

ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ. I

Б. И. Давыдов и И. М. Шмушкевич

1. ВВЕДЕНИЕ

Для построения электронной теории твердого тела обычно исходят из следующей модели: каждый из электронов движется, независимо один от другого, в силовом поле, состоящем из поля всех ионов или атомов, расположенных в узлах кристаллической решетки и поля всех остальных (кроме данного) электронов, усредненного по их движению. Следует сказать, что обоснования такого способа рассмотрения, называемого методом Хартри, до сих пор не существует. В защиту его можно указать на успешное применение этого метода к атомам. Несомненно также и то, что очень большое количество выводов, полученных с его помощью для кристаллов, также находится в довольно хорошем согласии с опытными данными. Существуют, однако, факты, до сих пор не находящие удовлетворительного объяснения в теории. Главным из них, безусловно, является сверхпроводимость. Возможно, что отсутствие объяснения этого явления связано с указанным несовершенством теории.

Сущность метода Хартри заключается в том, что он позволяет многоэлектронную задачу свести к одноэлектронной.

Благодаря периодичности кристаллической решетки потенциальная энергия электрона также является трояко-периодической функцией его координат. Этого факта оказывается достаточно для определения общего вида волновой функции электрона ψ^1 . Пусть $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ — три вектора, характеризующие элементарную ячейку кристалла (длины ребер ее соответственно a_1 , a_2 , a_3). В таком случае свойство периодичности потенциальной энергии электрона V может быть выражено следующим образом:

$$V(\mathbf{r} + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3) = V(\mathbf{r}), \quad (1,1)$$

где n_1 , n_2 , n_3 — три произвольных целых числа.

Плотность вероятности нахождения электрона в каком-либо месте $|\psi(\mathbf{r})|^2$, очевидно, также должна обладать этим свойством периодичности:

$$|\psi(\mathbf{r} + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2. \quad (1,2)$$

На функцию ψ обычно накладывается условие цикличности

$$\psi(\mathbf{r} + G\mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r}), \quad (1,3)$$

где G — очень большое число, так что длина $L = Ga$ обладает макроскопическими размерами. Часть кристалла, имеющую форму параллелепипеда с ребрами Ga_1 , Ga_2 , Ga_3 , мы будем называть основной областью.

Физически ясно, что если кристалл достаточно велик, то выбор граничных условий для функции ψ не существен. Из уравнения (1,2) мы заключаем, что

$$\left. \begin{aligned} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_1) &= \mu_1 \psi(\mathbf{r}), \\ \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_2) &= \mu_2 \psi(\mathbf{r}), \\ \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_3) &= \mu_3 \psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \right\} \quad (1,4)$$

Множители μ_1 , μ_2 , μ_3 по модулю равны единице; фазу их позволяют определить уравнения (1,3).

Из этих уравнений следует, что

$$\mu_1^G = \mu_2^G = \mu_3^G = 1. \quad (1,5)$$

Таким образом,

$$\mu_x = e^{i \frac{2\pi z_x}{b}} \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (1,6)$$

z_1 , z_2 , z_3 — три целых числа, каждое из которых может принимать G значений, например, от 0 до G или от $-\frac{G}{2}$ до $+\frac{G}{2}$ (оба граничных значения эквивалентны, так как $e^{2\pi i} = 1$). Легко видеть, что функция

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} t}{\hbar}} \quad (1,7)$$

удовлетворяет уравнениям (1,4) с коэффициентами μ_1 , μ_2 , μ_3 , определяемыми формулами (1,6), если $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — функция, обладающая той же периодичностью, что и функция $V(\mathbf{r})$ и волновой вектор

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{b} (z_1 \mathbf{b}_1 + z_2 \mathbf{b}_2 + z_3 \mathbf{b}_3), \quad (1,8)$$

где

$$\mathbf{b}_1 = \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{a_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{a_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{a_1 [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}$$

так называемые масштабные векторы обратной решетки. Вектор $\mathbf{k}$ очевидно, может принимать $G^3 = N$ различных значений. N — число атомов в основной области.

Волновая функция электрона представляет собой модулированную плоскую волну, т. е. плоскую волну, амплитуда которой периодически меняется.

Такая волна, не рассеиваясь, могла бы проходить через весь кристалл, если бы решетка последнего была идеальной. Электрическое сопротивление кристалла равнялось бы нулю. Таким образом, мы приходим к выводу, что сопротивление кристалла обусловлено отклонением силового поля, в котором движется электрон, от идеальной периодичности. Подробнее об этом мы будем говорить позже, когда будем количественно определять электропроводность.

Если составить волновой пакет из функций (1,7), то можно показать, что групповая скорость его

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}}. \quad (1,9)$$

Мы видим, следовательно, что поведение электрона в периодическом поле сильно напоминает поведение свободного электрона. Величина $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, играющая роль импульса, называется квазиимпульсом. Связь между квазиимпульсом и групповой скоростью электрона в кристалле [уравнение (1,9)] такая же, как между импульсом и скоростью свободного электрона. Квазиимпульс, однако, — неоднозначно определенная величина. Легко видеть, что прибавление к волновому вектору $\mathbf{k}$ вектора $\mathbf{g} = 2\pi(n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3)$ не меняет вида волновой функции электрона (1,7), ибо $e^{i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}}$ также обладает периодичностью решетки. Чтобы устранить эту периодичность, пользуются обычно приведенным волновым вектором, составляющие которого на оси $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ минимальны по абсолютному значению, т. е. z_1, z_2, z_3 в формуле (1,8) могут принимать значения $-\frac{G}{2}, -\frac{G}{2} + 1, -\frac{G}{2} + 2, \dots, +\frac{G}{2}$. В простой кубической решетке с постоянной a компоненты квазиимпульса $k_x = -\frac{2\pi z_x}{ba}, k_y = \frac{2\pi z_y}{ba}, k_z = \frac{2\pi z_z}{ba}$.

Чтобы определить характер энергетического спектра электрона в кристалле, т. е. определить совокупность возможных значений энергии электрона в кристалле, будем исходить из поведения электрона в отдельном атоме. На рис. 1 изображена зависимость потенциальной энергии внешнего (валентного) электрона от расстояния до соответствующего этому электрону атомного остатка (начало координат на рис. 1).

Как известно из квантовой механики, энергетический спектр электрона в атоме состоит из дискретного ряда отдельных уровней (горизонтальные прямые на рис. 1), которые переходят в сплошной фон, когда полная энергия электрона становится положительной (потенциальная энергия на бесконечности считается равной нулю).

Если имеется система из N атомов, находящихся на больших расстояниях друг от друга, то вместо каждого атомного уровня будет N одинаковых уровней всей системы. Другими словами, будет N -кратное вырождение каждого уровня. При сближении атомов, образующих кристаллическую решетку, благодаря возмущению, вызываемому электрическим взаимодействием атомов, произойдет расщепление уровней. Из каждого атомного уровня получится

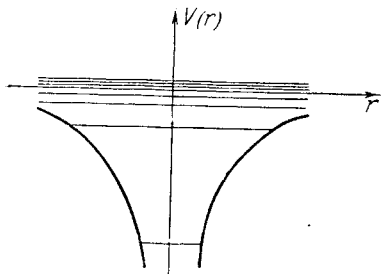


Рис. 1

целая полоса густо расположенных уровней. Число уровней в такой полосе равно числу атомов решетки, или, что практически то же самое, числу атомов в основной области. Если решетка состоит из различных атомов, например, ZnS , то число уровней в полосе равно числу элементарных ячеек в кристалле. При этом в кристалле имеются полосы, происшедшие как от атомных уровней Zn , так и от атомных уровней S . Таким образом, число уровней в полосе в точности равно числу возможных значений волнового вектора. Каждому уровню в полосе можно привести в соответствие определенный волновой вектор $\mathbf{k}$. Состояние электрона поэтому полностью определено (если не говорить пока о его спине), когда заданы его квазиимпульс и энергетическая полоса, к которой относится его энергия.

Энергетические полосы, или, как их часто называют, зоны, отделены одна от другой так называемыми запрещенными зонами, соответствующими таким значениям энергии, которыми электрон не может обладать в решетке. Чем выше расположен атомный уровень, т. е. чем дальше находится электрон от соответствующего ему ядра, тем меньше он связан с атомом, тем больше расщепляется атомный уровень в кристаллической решетке и тем легче электрон переходит от одного атома к другому. Способность электрона проникать через потенциальные барьеры между атомами, даже если его энергия меньше высоты этих барьеров, есть чисто квантовый эффект. С этим эффектом связано то, что волновая функция электрона

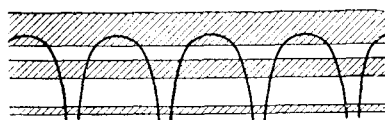


Рис. 2

представляется плоской волной, могущей проходить через весь кристалл. На рис. 2 показан общий вид энергетического спектра электронов в кристалле. Дозволенные зоны (заштрихованные полосы) чередуются с запрещенными. Ширина

дозволенных зон, как правило, увеличивается, а ширина запрещенных участков уменьшается с увеличением энергии. Ширина и тех, и других порядка атомной энергии, т. е. порядка одного или нескольких электрон-вольт.

В общем случае, энергия электрона ε есть некая сложная функция квазиимпульса, определить которую весьма затруднительно. Можно, однако, указать зависимость энергии от составляющих квазиимпульса, когда энергия электрона находится вблизи нижнего или верхнего края разрешенной полосы.

В первом случае разложим энергию в ряд по составляющим квазиимпульса вблизи нижнего края разрешенной полосы, обозначив энергию его через ε_1 . Тогда

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} m_{\alpha\beta}^{-1} k_{\alpha} k_{\beta}. \quad (1.10)$$

Линейные члены в этом разложении отсутствуют, так как мы рассматриваем область вблизи минимума энергии. Симметричный тензор $m_{\alpha\beta}^{-1}$ называется тензором обратной массы.

В кубической решетке он, в простейшем случае, превращается в скаляр. Энергия электрона в этом случае

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_-} \quad (1,11)$$

m_- называется эффективной массой по аналогии с соответствующей формулой для свободных электронов. Скорость электронов согласно формуле (1,9)

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m_-} \quad (1,12)$$

Однако, в кубической решетке могут также получиться три сливающиеся полосы, у которых главные оси тензора обратной массы повернуты друг относительно друга на $\frac{\pi}{2}$.

Для определения зависимости энергии от квазиимпульса вблизи верхнего края разрешенной полосы, введем вектор $\mathbf{k}'$, составляющие которого определяются следующим образом:

$$k'_x = \begin{cases} -k_x + k_x^{\max} & \text{при } k_x > 0 \text{ (тогда } k'_x > 0) \\ -k_x + k_x^{\min} = -k_x - k_x^{\max} & \text{при } k_x < 0 \text{ (тогда } k'_x < 0). \end{cases} \quad (1,13)$$

Тогда

$$\varepsilon = \varepsilon_2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} m_{\alpha\beta}^{-1} k'_\alpha k'_\beta, \quad (1,14)$$

где ε_2 — энергия верхнего края разрешенной полосы. Для электронов с вырожденным тензором обратной массы

$$\varepsilon = \varepsilon_2 - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_+} \quad (1,15)$$

Скорость электрона в этом случае

$$\mathbf{v} = -\frac{\hbar \mathbf{k}'}{m_+}, \quad (1,16)$$

или

$$v_x = -\frac{\hbar (k_x^{\max} - k_x)}{m_+} \quad (1,16')$$

(при $k_x > 0$).

Таким образом, для состояний, энергия которых расположена близко к верхнему краю разрешенной полосы, скорость электрона уменьшается с увеличением его квазиимпульса [формула (1,16')], а энергия с увеличением скорости уменьшается [см. формулу (1,15)]. Этому парадоксальному, на первый взгляд, факту не следует удивляться, так как электроны на самом деле не свободны, а движутся в периодическом поле, и сходство между движением свободного электрона и движением электрона в периодическом поле не должно простирается как угодно далеко.

Можно показать, что благодаря тому, что волновая функция электрона в кристалле является плоской модулированной волной, движение волнового пакета, составленного из функций (1,7), под

действием внешнего электрического поля подчиняется законам классической механики (теорема Эренфеста для электронов в периодическом поле)

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{E}. \quad (1,17)$$

Здесь и в последующем заряд электрона обозначается через $-e$, так что e — положительная величина.

С помощью (1,12) для электронов, энергия которых расположена близко к нижнему краю полосы, получаем обычное соотношение

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E}. \quad (1,18)$$

Для состояний же, расположенных близко к верхнему краю полосы, уравнение (1,17) дает

$$-m_+ \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E}, \quad (1,18')$$

т. е. электроны в таких состояниях ведут себя во внешнем поле как частицы с отрицательным зарядом и отрицательной массой. Энергетические уровни, свободные от таких электронов, эквивалентны наличию частиц с положительным зарядом и положительной массой.

Мы выяснили вопрос о характере волновой функции электрона в кристалле, об энергетическом его спектре и о движении во внешнем электрическом поле.

