2 b}\,, \tag{5.78}$$

где $\varkappa$ — диэлектрическая постоянная среды; следовательно, согласно (5.77)

$$1-\cos\Theta=\left(-\frac{\Delta \mathbf{v}_x}{v_x}\right)=\frac{2}{1+\left(\frac{\varkappa m v^2 b}{e^2}\right)^2}\,.$$

Таким образом, вероятность того, что электрон отклонится на угол Θ, свелась к определению вероятности того, что он пройдет на расстоянии b от иона. Последнюю же можно приближенно оценить как отношение площади кольца $dS=2\pi b\,db$ к площади окружности, очерченной радиусом, равным среднему расстоянию между ионами ($S=\pi a^2/4$), умноженной на число таких «столкновений» в единицу времени, т. е. v/a.

Таким образом,

$$w=\frac{v}{a}\,\frac{2\pi b\,db}{\pi a^2/4}=\frac{4v}{a^3}\,2b\,db. \tag{5.79}$$

Подставив (5.79) в (5.77) и заменив сумму интегралом, мы можем теперь получить явное выражение для τ^{-1}:

$$\tau^{-1}=\frac{4v}{a^3}\int\limits_0^{\frac{a}{2}}\frac{2b\,db}{1+\left(\frac{\varkappa m v^2}{e^2}b\right)^2} \tag{5.80}$$

или после интегрирования

$$\tau^{-1}=\frac{4v}{a^3}\frac{e^4}{\varkappa^2 m^2 v^4}\ln\left[1+\frac{mv^2/e^2}{\varkappa a/2}\right]=$$
$$=\frac{2v}{a}\left(\frac{\varepsilon_i}{2\varepsilon}\right)^2\ln\left[1+\left(\frac{2\varepsilon}{\varepsilon_i}\right)\right], \tag{5.81}$$

где $\varepsilon=mv^2/2$ — кинетическая энергия электрона и $\varepsilon_i=$ $=e^2/(\varkappa a/2)$ — потенциальная энергия электрона в поле иона при максимальном прицельном расстоянии.

Таким образом,

$$\tau=\frac{a}{2v}\left(\frac{2\varepsilon}{\varepsilon_i}\right)^2\left[\frac{1}{\ln\left(1+\frac{2\varepsilon}{\varepsilon_i}\right)}\right] \tag{5.82}$$

и длина свободного пробега

$$l=\tau v\approx A\varepsilon^2, \tag{5.83}$$

где A — величина, которую в первом приближении можно считать постоянной (выражение, стоящее под знаком логарифма, можно в первом приближении считать постоянным, так как логарифм — слабо меняющаяся функция).

При выводе формул (5.82) и (5.83) мы сделали ряд упрощающих предположений:

— пренебрегли всеми квантовыми эффектами (это возможно, когда $\varepsilon \gg \varepsilon_i$);

— не учли экранировку поля ионов свободными электронами, что допустимо при малой концентрации последних;

— считали, что рассеяние около каждого иона происходит независимо, в действительности же, если построить из ионов правильную решетку, то они вообще перестанут быть рассеивающими центрами (а лишь изменят энергетический спектр электрона);

— заменили кристалл непрерывной средой с диэлектрической постоянной $\varkappa$, что справедливо при малой концентрации ионов и не слишком большой диэлектрической постоянной.

Поэтому полученный нами результат имеет ограниченную область применений; тем не менее он очень важен, так как в ряде случаев дает картину явлений, правильную не только качественно, но и количественно.

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЯХ РЕШЕТКИ

Этот случай значительно более сложен и может быть рассмотрен последовательно только квантовомеханическим путем. Схема расчета качественно сводится к следующему. Мы уже упоминали, что в идеальном кристалле (при строго периодическом поле) зонные электроны описываются незатухающими модулированными плоскими волнами. Это значит, что длина свободного пробега электрона при этих условиях бесконечна, модулированные волны

$$\psi_1 = u_1(\mathbf{r})\, e^{2\pi i(\mathbf{k}_1\mathbf{r}-\nu_1 t)},\quad \psi_2 = u_2(\mathbf{r})\, e^{2\pi i(\mathbf{k}_2\mathbf{r}-\nu_2 t)} \tag{5.84}$$