Переходим к вопросу о распределении электронов по энергетическим уровням. При абсолютном нуле температуры любая система стремится к минимуму энергии. Вследствие этого, казалось бы, все электроны должны при абсолютном нуле находиться в одном и том же состоянии, соответствующем минимальной возможной их энергии. Согласно принципу Паули, однако, в каждом состоянии может находиться лишь один электрон. Поэтому в состоянии с определенной энергией и квазиимпульсом могут находиться максимум два электрона, состояния которых отличаются противоположным направлением проекции спина на какую-либо ось. При абсолютном нуле, следовательно, число самых низких занятых уровней равно числу электронов в кристалле. При этом может быть два случая: либо к самому высокому из занятых при абсолютном нуле энергетических уровней непосредственно примыкают другие уровни (рис. 3), либо электроны заполняют целиком некоторое количество самых низких зон, а следующая за ними, по высоте, зона совершенно свободна (рис. 4).

Если к кристаллу, относящемуся к первому типу, приложить электрическое поле, то электроны, разгоняясь в нем, будут иметь возможность переходить на энергетически более высокие уровни. Так как в направлении поля будет двигаться больше электронов, чем в противоположную сторону, то в результате возникнет электрический ток.

Из того, что мы говорили о движении электронов в идеальной кристаллической решетке, следует, что электрическое сопротивление

обуславливается рассеянием электронных волн, происходящим из-за наличия отклонений в силовом поле решетки от идеальной периодичности. Существуют двоякого рода причины, приводящие к такому отклонению. Во-первых, это могут быть искажения, вызванные механической порчей кристалла, отсутствием в каких-либо узлах решетки соответствующих им атомов, включением в решетку атомов посторонних веществ — примесей и т. п. Во-вторых, отклонения от периодичности вызываются тепловыми колебаниями атомов. В идеальном монокристалле действует, очевидно, только последняя причина. Но при понижении температуры тепловое движение умень-

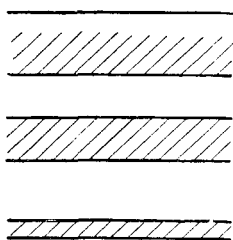


Рис. 3

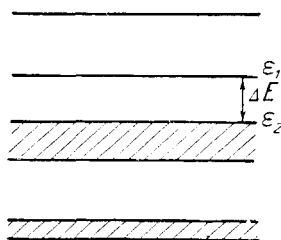


Рис. 4

шается. Поэтому у чистых монокристаллов, у которых имеется не полностью занятая разрешенная полоса, сопротивление с понижением температуры уменьшается.

Если же приложить поле к кристаллу второго типа (в котором распределение электронов по энергетическим уровням при абсолютном нуле изображено на рис. 4), то при абсолютном нуле оно не вызовет никакого тока.

В самом деле, для того чтобы электрон мог увеличить свою энергию в электрическом поле, должны быть свободными более высокие энергетические уровни, чем те, на которых находятся электроны. Их в заполненной зоне нет. Ближайшие свободные уровни отделены от электронов заполненной полосы участком запрещенной зоны ΔE , шириной порядка нескольких электрон-вольт. Для того чтобы внешнее поле могло, с помощью туннельного перехода, перебросить электроны из заполненной зоны в свободную в скольконибудь заметном количестве, оно должно быть очень большим, порядка 10^6 В/см.

Применяемые на практике поля значительно меньше. Поэтому кристаллы, у которых целиком заполненная зона отделена большим промежутком от совершенно свободной зоны, являются согласно излагаемой здесь схеме совершенными изоляторами при абсолютном нуле.

При температуре, отличной от абсолютного нуля, тепловое движение забрасывает небольшое количество электронов из заполненной полосы в пустую. С повышением температуры количество электронов в верхней зоне, т. е. электронов проводимости, возрастает. Вместе с тем, освобождение равного числа уровней в заполненной зоне

также обуславливает некоторую проводимость. С увеличением концентрации электронов проводимости, при повышении температуры, электропроводность возрастает по экспоненциальному закону.

Таким образом, мы приходим к существованию двух типов кристаллов, кардинально отличающихся по зависимости их электрического сопротивления от температуры. У одних, имеющих незаполненные энергетические зоны, сопротивление при абсолютном нуле равно нулю; с повышением температуры оно возрастает. Такие вещества являются металлами.

У других, при абсолютном нуле все самые низкие зоны целиком заполнены, а следующая за ними зона совершенно свободна. Сопротивление их при этом равно бесконечности. При повышении температуры появляется небольшая электронная проводимость, и сопротивление, во всяком случае при низких температурах, экспоненциально уменьшается. Эти вещества называются электронными полупроводниками.

Такой принцип разделения веществ на металлы и полупроводники по зависимости их сопротивления от температуры (при низких температурах) является в настоящее время единственным теоретически разумным.

Указание на низкие температуры связано с тем, что при высоких температурах характер изменения сопротивления полупроводников, как это будет далее видно, может в некоторых случаях измениться.

Полупроводников или диэлектриков, у которых ионная электропроводность играет главную роль, мы в этом обзоре рассматривать не будем.

Электрические свойства полупроводников сильно зависят от внешних условий. Так, например, освещая полупроводник светом, можно перебросить некоторое количество электронов из заполненной зоны в зону проводимости и, таким образом, создать добавочную проводимость — фотопроводимость. Сильное влияние температуры (экспоненциальный рост электропроводности) уже было упомянуто. В связи с малым количеством электронов проводимости (сравнительно с металлами) все термоэлектрические эффекты в полупроводниках значительно больше, чем у металлов. Это происходит потому, что в металлах предельная энергия, т. е. та энергия, ниже которой при абсолютном нуле все состояния заняты, а выше которой все они свободны, — порядка нескольких электрон-вольт, т. е. значительно больше kT . Поэтому для большинства металлов, вплоть до температуры плавления решетки, функция распределения электронов, т. е. распределение электронов по энергетическим уровням, очень мало отличается от функции распределения при абсолютном нуле. В полупроводниках же распределение электронов по различным уровням в зоне проводимости очень сильно зависит от температуры.

Как уже указывалось, примеси, искажая решетку, обуславливают собой рассеяние электронных волн и этим самым создают добавочное электрическое сопротивление веществ. В металлах при низких температурах это проявляется в виде так называемого остаточного сопротивления (тепловое движение атомов и соответствующее ему

сопротивление уже очень малы). В полупроводниках роль примесей не ограничивается влиянием только на рассеяние электронов и тем самым на уменьшение длины свободного пробега.

Посторонние атомы обладают системой термов (энергетических уровней), отличающихся от термов кристалла. Так как, однако, атомы примесей находятся на больших расстояниях друг от друга, то эти дополнительные энергетические уровни локализованы. Это значит, что электроны могут находиться на примесном уровне только в том месте, где находится соответствующий этому уровню атом примеси, и не могут двигаться по кристаллу.

Примерная картина уровней, при наличии в решетке посторонних атомов, показана на рис. 5. Атомы, из которых построена решетка, обозначены буквой *a*, атом примеси — буквой *b*. Рисунок этот, конечно, упрощен, так как благодаря возмущению, вносимому атомом *b*, система термов в атомах *a*, непосредственно прилегающих к *b*-атому, несколько искажается. Для понимания принципиальной сущности дела эта неточность несущественна.

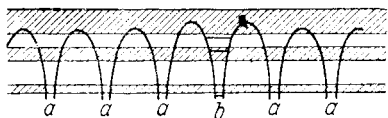


Рис. 5

Примесные уровни могут попасть в область запрещенной зоны между совсем заполненной и совсем пустой зонами. На этих уровнях может находиться некоторое число электронов. Естественно, что тепловому движению легче перебросить электроны в зону проводимости с этого уровня примеси, чем из заполненной полосы. Являясь, таким образом, источниками электронов проводимости, примеси оказывают сильное влияние на электропроводность полупроводников. Эта модель примесного полупроводника впервые предложена и рассчитана Вильсоном². Элементарное изложение теории имеется в ряде статей обзорного характера³.

Примеси могут также играть роль уровней прилипания электронов. В этом случае они способствуют проводимости благодаря тому, что электроны переходят на них из заполненной зоны и тем самым освобождают в ней некоторое количество уровней.

Когда вся зона целиком заполнена, в ней имеется одинаковое количество электронов,двигающихся в противоположные стороны. Поэтому результирующий ток всех электронов заполненной зоны равен нулю. Если зона частично заполнена, то при отсутствии поля ток также равен нулю. Под влиянием внешнего электрического поля распределение электронов становится асимметричным. Большая часть электронов движется в направлении, противоположном полю (отрицательный заряд электрона). Плотность электрического тока, обусловленная электронами одной зоны,

$$\mathbf{i} = -e \sum_i n_i \mathbf{v}_i. \quad (1,19)$$

Здесь n_i — число электронов в i -ом квантовом состоянии (согласно принципу Паули оно равно нулю или единице). Суммирование производится по всем квантовым состояниям зоны.

Формулу (1,19) удобно в случае почти заполненной полосы преобразовать следующим образом:

$$\mathbf{i} = -e \sum_i \mathbf{v}_i + e \sum_i (1 - n_i) \mathbf{v}_i = +e \sum_i (1 - n_i) \mathbf{v}_i. \quad (1,20)$$

Первый член $e \sum_i \mathbf{v}_i$ дает ток целиком заполненной зоны; поэтому он равен нулю. Так как электроны движутся преимущественно против поля, то среди незаполненных уровней больше таких, которые соответствуют скорости, направленной по полю.

Формулу (1,20) можно поэтому трактовать так: в i -ом квантовом состоянии находится $1 - n_i$ «дырок», движущихся со скоростью $\mathbf{v}_i$ (направленной преимущественно по полю) и зарядом $+e$.

Аналогично электрическому току можно преобразовать поток энергии электронов почти заполненной полосы

$$\mathbf{S} = \sum_i n_i (\varepsilon_i - e\varphi) \mathbf{v}_i, \quad (1,21)$$

где $e\varphi$ — потенциальная энергия электронов во внешнем поле. Далее,

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \sum_i (\varepsilon_i - e\varphi) \mathbf{v}_i - \sum_i (1 - n_i) (\varepsilon_i - e\varphi) \mathbf{v}_i = \\ &= \sum_i \varepsilon_i \mathbf{v}_i - e\varphi \sum_i \mathbf{v}_i - \sum_i (1 - n_i) (\varepsilon_i - e\varphi) = \\ &= - \sum_i (1 - n_i) (\varepsilon_i - e\varphi) \mathbf{v}_i. \end{aligned} \quad (1,22)$$

Для состояний, расположенных близко к верхнему краю разрешенной полосы, согласно формуле (1,15) $\varepsilon_i = \varepsilon_2 - \varepsilon'$, где $\varepsilon' = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_+}$.

Поэтому

$$\mathbf{S} = \sum_i (1 - n_i) (\varepsilon' - \varepsilon_2 + e\varphi) \mathbf{v}_i. \quad (1,23)$$

Эту формулу можно трактовать аналогично формуле (1,20). При этом надо будет считать, что ε' — «кинетическая энергия» дырок, а $-\varepsilon_2 + e\varphi$ — их потенциальная энергия.

Таким образом, уравнения (1,15), (1,18), (1,20) и (1,23) показывают, что свободные уровни в почти заполненной полосе («дырки») можно рассматривать как частицы, которым следует приписать: положительный заряд $+e$, эффективную массу m_+ , квазиимпульс $\hbar \mathbf{k}$, кинетическую энергию $\varepsilon' = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_+}$ и потенциальную энергию $+e\varphi - \varepsilon_2$.

В полупроводниках число электронов в зоне проводимости, или дырок в почти заполненной полосе, очень мало, так что подавляющее их количество приходится на энергетическую область порядка kT вблизи соответствующего края полосы.

Так как kT гораздо меньше ширины зоны, то мы можем всегда для энергии электронов и дырок пользоваться формулами (1,11) и (1,15), ибо доля тех электронов, или дырок, для которых эти формулы неверны, ничтожно мала.

В первой части этого обзора, кроме введения и теплового равновесия электронов в решетке, будут еще рассмотрены: электропроводность в слабом поле, термоэлектрические, термо- и гальваномагнитные эффекты в полупроводниках с атомной и ионной решеткой, а также электропроводность полупроводников в сильных полях. Во второй части будут разобраны диффузионные явления и связанные с ними эффекты выпрямления, фото-эдс, а также контактные сопротивления.

Разделы первой части, посвященные полупроводникам с ионной решеткой, а также вся вторая часть являются изложением работ, выполненных в течение последних нескольких лет.