распространяются беспрепятственно по всему кристаллу, вероятность рассеяния, т. е. перехода одной волны в другую, равна нулю. Причиной рассеяния могут явиться любые нарушения периодического потенциала (заряженные и нейтральные примеси, точечные, линейные, плоские и объемные дефекты и, наконец, тепловые колебания), так как если мы их включим в уравнение Шредингера, то решения типа (5.84) перестанут быть стационарными. В данном случае нас интересует рассеяние на тепловых колебаниях, т. е. мы должны вычислить вероятность перехода из одного электронного состояния в другое под действием нарушения периодического потенциала $\Delta V = V_{\text{д}} - V_{\text{и}}$ (индексами «д» и «и» обозначены потенциал деформированной и идеальной решеток), вызванного смещением атома из положения равновесия на величину u. Таким образом, в нашем случае возмущающий потенциал

$$\Delta V \approx V_{\text{д}}(r) - V_{\text{и}}(r). \tag{5.85}$$

Вероятность такого перехода пропорциональна квадрату матричного элемента возмущения:

$$w \sim [(\Delta V)_{1,2}]^2 = \left| \int \Phi_1 \Delta V \Phi_2\, dv \right|^2, \tag{5.86}$$

где Φ_1 и Φ_2 — волновые функции системы до и после перехода; так как в процессе рассеяния меняется не только электронное, но и фононное состояние, то в Ф должны быть включены волновые функции электронов и фононов:

$$\Phi_{1,2} = \left[u_k(r)\, e^{2\pi i \mathbf{kr}} \prod_q \psi_{qN}\right]_{1,2}, \tag{5.87}$$

где ψ_{qN} — фононные волновые функции, описывающие нормальные колебания решетки; смещения атомов и соответственно ΔV должны быть также разложены по нормальным колебаниям решетки.

Определение матричных элементов и вероятностей переходов согласно (5.85)—(5.87) приводит к весьма громоздким вычислениям и проводится по-разному для рассеяния на акустических и оптических колебаниях и в атомных и ионных кристаллах, поэтому мы их здесь опустим и приведем лишь основные результаты расчета.

Время релаксации при рассеянии акустической ветви тепловых колебаний

$$\tau = \frac{9\pi}{4\sqrt{2}} \frac{Mw^2\hbar^4}{\Omega_0 C^2 m^{3/2} kT} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}, \tag{5.88}$$

$$l = v\tau = \frac{9\pi}{4} \frac{Mw^2\hbar^4}{\Omega_0 C^2 mkT}, \tag{5.89}$$

где Ω_0 — объем элементарной ячейки; w — скорость продольной звуковой волны; M — масса атома и C — константа взаимодействия электронов с фононами, характеризующая вероятность перехода ($w_{1,2}$) состояния ψ_{k_1} в состояние ψ_{k_2} под действием тепловых колебаний. Нахождение C в результате интегрирования выражения (5.86) и является центральной и наиболее сложной задачей при изучении рассеяния носителей на тепловых колебаниях решетки.

Бардиным и Шокли был развит другой метод вычисления времени релаксации для атомной решетки, так называемый метод деформационного потенциала, сущность которого заключается в следующем.

Как известно (см. гл. I), положение и ширина зон в кристалле определяются расстоянием между соседними атомами (или постоянной решетки). При продольных колебаниях это расстояние меняется, что, в свою очередь, вызывает колебания дна зоны проводимости, которые равносильны возникновению потенциальных скачков на пути электрона, а следовательно, должны вызывать его рассеяние. При этом подходе вероятность рассеяния выражается через так называемую константу деформационного потенциала E, характеризующую сдвиг дна зоны проводимости (для электронов) или сдвиг верхнего края заполненной зоны (для дырок) при однородной деформации кристалла; константа E с точностью до коэффициента равна константе взаимодействия C, характеризующей взаимодействие электронов с фононами.

Время релаксации при рассеянии на оптических колебаниях ионных кристаллов:

— *в области низких температур* ($T \ll \theta$)

$$\tau = \frac{3\sqrt{2}}{4\pi} \frac{Ma^3 (\hbar\omega_0)^{\frac{3}{2}}}{z^2 e^4 m^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}}, \tag{5.90}$$

$$l = \tau v = \frac{3a}{2\pi} \left(\frac{M}{m}\right) \left(\frac{\hbar\omega_0}{\frac{ze^2}{a}}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}} \sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}}, \tag{5.90a}$$

где z — заряд ионов; ω_0 — частота оптических колебаний и M — средняя масса ионов; a — постоянная решетки;

— *в области высоких температур* ($T \gg \theta$)

$$\tau = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \frac{Ma^3 (\hbar\omega_0)^2 \varepsilon^{\frac{1}{2}}}{z^2 e^4 m^{\frac{1}{2}} kT}, \tag{5.91}$$

$$l = \tau v = \frac{a}{2\pi} \frac{M}{m} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\frac{ze^2}{a}}\right)^2 \frac{\varepsilon}{kT}. \tag{5.92}$$