2. ТЕПЛОВОЕ РАВНОВЕСИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В РЕШЕТКЕ

Число атомов в единице объема твердого тела порядка 10^{24} . Таково же число уровней в каждой зоне. Поэтому, так как расстояние между соседними уровнями очень мало, можно считать, что уровни непрерывно заполняют всю зону. Каждой тройке чисел z_1, z_2, z_3 [см. формулу (1,8)] соответствует определенное состояние движения электрона. Следовательно, число состояний в элементе объема z -пространства $dz_1 dz_2 dz_3$

$$d\Phi = 2 dz_1 dz_2 dz_3. \quad (2,1)$$

Коэффициент два в этой формуле присутствует благодаря тому, что в каждом состоянии движения могут находиться два электрона, обладающих различной ориентацией спина. Из формулы (1,8) следует, что

$$dk_x = \frac{2\pi}{G} (b_{1,x} dz_1 + b_{2,x} dz_2 + b_{3,x} dz_3). \quad (2,2)$$

Поэтому

$$dk_x dk_y dk_z = \left(\frac{2\pi}{G}\right)^3 D dz_1 dz_2 dz_3, \quad (2,3)$$

где D — якобиан перехода от переменных z_1, z_2, z_3 к переменным k_x, k_y, k_z . Легко видеть, что он равен $\frac{1}{\Omega_0}$, где Ω_0 — объем элементарной ячейки кристалла. Так как $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, то формулы (2,1) и (2,3) дают

$$d\Phi = \frac{2}{h^3} \Omega dp_x dp_y dp_z, \quad (2,4)$$

где $h = 2\pi\hbar$, а Ω — объем кристалла.

Число электронов в единице объема и в элементе объема пространства квазиимпульсов $dp_x dp_y dp_z$ равно числу состояний $d\Phi$, помноженному на функцию распределения и разделенному на объем Ω

$$dn = f(p_x, p_y, p_z) \frac{2}{h^3} dp_x dp_y dp_z. \quad (2,5)$$

Как известно, электроны подчиняются статистике Ферми. Фермиевская функция распределения

$$f = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} + 1}. \quad (2,6)$$

Постоянная μ , называемая химическим потенциалом (в присутствии внешнего поля химический потенциал равен $\mu + u$, где u — потенциальная энергия электрона во внешнем поле), определяется из условия нормировки:

$$\frac{2}{h^3} \int_I \frac{dp_x dp_y dp_z}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1} + \frac{2}{h^3} \int_{II} \frac{dp_x dp_y dp_z}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1} + \sum_i \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}} + 1} = n. \quad (2,7)$$

Первый интеграл дает число электронов, находящихся в зоне проводимости (верхняя, почти пустая полоса), второй интеграл — число электронов в нижней, почти заполненной полосе уровней. Сумма $\sum_i$ дает число электронов, находящихся на локальных примесях уровней, n — полная концентрация электронов на всех этих уровнях.

Мы рассмотрим сейчас несколько простых случаев.

1. Имеется чистый полупроводник без примесей. Зональная структура уровней изображена на рис. 4. Условие нормировки (2,7) в этом случае сводится к требованию равенства числа электронов в зоне проводимости числу дырок в почти заполненной полосе. Функция распределения дырок

$$f' = 1 - f = \frac{1}{e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}} + 1}. \quad (2,8)$$

Если отсчитывать энергию от нижнего края зоны проводимости, то $\varepsilon = \Delta E - \varepsilon'$. Поэтому

$$f' = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon' + \Delta E + \mu}{kT}} + 1}. \quad (2,9)$$

Между электронами и дырками, таким образом, имеется полная симметрия. Если ввести еще химический потенциал дырок

$$\mu' = -\Delta E - \mu,$$

то функции (2,6) и (2,9) будут иметь одинаковый вид. Удобнее, однако, этого не делать. Итак, имеем:

$$n_- = n_+, \quad (2,10)$$

или

$$\int_I f dp_x dp_y dp_z = \int_{II} f' dp'_x dp'_y dp'_z. \quad (2,11)$$

n_- и n_+ — концентрации электронов и дырок соответственно.

Так как количество электронов и дырок в зоне проводимости и дырок в почти заполненной полосе мало, то можно ожидать, что для каждого из них, в отдельности, имеет место максвелловское распределение. Поэтому:

$$-\frac{\mu}{kT} \gg 1 \quad \text{и} \quad \frac{\Delta E + \mu}{kT} \gg 1. \quad (2,12)$$

В таком случае единицей в знаменателе формул (2,6) и (2,9) можно

пренебречь и мы получаем:

$$n_- = \frac{2}{h^3} e^{\frac{\mu}{kT}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_- kT}} dp_x dp_y dp_z = \frac{2}{h^3} (2\pi m_- kT)^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}}, \quad (2,13)$$

$$\begin{aligned} n_+ &= \frac{2}{h^3} e^{-\frac{\Delta E + \mu}{kT}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2}{2m_+ kT}} dp_x' dp_y' dp_z' = \\ &= \frac{2}{h^3} (2\pi m_+ kT)^{3/2} e^{-\frac{\Delta E + \mu}{kT}}. \end{aligned} \quad (2,14)$$

Из условия (2,10) находим

$$\mu = -\frac{\Delta E}{2} - \frac{1}{2} kT \lg \left(\frac{m_-}{m_+} \right)^{3/2}. \quad (2,15)$$

Если $kT \ll \Delta E$, то уравнение (2,15) означает, что уровень химического потенциала лежит почти точно в середине запрещенной зоны. Этим оправдывается предположение (2,12). Концентрация электронов и дырок

$$n_- = n_+ = \frac{2}{h^3} (2\pi \sqrt{m_- m_+} kT)^{3/2} e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}. \quad (2,16)$$

В формулах (2,15) и (2,16) ΔE — ширина запрещенной зоны.

2. В запрещенной зоне имеется n_0 локальных уровней (из-за наличия примесей в кристалле), которые при абсолютном нуле все заняты электронами. Мы предположим, во-первых, что энергия всех этих уровней одинакова и, во-вторых, что они расположены настолько ближе к зоне проводимости, чем к заполненной полосе, и что ширина запрещенной зоны так велика, что электроны заполненной полосы практически в тепловом равновесии участия не принимают [множитель $e^{-\frac{\Delta E + \mu}{kT}}$, имеющийся во втором интеграле формулы (2,7), в этом случае чрезвычайно мал]. Это значит, что можно пренебречь концентрацией дырок. Соответствующая схема уровней приведена на рис. 6. Пунктирная линия на нем дает положение локальных уровней примесей.

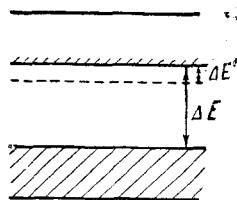


Рис. 6

Если обозначить через $\Delta E'$ разницу в энергии между нижним краем зоны проводимости и уровнем примесей, то из (2,7) получаем следующее уравнение для определения химического потенциала:

$$n_0 = \frac{n_0}{e^{\frac{-\Delta E' - \mu}{kT}} + 1} + \frac{2}{h^3} \int \frac{d\tau_p}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} + 1}. \quad (2,17)$$

Здесь $d\tau_p = dp_x dp_y dp_z$. Так как электронов в зоне проводимости

1) Здесь и в дальнейшем мы ограничиваемся изотропным случаем, когда тензоры обратной массы электронов и дырок вырождаются в скаляры.

в этом случае также мало, то, очевидно, $-\frac{\mu}{kT} \gg 1$ (как мы уже видели на предыдущем примере, это неравенство эквивалентно отсутствию вырождения электронного газа, в данном случае «газа» из электронов проводимости). В таком случае, из (2,17) имеем

$$n_0 = \frac{n_0}{e^{-\frac{\Delta E'}{kT} - \frac{\mu}{kT}} + 1} + \frac{2}{h^3} (2\pi m kT)^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}}. \quad (2,18)$$

Отсюда

$$\mu = -\Delta E' + kT \lg \frac{1}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{2n_0 h^3 e^{\frac{\Delta E'}{kT}}}{(2\pi m kT)^{3/2}}} - 1 \right]. \quad (2,19)$$

Это выражение весьма не наглядно; рассмотрим поэтому два предельных случая:

$$a) \frac{2n_0 h^3 e^{\frac{\Delta E'}{kT}}}{(2\pi m kT)^{3/2}} \gg 1,$$

тогда

$$\mu = -\frac{\Delta E'}{2} + kT \lg \frac{n_0^2 h^3}{2^{1/2} (2\pi m kT)^{3/4}}. \quad (2,20)$$

Концентрация электронов проводимости

$$n = \frac{2^{1/2} n_0^2 (2\pi m kT)^{3/4}}{h^{3/2}} e^{-\frac{\Delta E'}{2kT}}. \quad (2,21)$$

Функция распределения электронов в зоне проводимости

$$f = \frac{n_0^2 h^3}{2^{1/2} (2\pi m kT)^{3/4}} e^{-\frac{\frac{\Delta E'}{2} + \epsilon}{kT}}. \quad (2,22)$$

Число примесных уровней в единице объема примерно совпадает с числом атомов примеси. При концентрации последних $\approx 10^{17}$ на 1 см^3 и при $T \approx 300^\circ \text{ К}$ величина $\frac{n_0 h^3}{(2\pi m kT)^{3/2}} \approx 10^{-2}$, поэтому логарифмический член в уравнении (2,20) очень мал. Следовательно, уровень химического потенциала проходит посредине между уровнем примесей, служащих источниками электронов, и нижним краем зоны проводимости.

$$b) \frac{n_0 h^3 e^{\frac{\Delta E'}{kT}}}{(2\pi m kT)^{3/2}} \ll 1.$$

В этом случае

$$\mu = kT \lg \frac{n_0 h^3}{2(2\pi m kT)^{3/2}}. \quad (2,23)$$

Концентрация в зоне проводимости $n = n_0$. Физически этот случай означает, что температура столь велика, что все электроны с уровней примесей переходят в зону проводимости. Дальнейший рост

числа электронов с температурой прекращается, наступает насыщение. Чаще, повидимому, осуществляется случай «а», когда до насыщения еще далеко.

Все, что в этом примере говорилось об электронах, можно дословно повторить для дырок, если вместо уровней, являющихся источниками электронов («доноры»), имеются уровни прилипания («акцепторы»), близко расположенные к верхнему краю заполненной полосы.

3. Если уровни примесей попадают в зону проводимости или выше ее, то в ней (в этой зоне) будет всегда иметься определенное количество электронов, не зависящее от температуры. В этом случае получится, как говорят, «примесный металл». Если при этом концентрация «примесных» электронов настолько мала, что вырождения нет, то функция их распределения имеет вид:

$$f = (2\pi m_e kT)^{-3/2} n_0 e^{-\frac{E}{kT}}, \quad (2,24)$$

где n_0 — концентрация электронов в зоне проводимости (не зависящая от температуры).

4. Найбур⁴ рассмотрел недавно следующий случай: в единице объема, в запретной зоне, имеется n_0 примесных уровней, расположенных на одной высоте, вблизи нижнего края зоны проводимости. Из этих уровней только малая часть ν ($\nu \ll n_0$) при абсолютном нуле заполнена электронами. Условие нормировки (2,7) в этом случае дает

$$\nu = \frac{n_0}{e^{-\frac{\Delta E + \mu}{kT}} + 1} + \frac{2}{h^3} \int \frac{d^3 p}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1}. \quad (2,25)$$

Полагая опять, что $-\frac{\mu}{kT} \gg 1$, получаем для μ квадратное уравнение. Его решение:

$$\mu = -\Delta E + kT \lg \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\left[1 + \frac{(n_0 - \nu) h^3 e^{\frac{\Delta E}{kT}}}{2 (2\pi m_e kT)^{3/2}} \right]^2 + \frac{2 \nu h^3 e^{\frac{\Delta E}{kT}}}{(2\pi m_e kT)^{3/2}}} - \left[1 + \frac{(n_0 - \nu) h^3 e^{\frac{\Delta E}{kT}}}{2 (2\pi m_e kT)^{3/2}} \right] \right\}. \quad (2,26)$$

В области температур, далеких от насыщения,

$$\frac{\nu h^3 e^{\frac{\Delta E}{kT}}}{(2\pi m_e kT)^{3/2}} \gg 1 \quad (2,27)$$

и

$$\mu = -\Delta E + kT \lg \frac{n_0 + \nu}{2(n_0 - \nu)}, \quad (2,28)$$

т. е. уровень химического потенциала проходит вблизи уровня примеси. Это вполне понятно, так как для электронов имеется много

свободных мест на энергетически самом низком уровне — уровне примесей. Число электронов проводимости

$$n = \frac{n_0 + \nu}{n_0 - \nu} \frac{(2\pi m_- kT)^{3/2}}{h^3} e^{-\frac{\Delta E}{kT}}. \quad (2,29)$$

Мы разобрали несколько простейших случаев, которыми, конечно, не исчерпываются все возможности. Вряд ли имеет смысл рассматривать более сложные схемы без специальной на то необходимости, тем более, что разбор этих схем не представляет затруднений.

Качественно можно сказать, что если имеется несколько уровней в запрещенной полосе, то при низких температурах играют роль те уровни, которые ближе всего расположены к разрешенным зонам (для образования дырок важно, чтобы имелись уровни прилипания, расположенные близко к заполненной полосе). Когда при повышении температуры kT станет порядка ΔE_1 , где ΔE_1 — расстояние от ближайшего уровня примеси до края разрешенной зоны, наступит насыщение, связанное с переходом почти всех электронов с первого примесного уровня в разрешенную зону. При дальнейшем повышении температуры в игру войдут электроны с более низких уровней. При очень высокой температуре необходимо уже учитывать переходы из заполненной зоны в зону проводимости. Впрочем, если кроме уровней, поставляющих свои электроны, — источников — имеются еще уровни прилипания, близко расположенные к нижней зоне, то переходы из этой зоны на уровни прилипания начнутся и при более низкой температуре.

Так или иначе легко одновременно указать температурную зависимость концентраций электронов и дырок, если считать, что уровень химического потенциала проходит достаточно далеко и от нижнего края зоны проводимости, и от верхнего края почти заполненной полосы (что почти всегда имеет место).

Если через ΔE , как и в начале этого параграфа, обозначить ширину запрещенной зоны, то согласно уравнениям (2,13) и (2,14) концентрации электронов и дырок будут следующие:

$$n_- = \frac{2}{h^3} (2\pi m_- kT)^{3/2} e^{-\frac{\mu_-}{kT}}, \quad (2,30)$$

$$n_+ = \frac{2}{h^3} (2\pi m_+ kT)^{3/2} e^{-\frac{\Delta E - \mu_-}{kT}}. \quad (2,31)$$

Для полного знания зависимости n от T необходимо еще знать μ в функции от T . Во многих случаях, однако, относительное изменение химического потенциала с температурой очень мало. Поэтому уравнения (2,30) и (2,31) могут давать правильные зависимости n от T в довольно широких температурных областях, если приближенно считать μ не зависящим от температуры.

Если благодаря большому количеству примесей концентрация электронов проводимости или дырок станет порядка 10^{19} — 10^{20} см⁻³, то наступит вырождение и все соотношения будут носить более сложный характер.

3. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ В СЛАБОМ ПОЛЕ, ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ, ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ И ТЕРМОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ^{5,6}

При рассмотрении кинетики электронных процессов главную роль играет понятие времени свободного пробега электронов τ : это то время, в течение которого электрон в основном теряет составляющую своего квазиниमुльса в заданном направлении. Точнее, изменение составляющей квазинимульса в заданном направлении в единицу времени, благодаря рассеянию

$$-\frac{dp_x}{dt} = \frac{1}{\tau} p_x. \quad (3,1)$$

τ может зависеть от скорости. Длина свободного пробега $l = v\tau$.

Исследование полупроводников проводится, обычно, при таких высоких температурах, что рассеяние электронов, главным образом, происходит из-за тепловых колебаний атомов, а не из-за наличия примесей. Нашей задачей поэтому является определение вероятности рассеяния электрона, происходящего из-за наличия колебаний атомов решетки.

В первом приближении силы, возвращающие атомы в положение равновесия, являются квазиупругими. Колебания поэтому носят гармонический характер. Если в кристалле имеется N элементарных ячеек и в каждой ячейке s атомов, то число степеней свободы всей системы равно $3Ns$. Столько же будет независимых собственных колебаний с различными частотами ω . Собственное колебание кристалла, отвечающее частоте ω , имеет вид

$$u_k^l = e_k \cos(qr_k^l - \omega t + \varphi), \quad (3,2)$$

т. е. соответствует волне, бегущей через весь кристалл. В этой формуле r_k^l — радиус-вектор атома k -сорта l -ой элементарной ячейки, u_k^l — смещение этого атома из положения равновесия, q — волновой вектор упругой волны ($q = \frac{2\pi}{\lambda} n$, λ — длина волны, n — единичный вектор распространения волны), e_k — вектор поляризации.

Спектр упругих колебаний состоит из $3s$ ветвей⁷. Каждой длине волны и направлению ее распространения соответствует $3s$ колебаний, различающихся своей частотой и поляризацией. Из этих $3s$ ветвей только первые три (соответственно трем поляризациям) являются акустическими. Частота колебаний бесконечно длинных волн акустических колебаний равна нулю, и потому для длинных волн частота ω пропорциональна волновому вектору:

$$\omega = \omega q, \quad (3,3)$$

где ω — скорость звука. Все остальные колебания, соответствующие данному волновому вектору, обладают большими частотами. Они называются оптическими колебаниями. Длинноволновые оптические колебания обладают не обращающимися в нуль, при $q = 0$, частотами

ω_j^0 ($j=4,5,\dots, 3s$). Эти предельные частоты по порядку величины близки к дебаевской частоте. Опыты с остаточными лучами показывают, что величина $\theta = \frac{\hbar\omega_0}{k}$ в различных веществах колеблется от 100 до 1500° К.

В двухатомной решетке (в одной элементарной ячейке находятся два атома) при акустических длинноволновых колебаниях соседние атомы колеблются приблизительно в одной фазе, в оптических же колебаниях с большой длиной волны фазы соседних атомов или ионов смещены примерно на полпериода. В этом случае длинноволновые оптические колебания можно представлять себе как колебания решетки, составленной из атомов одного только сорта (находящихся в соответствующих им узлах) по отношению ко всей совокупности атомов другого сорта. С уменьшением длины волны разность фаз колебаний соседних атомов уменьшается.

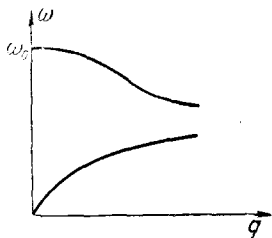


Рис. 7

Поэтому с возрастанием q частота оптических колебаний уменьшается (так как уменьшается сила, возвращающая атомы в положение равновесия). Характерный вид зависимости частоты ω от волнового вектора q изображен на рис. 7. Нижняя кривая соответствует акустической ветви, верхняя — оптической. В кубической решетке и для малых q можно определить эту зависимость (для оптической ветви) путем разложения ω в ряд по составляющим волнового вектора q_x, q_y, q_z . Именно:

$$\omega = \omega_0 + \sum_i a_i q_i + \sum_{ik} a_{ik} q_i q_k. \quad (3,4)$$

В силу кубической симметрии решетки материальный вектор с компонентами a_i равен нулю, а тензор второго ранга a_{ik} вырождается в скаляр. (3,4) мы можем поэтому переписать следующим образом:

$$\omega = \omega_0 (1 - \alpha a^2 q^2), \quad (3,5)$$

где a — расстояние между соседними атомами, а α — безразмерный коэффициент, который по порядку величины равен $\frac{\Delta\omega}{\omega_0}$; $\Delta\omega$ — ширина оптической ветви колебаний.

Произвольное смещение любой частицы решетки можно представить в виде суперпозиции всех собственных колебаний с различными амплитудами:

$$u_k^t = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,j} e_{k,qj} \left(a_{qj} e^{i q r_k^t} + a_{qj}^* e^{-i q r_k^t} \right). \quad (3,6)$$

Для удобства мы перешли к комплексной форме записи; по этим же причинам введен нормировочный множитель $\frac{1}{\sqrt{N}}$. Временные мно-

жители $e^{-i\omega t}$ и $e^{+i\omega t}$ включены в амплитуды a_{qj} и a_{qj}^* соответственно.

При этом векторы поляризации удовлетворяют соотношению ортогональности

$$\sum_k m_k \mathbf{e}_{k,j} \mathbf{e}_{k,j'} = 0 \text{ при } j \neq j'. \quad (3,7)$$

Их можно еще нормировать, положив

$$\sum_k m_k \mathbf{e}_{k,j}^2 = 1. \quad (3,8)$$

Полная энергия колебаний кристалла, т. е. сумма потенциальной и кинетической энергий, выражается следующим образом через амплитуду a_{qj} и a_{qj}^* :

$$H = 2 \sum_{q,j} \omega_{qj}^2 a_{qj} a_{qj}^*. \quad (3,9)$$

Полагая

$$a_{qj} = \frac{1}{2} \left(x_{qj} + i \frac{p_{qj}}{\omega_{qj}} \right),$$

получаем

$$H = \sum_{q,j} H_{qj}, \quad (3,10)$$

где

$$H_{qj} = \frac{1}{2} (p_{qj}^2 + \omega_{qj}^2 x_{qj}^2). \quad (3,11)$$

H_{qj} имеет вид гамильтоновой функции осциллятора с собственной частотой ω_{qj} и массой 1. При переходе к квантовомеханическому описанию x_{qj} и p_{qj} трактуются как операторы координаты и импульса соответствующего «упругого осциллятора». Как известно из квантовой механики, энергия такого осциллятора

$$E_{qj} = \hbar \omega_{qj} \left(N_{qj} + \frac{1}{2} \right), \quad (3,12)$$

где N_{qj} — колебательное квантовое число. Если осциллятор qj находится в N -ом квантовом состоянии, то принято говорить, что имеется N фононов сорта qj . Каждому фонону, кроме энергии $\hbar \omega_{qj}$, можно приписать еще импульс $\hbar \mathbf{q}$. Взаимодействуя с упругими колебаниями, электрон может поглотить или испустить фонон. Вероятность такого перехода определяется согласно теории возмущений и равна

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |u|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \hbar \omega_{qj}), \quad (3,13)$$

где $|u|$ — матричный элемент энергии взаимодействия электрона с упругими колебаниями. Он отличен от нуля только в том случае, когда

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} \pm \hbar \mathbf{q}; \quad (3,14)$$

функция же δ имеет очень острый максимум, когда ее аргумент равен нулю, и вдали от этой точки почти равна нулю. Поэтому

$$\varepsilon_{\mathbf{p}'} = \varepsilon_{\mathbf{p}} \pm \hbar \omega_{qj}. \quad (3,15)$$

Таким образом, в процессах столкновения электронов с фононами имеют место законы сохранения квазиимпульса (3,14) и энергии (3,15). Верхние знаки перед $\hbar\omega_q$ и $\hbar q$ в формулах (3,13), (3,14) и (3,15) относятся к поглощению фонона, нижние — к испусканию.

Соответственно изложенному выше мы рассмотрим отдельно полупроводники с простой атомной решеткой (в элементарной ячейке — один атом), обладающие только акустическими колебаниями, и полупроводники с ионной решеткой.

А. ПОЛУПРОВОДНИКИ С АТОМНОЙ РЕШЕТКОЙ

Из законов сохранения (3,14) и (3,15), с помощью соотношений $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ и $\omega = \tau q$, получаем:

$$\hbar q = \pm 2m\omega \mp 2p \cos \vartheta. \quad (3,16)$$

Верхние знаки относятся к поглощению фонона, нижние — к испусканию. ϑ — угол между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$. Так как скорость звука ω много меньше средней скорости электронов $v = \frac{p}{m}$, то первым членом в правой части (3,16) можно пренебречь для подавляющего большинства электронов. В таком случае по порядку величины

$$\hbar\omega = \hbar\tau q \approx mvv. \quad (3,17)$$

В самом деле, средняя энергия электронов в зоне проводимости $\bar{\varepsilon} \approx kT$ и, следовательно, средний квазиимпульс $\bar{p} \approx \sqrt{mkT}$. Поэтому

$$\frac{\bar{p}}{m\omega} \approx \frac{\sqrt{mkT}}{m\tau} = \sqrt{\frac{kT}{m\tau^2}}. \quad (3,18)$$

Если для скорости звука взять $2 \cdot 10^5$ см/сек, то при комнатных температурах $\frac{kT}{m\tau^2} \approx 0,001$.

Из уравнения (3,16) мы также заключаем, что во взаимодействии с электронами играют роль, главным образом, те фононы, импульс которых $\approx \sqrt{mkT}$. Соответствующая этому импульсу длина волны упругого колебания

$$\lambda = \frac{2\pi}{q} \approx \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{mkT}} \quad (3,19)$$

гораздо больше постоянной решетки. Но для таких длинных волн можно не только оценить порядок величины матричного элемента $|u|$, входящего в вероятность перехода (3,13), но и определить его зависимость от q . Не приводя вычислений⁸, дадим сразу результат: вероятность перехода оказывается пропорциональной волновому вектору q , и для испускания электроном фонона она равна

$$W_- = \frac{1}{N} W_0 q (N_q + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon \pm \hbar\omega_q). \quad (3,20)$$

Для поглощения фонона

$$W_+ = \frac{1}{N} W_0 q N_q \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_q). \quad (3,21)$$

По порядку величины

$$W_0 \approx \frac{V_a^2}{M \omega}, \quad (3,22)$$

где V_a — величина порядка атомной энергии, M — масса атома, N в знаменателе формул (3,20) и (3,21) — число атомов в кристалле (не путать с N_q — числом фононов). Таким образом, вероятность поглощения фонона пропорциональна числу имеющихся фононов данного сорта, а вероятность испускания складывается из вероятности спонтанного испускания и вероятности индуцированного испускания, причем последняя также пропорциональна N_q .

Так как решетку мы считаем находящейся в состоянии теплового равновесия, то N_q есть функция Планка

$$N_q = \frac{1}{\frac{\hbar \omega}{e^{kT}} - 1}. \quad (3,23)$$

Теперь мы можем перейти к кинетическому уравнению для электронов в зоне проводимости. Оно имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \left(e \nabla \varphi - \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}] \right) \nabla_p f = (b - a) f. \quad (3,24)$$

Здесь φ — электрический потенциал внешнего поля, $\mathbf{H}$ — магнитное поле, ∇ означает градиент в обычном пространстве, ∇_p — в пространстве квазиимпульсов. Члены $\mathbf{v} \cdot \nabla f + \left(e \nabla \varphi - \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}] \right) \nabla_p f$ дают уменьшение числа электронов в единице объема фазового пространства под влиянием внешнего поля и градиента концентрации. $(b - a) f$ означает перевес числа электронов, входящих в результате столкновений с фононами, в единицу объема фазового пространства, над электронами, выходящими по тем же причинам из этого объема.