Почти во всех явлениях переноса весьма серьезную роль играет зависимость длины свободного пробега электрона от энергии (так как она определяет среднюю энергию электронов в потоке). Как мы видели, во всех рассмотренных выше случаях эта зависимость носит степенной характер, таким образом, мы можем написать

$$l \sim \varepsilon^r. \tag{5.93}$$

При рассеянии на ионах примеси $r = 2$, при рассеянии на акустических колебаниях $r = 0$, при рассеянии на оптических колебаниях ионных кристаллов $r = 1/2$ при $T < \theta$ и $r = 1$ при $T > \theta$.

Получив явные выражения для $\tau(\varepsilon)$, мы можем их подставить в (5.67), а затем f_1 — в (5.68) и таким образом вычислить плотность тока, электропроводность и подвижность.

При этом для невырожденного электронного газа с изотропной эффективной массой получаются следующие выражения для подвижности.

Подвижность при рассеянии на акустической ветви тепловых колебаний

$$u = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{e}{m} \frac{\tau_{0\text{ак}}}{(kT)^{\frac{3}{2}}}, \tag{5.94}$$

где $\tau_{0\text{ак}}$ — коэффициент в выражении для времени релаксации, не зависящий от температуры и энергии,

$$\tau_{0\text{ак}} = \frac{9\pi}{4\sqrt{2}} \frac{M\omega^2\hbar^4}{\Omega_0 C^2 m^{\frac{3}{2}}}. \tag{5.95}$$

Подвижность при рассеянии на ионах примеси

$$u = \frac{8}{\sqrt{\pi}} \frac{e}{m} \tau_{0\text{и}} (kT)^{\frac{3}{2}}, \tag{5.96}$$

где [см. (5.82) и (5.83)]

$$\tau_{0\text{и}} = \frac{\varkappa^2 m^2 A}{2\pi N_{\text{и}} e^4} \tag{5.97}$$

($N_{\text{и}}$ — число ионов в единице объема $N_{\text{и}} = a^{-3}$).

Подвижность при рассеянии на оптических колебаниях ионных кристаллов:

— *в области низких температур* $(T < \theta)$

$$u = \frac{e}{m} \tau_{0\text{опт}} e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}}, \tag{5.96а}$$

где

$$\tau_{0\text{опт}} = \frac{3\sqrt{2}}{4\pi} \frac{Ma^3 (\hbar\omega_0)^{3/2}}{z^2 e^4 m^{1/2}}; \tag{5.97а}$$

— *в области высоких температур* $(T \gg \theta)$

$$u = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{e}{m} \frac{\tau_{0\text{опт}}}{(kT)^{1/2}}, \tag{5.96б}$$

где

$$\tau_{0\text{опт}} = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \frac{Ma^3 (\hbar\omega_0)^2}{z^2 e^4 m^{1/2}} . \tag{5.97б}$$

При произвольной степени вырождения и простой зонной структуре из (5.68) в общем случае получаем следующие выражения для электропроводности

$$\sigma = \frac{j}{E} = \frac{16\pi m e^2}{3h^3} l_0 (T) (kT)^{r+1} F_r (\mu^*) \tag{5.68а}$$

и подвижности

$$u = \frac{\sigma}{en}, \tag{5.68б}$$

где

$$n = 4\pi \left(\frac{2mkT}{h^2} \right)^{3/2} F_{1/2} (\mu^*).$$

5.5. ЯВЛЕНИЯ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Все выводы относительно подвижности и электропроводности, сделанные выше, основывались на двух предположениях: 1) направленная добавка к скорости Δv_x [см. формулу (5.2)] мала по сравнению с тепловой скоростью v_0 и 2) концентрация носителей электричества не зависит от поля и остается равновесной, определяемой статистикой Максвелла — Больцмана или Ферми. В действительности оба эти условия соблюдаются в полупроводниках до определенных для каждого материала и температуры критических полей; новые эффекты, которые происходят при нарушении хотя бы одного из этих условий, называются явлениями в сильных полях. На них мы и остановимся коротко в этом параграфе.

В первую очередь — это отступления от закона Ома, т. е. нарушение линейной зависимости тока от напряжения. Согласно формулам

$$j = \sigma E \text{ и } \sigma = enu \tag{5.98}$$

это будет иметь место, когда либо подвижность, либо концентрация носителей начнут зависеть от поля.

Рассмотрим каждое из этих явлений в отдельности.