Аналогично электронам число колебаний в элементе объема $dq_x dq_y dq_z$ равно [см. формулу (2,4)]

$$\frac{\Omega}{(2\pi)^3} dq_x dq_y dq_z.$$

Поэтому

$$(b - a) f = \frac{\Omega}{N(2\pi)^3} \left\{ \int W_0 q [f(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{q}) (N_q + 1) - f(\mathbf{p}) N_q] \times \right. \\ \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_q) dq_x dq_y dq_z + \\ \left. + \int W_0 q [f(\mathbf{p} - \hbar \mathbf{q}) N_q - f(\mathbf{p}) (N_q + 1)] \cdot \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \hbar \omega_q) dq_x dq_y dq_z \right\}. \quad (3,25)$$

При написании этого уравнения мы предположили, что концентрация электронов в зоне проводимости так мала, что можно пре-

пренебречь принципом Паули. Поэтому легко видеть, что в стационарном случае ($\frac{\partial f}{\partial t} = 0$) и при отсутствии внешнего возмущения [левая часть уравнения (3,24) равна нулю] максвелловская функция $f_0 = e^{\frac{\mu - e}{kT}}$ обращает $(b - a)f$ в нуль. В этом параграфе мы будем предполагать, что внешнее электрическое поле, а также градиент концентрации так малы, что функция распределения мало отличается от равновесной. Тогда можно положить

$$f = f_0 + \chi,$$

причем χ мало по сравнению с f_0 .

Так как члены $\mathbf{v} \cdot \nabla f + e \nabla \varphi \cdot \nabla_p f$ в левой части уравнения (3,24) не обращаются в нуль при подстановке f_0 вместо f , то в них мы можем пренебречь поправочной функцией χ . Наоборот, в правой части уравнения (3,24) и в том члене левой части, который содержит магнитное поле $\mathbf{H}$, мы должны удерживать функцию χ , так как $(b - a)f_0 = 0$ и $[\mathbf{v}, \mathbf{H}] \nabla_p f_0 = 0$. Таким образом, магнитное поле лишь постольку вызывает изменение в функции распределения, поскольку последняя отлична от равновесной. Поэтому в дальнейшем можно будет получать результаты, годные не только для слабого магнитного поля, но и для сильного.

Итак, в стационарном случае:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f_0 + e \nabla \varphi \cdot \nabla_p f_0 - \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}] \nabla_p \chi = (b - a) \chi. \quad (3,26)$$

Относительно функции χ сделаем предположение, что она имеет вид:

$$\chi = \frac{df_0}{dz} \mathbf{p} \cdot \mathbf{j}_-, \quad (3,27)$$

где $\mathbf{j}_-$ — вектор, зависящий лишь от энергии электрона, но не от направления его квазиимпульса. Переходя к сферическим координатам в q -пространстве, с осью Z , совпадающей с направлением вектора $\mathbf{p}$, имеем:

$$\begin{aligned} (b - a) \chi = & \frac{\Omega_0 W_0}{(2\pi)^3} \cdot \frac{df_0}{dz} \left\{ \int [j_-(z + \hbar\omega)(p_j + \hbar q_j) - j_-(z) p_j] N_q \times \right. \\ & \times \partial \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m_-} + \frac{\hbar p q}{m_-} \cos \vartheta - \hbar \omega q \right) q^3 dq \sin \vartheta d\vartheta d\varphi + \\ & + \int [j_-(z - \hbar\omega)(p_j - \hbar q_j) - j(z) \cdot p_j] (N_q + 1) \times \\ & \times \partial \left(-\frac{\hbar^2 q^2}{2m_-} + \frac{\hbar p q}{m_-} \cos \vartheta - \hbar \omega q \right) q^3 \cdot dq \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \Big\}, \quad (3,28) \end{aligned}$$

где, как и раньше, Ω_0 — объем элементарной ячейки кристалла. Интегрирование по углам выполняется легко. В самом деле:

$$\int \partial \left(\pm \frac{\hbar^2 q^2}{2m_-} + \frac{\hbar p q}{m_-} \cos \vartheta - \hbar \omega q \right) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \frac{4\pi m_-}{\hbar p q}. \quad (3,29)$$

Далее, $q_j = q (\cos \vartheta \cos \vartheta' + \frac{\sin \vartheta \sin \vartheta' \cos \varphi}{\cos \varphi})$, где ϑ' — угол между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{j}$. Так как $\cos \varphi = 0$, то

$$\int q_j d\vartheta \left(\pm \frac{\hbar^2 q^2}{2m_-} + \frac{\hbar p q}{m_-} \cos \vartheta - \hbar \omega q \right) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \\ = q \cos \vartheta' \frac{2\pi m_-}{\hbar p q} \cdot \frac{\pm \hbar q + m\omega}{2p} = q \frac{p_j}{p} \frac{2\pi m_-}{\hbar p q} \cdot \frac{\mp \hbar q + m\omega}{2p}. \quad (3,30)$$

Все это подставляется в (3,28). При этом границы интегрирования определяются из уравнения (3,16)

$$q_{\min} = 0, \quad q_{\max} = \frac{2p \pm 2m\omega}{\hbar} \approx \frac{2p}{\hbar}.$$

Итак,

$$(b-a)\chi = \frac{\Omega_0 W_0}{(2\pi)^3} \cdot \frac{df_0}{d\varepsilon} \cdot \frac{2\pi m_-}{\hbar p} \times \\ \times p_j \left\{ \int_0^{\frac{2p}{\hbar}} \left[j(\varepsilon + \hbar\omega) \left(1 - \frac{\hbar q}{p} \cdot \frac{\hbar q - m\omega}{2p} \right) - j(\varepsilon) \right] \frac{q^2 dq}{e^{\frac{\hbar\omega q}{kT}} - 1} + \right. \\ \left. + \int_0^{\frac{2p}{\hbar}} \left[j(\varepsilon - \hbar\omega) \left(1 - \frac{\hbar q}{p} \cdot \frac{\hbar q + m\omega}{2p} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - j(\varepsilon) \right] \left(\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega q}{kT}} - 1} + 1 \right) q^2 dq \right\}. \quad (3,31)$$

В подынтегральном выражении можно пренебречь $m\omega$ по сравнению с $\hbar q$, ибо последнее $\approx \sqrt{mkT}$. Далее, так как $\hbar\omega \approx \tau \sqrt{mkT}$ [см. (3,17)], то можно, во-первых, пренебречь $\hbar\omega$ по сравнению с ε в аргументе функций $j(\varepsilon + \hbar\omega)$ и $j(\varepsilon - \hbar\omega)$ и, во-вторых, разложить планковскую функцию по степеням $\frac{\hbar\omega q}{kT}$, ограничившись первым, не равным нулю, членом.

После таких упрощений интегрирование выполняется элементарно и дает:

$$(b-a) \left(\frac{df_0}{d\varepsilon} \cdot \mathbf{p} \cdot \mathbf{j} \right) = - \frac{\Omega_0 W_0 m k T}{\pi^2 \omega \hbar^4} p \frac{df_0}{d\varepsilon} = - \frac{1}{\tau} \frac{df_0}{d\varepsilon} \mathbf{p} \cdot \mathbf{j}. \quad (3,32)$$

Легко показать, что τ совпадает с определенным в начале этого параграфа временем свободного пробега. Существенно для дальнейшего, что оно обратно пропорционально температуре и скорости электрона. Длина свободного пробега поэтому не зависит от энергии.

$$l = \tau v = \frac{\pi^2 \omega \hbar^4}{\Omega_0 W_0 m^2 k T} \approx \pi^2 \frac{M \omega^2}{V_a} \cdot \frac{\hbar^2}{V_a} \cdot \frac{\hbar^2}{k T} \cdot a. \quad (3,33)$$

$\frac{M \omega^2}{V_a}$ и $\frac{\hbar^2}{V_a}$ порядка единицы, а $\frac{\hbar^2}{k T} \gg 1$ ($\frac{\hbar^2}{m a^2}$ порядка атом-

ной энергии); поэтому длина свободного пробега гораздо больше постоянной решетки.

Функция $f_0 = e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}}$, следовательно,

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f_0 + e \nabla \varphi \cdot \nabla_p f_0 = - \frac{\mathbf{p}}{m_-} \left[- \frac{\mu - \varepsilon}{T} \nabla T + \nabla (\mu - e \varphi) \right] \frac{df_0}{d\varepsilon}, \quad (3,34)$$

$$[\mathbf{v}, \mathbf{H}] \nabla_p \chi = \frac{\mathbf{p}}{m_-} \frac{df_0}{d\varepsilon} [\mathbf{H}, \mathbf{j}_-]. \quad (3,35)$$

При подстановке (3,32), (3,33), (3,34) и (3,35) в уравнение (3,27) вектор $\mathbf{p}$ сокращается. Этим оправдывается предположение (3,27) о виде функции χ . Остающееся после сокращения $\mathbf{p}$ уравнение для определения вектора $\mathbf{j}$ имеет вид:

$$\frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla (\mu - e \varphi) + \frac{e}{c} [\mathbf{H}, \mathbf{j}_-] = \frac{p}{l_-} \mathbf{j}_-. \quad (3,36)$$

Очевидно, такое же уравнение будет для дырок в почти заполненной полосе. Разница только в том, что знак заряда у дырок другой. Так же, как и массу, длину свободного пробега дырок и вектор $\mathbf{j}$ снабдим знаком $+$ в отличие от электронов, у которых эти же величины снабжены знаком $-$. Вспоминая, что химический потенциал дырок в отсутствии внешнего поля равен $-\Delta E - \mu$, имеем

$$\frac{\varepsilon' + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T + \nabla (-\mu + e \varphi) - \frac{e}{c} [\mathbf{H}, \mathbf{j}_+] = \frac{p'}{l_+} \mathbf{j}_+. \quad (3,37)$$

С помощью уравнений (3,36) и (3,37) можно рассчитать все интересные нас эффекты.

а. Электропроводность

Магнитное поле $\mathbf{H} = 0$, температура и концентрация всюду одинаковы. Полупроводник находится в однородном электрическом поле $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$, направление которого примем за ось X . С помощью уравнений (3,36) и (3,37) находим:

$$f = f_0 + \frac{df_0}{d\varepsilon} e E l_- \frac{p_x}{p}, \quad (3,38)$$

$$f' = f'_0 - \frac{df_0}{d\varepsilon} e E l_+ \frac{p'_x}{p}. \quad (3,39)$$

Плотность электрического тока

$$\begin{aligned} \mathbf{i} &= -e \int f \frac{\mathbf{p}}{m_-} \cdot \frac{2}{h^3} d\tau_p + e \int f' \frac{\mathbf{p}'}{m_+} \cdot \frac{2}{h^3} d\tau_{p'} = \\ &= \frac{4\pi}{3} e^2 \mathbf{E} \left\{ - \frac{l_-}{m_-} \cdot \frac{2}{h^3} \int_0^\infty \frac{df_0}{d\varepsilon} p^3 dp - \frac{l_+}{m_+} \cdot \frac{2}{h^3} \int_0^\infty \frac{df'_0}{d\varepsilon} p'^3 dp \right\}. \quad (3,40) \end{aligned}$$

Учитывая, что $\frac{2}{h^3} \int_0^\infty f_0 \cdot 4\pi p^2 dp = n_-$ и $\frac{2}{h^3} \int_0^\infty f'_0 \cdot 4\pi p'^2 dp' = n_+$, получаем

$$\mathbf{i} = (n_- u_- + n_+ u_+) e \mathbf{E}; \quad (3.41)$$

отсюда электропроводность

$$\sigma = e (n_- u_- + n_+ u_+). \quad (3.41')$$

Подвижность электронов и дырок

$$u_- = \frac{4el}{3\sqrt{2\pi m_- kT}} \quad \text{и} \quad u_+ = \frac{4el}{3\sqrt{2\pi m_+ kT}}. \quad (3.42)$$

Если длина свободного пробега электронов и дырок обратно пропорциональна температуре, то подвижность $u \approx \frac{1}{T^{1/2}}$. Поэтому главная зависимость электропроводности от температуры заключена в множителях n_- и n_+ (если данный полупроводник не является примесным металлом, и если мы находимся в области температур, далеких от насыщения). Как было установлено во втором разделе, концентрации электронов и дырок экспоненциально возрастают

с температурой: именно, $n_- \approx e^{-\frac{|u_-|}{kT}}$ и $n_+ \approx e^{-\frac{\Delta F - |u_+|}{kT}}$. Так как обычно концентрация носителей заряда одного знака гораздо больше концентрации носителей другого знака, то по такому же экспоненциальному закону возрастает с температурой и электропроводность.

Если откладывать по оси абсцисс $1/T$, а по оси ординат $\lg \sigma$, то график зависимости электропроводности от температуры будет прямой линией. Тангенс угла наклона этой прямой к оси X (умноженный на k) равен химическому потенциалу носителей, обуславливающих проводимость полупроводника (электронов или дырок).

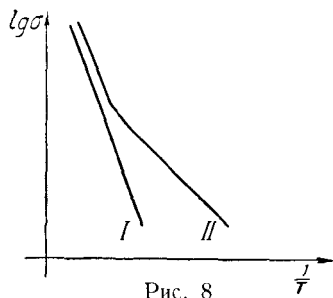


Рис. 8

При низких температурах этот химический потенциал приблизительно равен половине расстояния от соответствующей разрешенной полосы до уровня примесей (предположим, для простоты, что в запрещенной зоне все локальные уровни проходят на одной высоте). При высоких температурах он равен половине ширины всей запрещенной зоны. Поэтому график зависимости $\lg \sigma$ от $1/T$ имеет характерный вид кривой II на рис. 8. Грубо говоря, эта кривая состоит из двух прямых, плавно переходящих одна в другую.

Прямая I, являющаяся асимптотой для кривой II при высоких температурах, дает зависимость $\lg \sigma$ от $1/T$ для чистых полупроводников, лишенных примесей. Подобные кривые получались в опытах

Жузе и Курчатова⁹, которые изучали влияние примесей и температуры на электропроводность закиси меди (Cu_2O). По их измерениям ширина запрещенной зоны в этом полупроводнике равна 1,44 eV.

б. Термоэлектродвижущая сила

Магнитное поле попрежнему считаем равным нулю. В таком случае

$$\mathbf{j}_- = \frac{I_-}{p} \left[\frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right], \quad (3,43)$$

$$\mathbf{j}_+ = \frac{I_+}{p} \left[\frac{\varepsilon' + \Delta E + \mu}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right]. \quad (3,44)$$

Плотность тока

$$\begin{aligned} \mathbf{i} = & \frac{eI_+}{3m_+} \int_0^\infty p' \left[\frac{\varepsilon' + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right] \cdot \frac{2}{h^3} 4\pi p'^2 dp' - \\ & - \frac{eI_-}{3m_-} \int_0^\infty p \left[\frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right] \cdot \frac{2}{h^3} 4\pi p^2 dp. \end{aligned} \quad (3,45)$$

Интегрирование дает:

$$\begin{aligned} \mathbf{i} = & n_+ u_+ \left[\nabla(\mu - e\varphi) - \frac{(\Delta E + \mu) + 2kT}{T} \nabla T \right] + \\ & + n_- u_- \left[\nabla(\mu - e\varphi) - \frac{\mu - 2kT}{T} \nabla T \right]. \end{aligned} \quad (3,46)$$

Термоэлектродвижущая сила измеряется при токе, равном нулю. При этом условии находим:

$$\nabla \left(\varphi - \frac{\mu}{e} \right) = \frac{1}{e} \left[n_- u_- \cdot \frac{2kT - \mu}{T} - n_+ u_+ \cdot \frac{2kT + (\Delta E + \mu)}{T} \right] \nabla T. \quad (3,47)$$

Пусть наш проводник находится между двумя металлическими электродами, сделанными из одинакового материала, и пусть распределение температуры таково, как указано на рис. 9. Отрезок bc соответствует полупроводнику, ab и cd — металлические электроды, крайние точки которых a и d находятся при одинаковой температуре. В месте соприкосновения металла с полупроводниками имеются контактные разности потенциалов, вследствие чего в этих точках φ испытывает скачок; однако, $\varphi - \frac{\mu}{e}$ непрерывно.

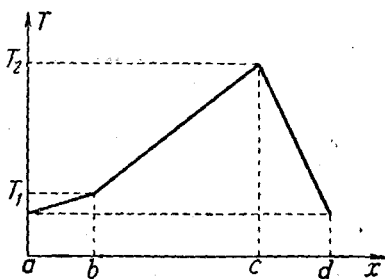


Рис. 9

Так как, с другой стороны, металл в точках a и d находится в одинаковом состоянии, то $\mu_a = \mu_d$. Поэтому, чтобы получить полную электродвижущую силу θ , надо проинтегрировать (3,47)

по всей цепи от a до d . Термо-эдс, вносимая металлом, очень мала; его можно пренебречь, и тогда

$$\begin{aligned} \theta &= \int_{T_1}^{T_2} \frac{n_- u_- \frac{2kT - \mu}{T} - n_+ u_+ \frac{2kT + (\Delta E + \mu)}{T}}{\sigma} dT = \\ &= \int_{T_1}^{T_2} \frac{k}{\sigma} \left[n_- u_- \left(2 + \lg \frac{2(2\pi m_- kT)^{3/2}}{h^3 n_-} \right) - \right. \\ &\quad \left. - n_+ u_+ \left(2 + \lg \frac{2(2\pi m_+ kT)^{3/2}}{h^3 n_+} \right) \right] dT. \end{aligned} \quad (3,48)$$

Если концентрация носителей одного знака гораздо больше концентрации носителей другого знака, то формула (3,48) сильно упрощается. В этом случае

$$\theta = \pm \frac{k}{e} \int_{T_1}^{T_2} \left[2 + \lg \frac{2(2\pi m_{\mp} kT)^{3/2}}{h^3 n_{\mp}} \right] dT. \quad (3,49)$$

Если приближенно $\mu = -\frac{\Delta E}{2} \gg kT$ (где ΔE — ширина запретной зоны или расстояние от края разрешенной полосы до примесного уровня), то

$$\theta \approx \pm \frac{\Delta E}{2e} \lg \frac{T_2}{T_1}. \quad (3,50)$$

В формулах (3,49) и (3,50) верхние знаки относятся к электронам, нижние к дыркам. Из формулы (3,48) видно, что дырки частично компенсируют термо-эдс, создаваемую электронами, и могут даже изменить знак ее. Это понятно, поскольку и электроны и дырки диффундируют от горячего конца полупроводника к холодному.

Мы уже знаем, что введение примесей меняет концентрацию и электронов и дырок. В последнее время Ю. П. Маслакову (ЛФТИ) удалось изменением концентрации серы в сернистом свинце изменять характер проводимости с электронного на дырочный. При этом меняется знак термо-эдс.

в. Эффекты Томсона и Пельтье

При $\mathbf{H} = 0$ найдем также вектор плотности потока энергии $\mathbf{S}$

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \int f(\mathbf{p}) (\varepsilon - e\varphi) \frac{\mathbf{p}}{m_-} \cdot \frac{2}{h^3} d\tau_{\mathbf{p}} + \\ &+ \int f'(\mathbf{p}') (\varepsilon' + \Delta E + e\varphi) \frac{\mathbf{p}'}{m_+} \cdot \frac{2}{h^3} d\tau_{\mathbf{p}'} - \chi_0 \nabla T. \end{aligned} \quad (3,51)$$

К потоку энергии, переносимой электронами, мы должны прибавить тепло, переносимое самой решеткой; χ_0 — коэффициент ее теплопроводности. С помощью формул (3,26), (3,28), (3,36), (3,37), (3,43)

и (3,44) находим:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} = & \varphi \mathbf{i} - \frac{2kT}{e} n_- u_- \left[\nabla (\mu - e\varphi) - \frac{\mu - 3kT}{T} \nabla T \right] + \\ & + \frac{2kT}{e} n_+ u_+ \left[\nabla (\mu - e\varphi) - \frac{(\Delta E + \mu) + 3kT}{T} \nabla T \right] + \\ & + \frac{\Delta E}{e} n_+ u_+ \left[\nabla (\mu - e\varphi) - \frac{(\Delta E + \mu) + 2kT}{T} \nabla T \right]. \end{aligned} \quad (3,52)$$

Подставляя в эту формулу $\nabla (\mu - e\varphi)$ из (3,46), получаем

$$\mathbf{S} = \left(\varphi - \frac{\mu}{e} \right) \mathbf{i} - \Pi \mathbf{i} - \chi \nabla T, \quad (3,53)$$

где

$$\begin{aligned} \Pi = & \frac{n_- u_- [2kT - \mu] - n_+ u_+ [2kT + (\Delta E + \mu)]}{\sigma} = \\ = & \frac{n_- u_- kT \left[2 + \lg \frac{2(2\pi m - kT)^{3/2}}{h^3 n_-} \right] - n_+ u_+ kT \left[2 + \lg \frac{2(2\pi m + kT)^{3/2}}{h^3 n_+} \right]}{\sigma} \end{aligned} \quad (3,54)$$

и

$$\chi = \chi_0 + n_+ u_+ \frac{2k^2 T}{e} + n_- u_- \frac{2k^2 T}{e} + \frac{n_+ u_+ \cdot n_- u_-}{n_+ u_+ + n_- u_-} \cdot \frac{(\Delta E + 4kT)^2}{eT}. \quad (3,55)$$

χ — полная теплопроводность кристалла.

В стационарном состоянии $\operatorname{div} \mathbf{S} = 0$ и $\operatorname{div} \mathbf{i} = 0$. Поэтому при переходе из одного тела в другое нормальные составляющие векторов $\mathbf{S}$ и $\mathbf{i}$ непрерывны. Если $\varphi - \frac{\mu}{e}$ также непрерывно, то из (3,53) следует:

$$-\chi_1 (\nabla T)_{n,1} + \chi_2 (\nabla T)_{n,2} = (\Pi_1 - \Pi_2) i. \quad (3,56)$$

Это равенство означает, что $(\Pi_1 - \Pi_2) i$ есть тепло, выделяемое в 1 сек. в месте контакта (тепло Пельтье), которое отводится теплопроводностью [левая часть уравнения (3,56)]. Если речь идет о контакте между полупроводником и металлом, то коэффициентом Пельтье для металла Π_m можно пренебречь, так как он значительно меньше коэффициента Пельтье для полупроводника Π_n .

Аналогичным образом имеем:

$$\operatorname{div} \mathbf{S} = i \nabla \left(\varphi - \frac{\mu}{e} \right) - i \nabla \Pi - \operatorname{div} (\chi \nabla T). \quad (3,57)$$

Подставляя $\nabla \left(\varphi - \frac{\mu}{e} \right)$ из (3,46), имеем

$$\operatorname{div} (-\chi \nabla T) = \frac{i^2}{\sigma} + T \frac{d}{dT} \left(\frac{\Pi}{T} \right) i \cdot \nabla T. \quad (3,58)$$

Таким образом, при наличии градиента температуры в единице объема, кроме джоулевого тепла $\frac{i^2}{\sigma}$, выделяется еще тепло Томсона $\alpha i \cdot \nabla T$. Величина

$$\alpha = T \frac{d}{dT} \left(\frac{\Pi}{T} \right) \quad (3,59)$$

называется коэффициентом Томсона. Формулы (3,48), (3,54) и (3,59) находятся в согласии с термодинамическими соотношениями Онзагера-Томсона. Как и для термо-эдс, наличие, кроме электронов, дырок уменьшает эффекты Томсона и Пельтье. Если имеются только электроны, то формулы упрощаются:

$$\Pi = \frac{2kT - \mu}{e}, \quad (3,60)$$

$$\alpha = \frac{1}{e} \left(\frac{\mu}{T} - \frac{d\mu}{dT} \right). \quad (3,61)$$

При наличии одних дырок

$$\Pi = - \frac{\Delta E + \mu + 2kT}{e}, \quad (3,62)$$

$$\alpha = - \frac{1}{e} \left(\frac{\Delta E + \mu}{T} + \frac{d\mu}{dT} \right). \quad (3,63)$$

В том же приближении, в каком верна формула (3,50), имеем

$$\Pi = \pm \frac{\Delta E}{2e}, \quad \alpha = \mp \frac{\Delta E}{2eT}; \quad (3,64)$$

верхние знаки относятся к электронным (в узком смысле слова), нижние — к дырочным полупроводникам.

г. Эффект Холла и эффект Нернста

При наличии магнитного поля $\mathbf{H}$ уравнения 3,36) и (3,37) имеют следующие решения:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_- = \frac{l_-}{p} \frac{\frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) + \frac{el_-}{cp} \left[\mathbf{H}, \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right]}{1 + \left(\frac{el_- H}{cp} \right)^2} + \\ + \frac{\left(\frac{el_-}{cp} \right)^2 \left(\mathbf{H}, \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right) \mathbf{H}}{1 + \left(\frac{el_- H}{cp} \right)^2}, \end{aligned} \quad (3,65)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_+ = \frac{l_+}{p'} \frac{\frac{\varepsilon' + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi)}{1 + \left(\frac{el_+ H}{cp'} \right)^2} - \\ - \frac{\frac{el_+}{cp'} \left[\mathbf{H}, \frac{\varepsilon' + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right]}{1 + \left(\frac{el_+ H}{cp'} \right)^2} + \\ + \frac{\left(\frac{el_+}{cp'} \right)^2 \left(\mathbf{H}, \frac{\varepsilon' + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right) \mathbf{H}}{1 + \left(\frac{el_+ H}{cp'} \right)^2}. \end{aligned} \quad (3,66)$$

В случае слабого магнитного поля, когда можно пренебречь квадратичными членами относительно $\mathbf{H}$, имеем:

$$\mathbf{j}_- = \frac{l_-}{p} \left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) + \right. \\ \left. + \frac{el_-}{cp} \left[\mathbf{H}, \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right] \right\}, \quad (3,67)$$

$$\mathbf{j}_+ = \frac{l_+}{p'} \left\{ \frac{\varepsilon' + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) - \right. \\ \left. - \frac{el_+}{cp'} \left[\mathbf{H}, \frac{\varepsilon + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right] \right\}. \quad (3,68)$$

Плотность тока

$$\mathbf{i} = n_+ \mathbf{u}_+ \left[\nabla(\mu - e\varphi) - \frac{(\Delta E + \mu) + 2kT}{T} \nabla T \right] + \\ + n_- \mathbf{u}_- \left[\nabla(\mu - e\varphi) + \frac{2kT - \mu}{T} \nabla T \right] + \\ + \frac{3\pi}{8c} \left[n_+ u_+^2 \frac{\frac{3}{2} kT + (\Delta E + \mu)}{T} + n_- u_-^2 \frac{\frac{3}{2} kT - \mu}{T} \right] [\mathbf{H}, \nabla T] + \\ + \frac{3\pi}{8c} (n_- u_-^2 - n_+ u_+^2) [\mathbf{H}, \nabla(\mu - e\varphi)]. \quad (3,69)$$

Плотность потока энергии

$$\mathbf{S} = \varphi \mathbf{i} - \frac{2kT}{e} n_- \mathbf{u}_- \left[\nabla(\mu - e\varphi) + \frac{3kT - \mu}{T} \nabla T \right] + \\ + \frac{2kT}{e} n_+ \mathbf{u}_+ \left[\nabla(\mu - e\varphi) - \frac{3kT + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T \right] + \\ + \frac{\Delta E}{e} n_+ \mathbf{u}_+ \left[\nabla(\mu - e\varphi) - \frac{2kT + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T \right] + \\ + \frac{3\pi}{8c} \frac{\Delta E}{e} n_+ u_+^2 \left[\mathbf{H}, \frac{\frac{3}{2} kT + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right] - \\ - \frac{9\pi}{16} \frac{kT}{ce} \left[\mathbf{H}, \left\{ n_- u_-^2 \left(\frac{\frac{5}{2} kT - \mu}{T} \nabla T + \nabla(\mu - e\varphi) \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - n_+ u_+^2 \left(\frac{\frac{5}{2} kT + (\Delta E + \mu)}{T} \nabla T - \nabla(\mu - e\varphi) \right) \right\} \right]. \quad (3,70)$$

Из уравнения (3,69), в том же приближении (пренебрегая высшими степенями $\mathbf{H}$), находим следующее выражение для $\nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right)$:

$$\nabla \left(\frac{\mu}{e} - \varphi \right) = \frac{\mathbf{i}}{\sigma} - \frac{d\theta}{dT} \nabla T - R[\mathbf{i}, \mathbf{H}] - Q[\mathbf{H}, \nabla T], \quad (3,71)$$

где

$$R = \frac{3\pi}{8ce} \frac{n_+ u_+^2 - n_- u_-^2}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2}, \quad (3,72)$$

$$Q = \frac{3\pi}{8ce} \left[\frac{n_+ u_+ \cdot n_- u_- (u_+ + u_-)}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2} \cdot \frac{\Delta E + \frac{7}{2} kT}{T} - \frac{k}{2} \frac{n_+^2 u_+^3 + n_-^2 u_-^3}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2} \right]. \quad (3,73)$$

$\frac{d\theta}{dT}$ — термо-эдс, приходящаяся на один градус разности температур [см. (3,48)].

Если в полупроводнике в направлении оси X идет ток, а перпендикулярно ему по оси Z включено магнитное поле, то в направлении оси Y возникает электрическое поле (поперечное холловское поле).

$$E_y = - \frac{\partial \varphi}{\partial y} = R H_z i_x. \quad (3,74)$$

Полупроводник при этом предполагается равномерно нагретым — $\nabla T = 0$. Это явление называется эффектом Холла, а величина R — постоянной Холла [см. (3,72)]. В случае одного рода носителей

$$R = \pm \frac{3\pi}{8c} \frac{1}{en_{\pm}} \quad (3,75)$$

измерения над эффектом Холла позволяют определить концентрацию электронов или дырок [в формуле (3,75) $+$ относится к дыркам, $-$ к электронам].

В отличие от изотермического эффекта Холла, который мы сейчас рассматривали, на опыте благодаря теплонепроницаемости боковых стенок могут иногда осуществляться условия так называемого адиабатического эффекта Холла, при котором $S_y = 0$.

Если вместо электрического тока имеется градиент температуры, в направлении оси X , то перпендикулярно ему и магнитному полю (направленному по оси Z) также возникает электрическое поле

$$E_y = - \frac{\partial \varphi}{\partial y} = - Q H_z \frac{dT}{dx}. \quad (3,76)$$

Это явление называется эффектом Нернста, а величина Q — постоянной Нернста [см. (3,73)].

д. Изменение сопротивления в слабом магнитном поле

Удельное сопротивление ρ есть отношение составляющей напряженности электрического поля, в направлении вектора плотности тока, к величине плотности тока:

$$\rho = \frac{i \cdot E}{i^2}. \quad (3,77)$$

Из формулы (3,69) при $\nabla T = 0$ имеем:

$$\rho = \frac{i \cdot \left(\frac{i}{\sigma} - R [i, H] \right)}{i^2} = \frac{1}{\sigma} = \rho_0, \quad (3,78)$$

т. е. изменения сопротивления нет. Чтобы получить его, надо при разложении выражений (3,65) и (3,66) по степеням H сохранить еще следующие члены разложения. Оставляя квадратичные и кубические члены относительно H и полагая $\nabla T = 0$, имеем:

$$j_- = \frac{el_-}{p} \left\{ E + \frac{el_-}{cp} [H, E] + \left(\frac{el_-}{cp} \right)^2 (H, E) H - \left(\frac{el_- H}{cp} \right)^2 E - \left(\frac{el_-}{cp} \right)^3 H^2 [H, E] \right\}, \quad (3,79)$$

$$j_+ = \frac{el_+}{p'} \left\{ E - \frac{el_+}{cp'} [H, E] + \left(\frac{el_+}{cp'} \right)^2 (H, E) H - \left(\frac{el_+ H}{cp'} \right)^2 E + \left(\frac{el_+}{cp'} \right)^3 H^2 [H, E] \right\}. \quad (3,80)$$

Плотность тока

$$i = \sigma E + \frac{3\pi e}{8c} (n_- u_-^2 - n_+ u_+^2) [H, E] + \frac{9\pi e}{16c^2} (n_- u_-^3 + n_+ u_+^3) [H, [H, E]] - \frac{27\pi^2 e}{64c^3} (n_- u_-^4 - n_+ u_+^4) H^2 [H, E]. \quad (3,81)$$

Отсюда с той же степенью точности находим:

$$E = \frac{3\pi}{8ce} \cdot \frac{n_+ u_+^2 - n_- u_-^2}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2} \left\{ 1 + \left[\frac{8\pi}{9c^2} \cdot \frac{n_+ u_+^2 \cdot n_- u_-^2 (u_+ - u_-) + n_+ u_+ \cdot n_- u_- (u_+^3 - u_-^3)}{(n_+ u_+ + n_- u_-) (n_- u_-^2 + n_+ u_+^2)} - \frac{9\pi^2}{64c^2} \cdot \frac{(n_- u_-^2 - n_+ u_+^2)^2}{(n_- u_- + n_+ u_+)^2} \right] H^2 \right\} [H, i] + \frac{1}{\sigma} \left\{ 1 + \left[\frac{9\pi}{16c^2} \cdot \frac{n_- u_-^3 + n_+ u_+^3}{n_- u_- + n_+ u_+} - \frac{9\pi^2}{64c^2} \cdot \frac{(n_- u_-^2 - n_+ u_+^2)^2}{(n_- u_- + n_+ u_+)^2} \right] H^2 \right\} i - \frac{1}{\sigma} \left[\frac{9\pi}{16c^2} \cdot \frac{n_- u_-^3 + n_+ u_+^3}{n_- u_- + n_+ u_+} - \frac{9\pi^2}{16c^2} \cdot \frac{(n_- u_-^2 - n_+ u_+^2)^2}{(n_- u_- + n_+ u_+)^2} \right] (i, H) H. \quad (3,82)$$

Следовательно,

$$\rho = \frac{i \cdot E}{i^2} = \frac{1}{\sigma} \left\{ 1 + \left[\frac{9\pi}{16c^2} \cdot \frac{n_- u_-^3 + n_+ u_+^3}{n_- u_- + n_+ u_+} - \frac{9\pi^2}{64c^2} \cdot \frac{(n_- u_-^2 - n_+ u_+^2)^2}{(n_- u_- + n_+ u_+)^2} \right] \left(H^2 - \frac{(i, H)^2}{i^2} \right) \right\}, \quad (3,83)$$

и если магнитное поле перпендикулярно току, то

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} = \frac{9\pi e}{16c^2} \frac{H^2}{\sigma} \left[(n_+ u_+^3 + n_- u_-^3) - \frac{\pi}{4} \frac{(n_- u_-^2 - n_+ u_+^2)^2}{n_- u_- + n_+ u_+} \right]. \quad (3,84)$$

Магнитное поле, параллельное току, не вызывает изменения сопротивления, как это легко видеть из формулы (3,83). Из уравнения (3,82) находим также, что постоянная Холла

$$R = \frac{3\pi}{8ce} \cdot \frac{n_+ u_+^2 - n_- u_-^2}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2} \left\{ 1 + \frac{9\pi e H^2}{8c^2} \left[\frac{n_+ u_+ \cdot n_- u_- (u_+ + u_-)^2 (u_+ - u_-)}{n_- u_-^2 - n_+ u_+^2} - \frac{\pi}{4} \cdot \frac{(n_- u_-^2 - n_+ u_+^2)^2}{n_- u_- + n_+ u_+} \right] \right\}. \quad (3,85)$$

е. Сопротивление и эффект Холла в сильном магнитном поле

Если, наоборот, магнитное поле очень велико, то можно выражения (3,65) и (3,66) разложить по степеням $\frac{1}{H}$. Тогда

$$j_- = \frac{c^2}{H^2} \frac{p}{el_-} \left\{ \mathbf{E} + \frac{el_-}{cp} [\mathbf{H}, \mathbf{E}] + \left[\left(\frac{eHl_-}{cp} \right)^2 - 1 \right] \frac{(\mathbf{H}, \mathbf{E}) \mathbf{H}}{H^2} \right\}, \quad (3,86)$$

$$j_+ = -\frac{c^2}{H} \frac{p'}{el_+} \left\{ \mathbf{E} - \frac{el_+}{cp'} [\mathbf{H}, \mathbf{E}] + \left[\left(\frac{eHl_+}{cp'} \right)^2 - 1 \right] \frac{(\mathbf{H}, \mathbf{E}) \mathbf{H}}{H^2} \right\}. \quad (3,87)$$

Плотность тока

$$\mathbf{i} = \frac{c^2}{H^2} \left\{ \frac{32}{9\pi} \left(\frac{n_+ e}{u_+} + \frac{n_- e}{u_-} \right) \mathbf{E} + \frac{e}{c} (n_+ - n_-) [\mathbf{E}, \mathbf{H}] + \left[\frac{H^2}{c^2} e (n_+ u_+ + n_- u_-) - \frac{32}{9\pi} \left(\frac{n_+ e}{u_+} + \frac{n_- e}{u_-} \right) \right] \frac{(\mathbf{H}, \mathbf{E}) \mathbf{H}}{H^2} \right\}. \quad (3,88)$$

Решая это уравнение относительно $\mathbf{E}$, имеем

$$\mathbf{E} = \frac{\frac{9\pi}{32c} \cdot \frac{n_+ - n_-}{\left(\frac{n_+}{u_+} + \frac{n_-}{u_-} \right)} [\mathbf{H}, \mathbf{i}]}{\frac{32}{9\pi} \left(\frac{n_+ e}{u_+} + \frac{n_- e}{u_-} \right) \left[\left(\frac{9\pi (n_+ - n_-) H}{32c \left(\frac{n_+}{u_+} + \frac{n_-}{u_-} \right)} \right)^2 + 1 \right]} - \frac{\left\{ 1 - \frac{32}{9\pi} \cdot \frac{\frac{n_+}{u_+} + \frac{n_-}{u_-}}{n_+ u_+ + n_- u_-} \cdot \frac{c^2}{H^2} \left[1 + \left(\frac{9\pi}{32c} \cdot \frac{n_+ - n_-}{\frac{n_+}{u_+} + \frac{n_-}{u_-}} H \right)^2 \right] \frac{(\mathbf{i}, \mathbf{H}) \mathbf{H}}{H^2} + \mathbf{i} \right\}}{\frac{32}{9\pi} \left(\frac{n_+ e}{u_+} + \frac{n_- e}{u_-} \right) \left[\left(\frac{9\pi (n_+ - n_-) H}{32c \left(\frac{n_+}{u_+} + \frac{n_-}{u_-} \right)} \right)^2 + 1 \right]}. \quad (3,89)$$

Отсюда постоянная Холла

$$R = \frac{1}{ce(n_+ - n_-)}. \quad (3,90)$$

Сопротивление в поле H , перпендикулярном току,

$$\rho_{\infty} = \frac{32}{9\pi} \cdot \frac{\frac{n_+}{u_+} + \frac{n_-}{u_-}}{e(n_+ - n_-)^2}. \quad (3,91)$$

Продольный эффект отсутствует, т. е. магнитное поле, параллельное току, не вызывает изменения сопротивления.

Физически различие между движением электронов в слабом магнитном поле и в сильном сводится к тому, что в слабом поле траектория электрона за время свободного пути лишь слегка искривляется, тогда как в сильном поле электрон успевает за это время описать несколько витков наклонной винтовой линии, по которой он движется.

Следует сказать, что приведенные выше расчеты не являются вполне общими, ибо гальваномагнитные эффекты сильно зависят от имеющейся в кристалле анизотропии. Мы же ограничились рассмотрением кубической решетки, в которой тензор обратной массы m_{ik}^{-1} сводится к одному скаляру.

В заключение укажем, что большинство приведенных в этом параграфе формул для полупроводников с атомной решеткой, при наличии носителей обоих знаков, было выведено ранее Н. Л. Писаренко (ЛФТИ).

Б. ПОЛУПРОВОДНИКИ С ИОННОЙ РЕШЕТКОЙ

В качестве простейшего случая рассмотрим кубическую двух-атомную решетку, в узлах которой находятся ионы с массами M_+ и M_- и зарядами Ze и $-Ze$. Расстояние между соседними ионами обозначим через a . Объем элементарной ячейки такого кристалла $\Omega_0 = 2a^3$. Как уже говорилось в начале этого раздела, взаимодействие электронов с оптическими колебаниями больше, чем с акустическими. Эти последние поэтому можно совсем не учитывать.

Возникающий при оптических колебаниях решетки дипольный момент, приходящийся на единицу объема вблизи l -ой ячейки,

$$\mathbf{P} = \gamma Ze \frac{\mathbf{u}_+^l - \mathbf{u}_-^l}{\Omega_0}. \quad (3,92)$$

Отличие γ от единицы определяется деформацией электронных оболочек при колебаниях ионов. Для не слишком сильно выраженных гетерополярных соединений γ , вероятно, может быть значительно меньше единицы. Вместо $\mathbf{u}_+^l$ и $\mathbf{u}_-^l$ следует подставить их разложения по собственным колебаниям решетки (3,6). Поскольку для дальнейшего существенны только длинноволновые колебания, то $\mathbf{P}$ можно считать непрерывной функцией координат. В таком случае возникающий при колебаниях дополнительный потенциал Φ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi \operatorname{div} \mathbf{P}. \quad (3,93)$$

Решая это уравнение, мы находим энергию возмущения

$$U = -e\Phi, \quad (3,94)$$

матричный элемент которой определяет вероятность перехода. Вычисленные с помощью (3,94) вероятности перехода равны: для поглощения электроном фонона

$$W^+ = \omega N_q \delta(\epsilon_{p'} - \epsilon_p - \hbar\omega_q) \quad (3,95)$$

и для испускания фонона

$$W^- = \omega (N_q + 1) \delta(\epsilon_{\mu'} - \epsilon_{\rho} + \hbar\omega_q), \quad (3,96)$$

где

$$\omega = \frac{(2\pi)^3 \gamma^2 Z^2 e^4}{\Omega_0 N \cdot M a^3 \omega q^2} \quad \text{и} \quad M = \frac{M_+ \cdot M_-}{M_+ + M_-}.$$

При этом оказывается, что взаимодействуют с электронами только продольные колебания. Так как в двухатомных решетках имеется всего только три оптических ветви (соответственно трем поляризациям), то нам придется иметь дело только с одной ветвью. Мы не будем приводить здесь подробного решения кинетического уравнения, как это было сделано для атомной решетки, а ограничимся указаниями на имеющиеся различия. Изменение энергии электрона при поглощении или испускании акустического фонона очень мало по сравнению с энергией электрона. Для оптических же колебаний величина $\hbar\omega_0$ может быть в различных кристаллах и при различных температурах либо меньше, либо больше, чем средняя энергия электрона. ω_0 — предельная частота продольных оптических колебаний.

Если $kT \gg \hbar\omega_0$, то для подавляющего количества электронов изменение энергии при поглощении или испускании фонона незначительно. Если же $kT \ll \hbar\omega_0$, то почти все электроны могут только поглощать фононы, переходя при этом в интервал энергии от $\hbar\omega_0$ до $2\hbar\omega_0$, т. е. очень сильно изменяя свою энергию. Испуская фононы, электроны из второго интервала будут переходить обратно в первый. Электрон, однако, с гораздо большей вероятностью переходит из второго интервала в первый, чем обратно, так как вероятность испускания содержит множитель $N_q + 1$, который при низких температурах гораздо больше, чем соответствующий множитель N_q в ве-

роятности испускания: $\frac{N_q + 1}{N_q} = e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}}$. Поэтому время пребывания электрона во втором интервале настолько мало, что мы можем считать, что электрон сразу, после поглощения фонона, испускает другой фонон почти той же энергии (но не в точности такой же, поскольку ω зависит от q ; это существенно для установления стационарного распределения электронов, хотя явно не входит в вычисления в случае слабого электрического поля). В результате такого двойного перехода электрон попадает в состояние, в котором его энергия почти не отличается от исходной, но направление квазиимпульса может сильно измениться. Таким образом, можно попрежнему считать, что в результате взаимодействия с колебаниями решетки электрон рассеивается, почти не меняя энергии. Благодаря этому упрощению кинетическое уравнение можно приближенно решить в обоих предельных случаях низких и высоких температур по отношению к температуре $\theta = \frac{\hbar\omega_0}{k}$.

Функцию распределения f , как и раньше, положим равной $f_0 + \chi$, где $f_0 = e^{\frac{\mu - \epsilon}{kT}}$ для электронов и $f_0' = e^{\frac{-(\Delta E + \mu) + \epsilon_i}{kT}}$ для дырок,

а $\chi = \frac{df_0}{d\varepsilon} \mathbf{p} \cdot \mathbf{j}$. Векторы $\mathbf{j}_+$ и $\mathbf{j}_-$ удовлетворяют уравнениям (3,36) и (3,37). Длину свободного пробега, фигурирующую в правых частях этих уравнений, мы приведем без вывода.

При $kT \ll \hbar\omega_0$ ¹⁰

$$l = \frac{a}{2\pi} \cdot \frac{M}{m} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\gamma Ze^2} \right)^2 e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\hbar\omega_0}}. \quad (3,97)$$

При $kT \gg \hbar\omega_0$ ¹¹

$$l = \frac{a}{2\pi} \cdot \frac{M}{m} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\gamma Ze^2} \right)^2 \frac{\varepsilon}{\hbar\omega_0 \left(N_q + \frac{1}{2} \right)} \approx \frac{a}{2\pi} \cdot \frac{M}{m} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\gamma Ze^2} \right)^2 \frac{\varepsilon}{kT}, \quad (3,98)$$

так как $N_q + \frac{1}{2} \approx \frac{kT}{\hbar\omega_0}$ при $kT \gg \hbar\omega_0$.

Все эффекты, рассмотренные для атомной решетки, можно легко рассчитать и для ионных решеток в указанных двух предельных случаях. В промежуточной области все интересующие нас величины можно находить интерполяцией. Вычисления в этом случае аналогичны проведенным для атомной решетки, и мы приводим сразу результаты. Фигурирующую при этом в формулах (3,97) и (3,98) величину $\frac{a}{2\pi} \cdot \frac{M}{m} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\gamma Ze^2} \right)^2$, имеющую размерность длины и не зависящую от температуры, мы обозначим для удобства через l_0 .

а. Электропроводность

$$\sigma = e(n_+ u_+ + n_- u_-). \quad (3,99)$$

При $kT \ll \hbar\omega_0$ подвижность

$$u_{\pm} = \frac{e l_0^{\pm} e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}}}{\sqrt{2m_{\pm} \hbar\omega_0}}, \quad (3,100)$$

при $kT \gg \hbar\omega_0$

$$u_{\pm} = \frac{8e l_0^{\pm}}{3\sqrt{2\pi m_{\pm} kT}}. \quad (3,101)$$

б. Термоэлектродвижущая сила

При $kT \ll \hbar\omega_0$

$$\theta = \int_{T_1}^{T_2} \frac{n_- u_- \frac{5}{2} kT - \mu - n_+ u_+ \frac{5}{2} kT + (\Delta E + \mu)}{\sigma T} dT. \quad (3,102)$$

При $kT \gg \hbar\omega_0$

$$\theta = \int_{T_1}^{T_2} \frac{n_- u_- \frac{3kT - \mu}{T} - n_+ u_+ \frac{3kT + (\Delta E + \mu)}{T}}{\sigma} dT. \quad (3,103)$$

в. Эффекты Томсона и Пельтье

При $kT \ll \hbar\omega_0$ коэффициент Пельтье

$$\Pi = \frac{n_{-}u_{-} \left(\frac{5}{2} kT - \mu \right) - n_{+}u_{+} \left(\frac{5}{2} kT + \Delta E + \mu \right)}{e}. \quad (3,104)$$

При $kT \gg \hbar\omega_0$

$$\Pi = \frac{n_{-}u_{-} (3kT - \mu) - n_{+}u_{+} (3kT + \Delta E + \mu)}{e}. \quad (3,105)$$

Что касается коэффициента Томсона, то для него лучше пользоваться термодинамическим соотношением

$$\alpha = T \frac{d\Pi}{dT} \quad (3,106)$$

вместе с формулами (3,104) и (3,105).

г. Теплопроводность

При $kT \ll \hbar\omega_0$ коэффициент теплопроводности всего кристалла

$$\begin{aligned} \chi = \chi_0 + \frac{n_{+}u_{+} \cdot n_{-}u_{-}}{n_{+}u_{+} + n_{-}u_{-}} \cdot \frac{\left(\Delta E + \frac{5}{2} kT \right)^2}{eT} + \\ + \frac{5}{2} \frac{n_{+}u_{+}}{e} \frac{k^2 T}{e} + \frac{5}{2} \frac{n_{-}u_{-}}{e} \frac{k^2 T}{e}. \end{aligned} \quad (3,107)$$

При $kT \gg \hbar\omega_0$

$$\begin{aligned} \chi = \chi_0 + \frac{n_{+}u_{+} \cdot n_{-}u_{-}}{n_{+}u_{+} + n_{-}u_{-}} \cdot \frac{(\Delta E + 6kT)^2}{eT} + \\ + 3n_{+}u_{+} \frac{k^2 T}{e} + 3n_{-}u_{-} \frac{k^2 T}{e}. \end{aligned} \quad (3,108)$$

Теплопроводность самой решетки χ_0 обычно гораздо больше теплопроводности электронов. Мы привели эти формулы потому, что если имеются и электроны, и дырки в сравнимых количествах, то второй член в формулах (3,107) и (3,108), связанный с переносом энергии диссоциации электронов ΔE , в $\left(\frac{\Delta E}{kT} \right)^2$ раз больше чисто электронной или дырочной теплопроводности. Быть может, в некоторых случаях он может иметь значение.

д. Эффект Холла

При низких температурах $kT \ll \hbar\omega_0$ благодаря тому, что время свободного пробега τ не зависит от энергии [см. формулу (3,97)], можно дать формулу, годную и для слабых, и для сильных полей:

$$R = \frac{1}{ce} \frac{n_{+}u_{+}^2 - n_{-}u_{-}^2 + (n_{+} - n_{-}) \frac{u_{+}^2 u_{-}^2 H^2}{c^2}}{(n_{+}u_{+} + n_{-}u_{-})^2 + (n_{+} - n_{-})^2 \frac{u_{+}^2 u_{-}^2 H^2}{c^2}}. \quad (3,109)$$

Зависимость от поля здесь имеется лишь постольку, поскольку существуют в полупроводнике одновременно и дырки, и электроны.

В слабом магнитном поле $\frac{u_{\pm}H}{c} \ll 1$ и

$$R = \frac{1}{ce} \cdot \frac{n_+ u_+^2 - n_- u_-^2}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2}. \quad (3,110)$$

В сильном поле $\frac{u_{\pm}H}{c} \gg 1$

$$R = \frac{1}{ce} \cdot \frac{1}{n_+ - n_-}. \quad (3,111)$$

При высоких температурах $kT \gg \hbar\omega_0$ и в слабом магнитном поле

$$R = \frac{15}{16} \cdot \frac{3\pi}{8ce} \cdot \frac{n_+ u_+^2 - n_- u_-^2}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^3}. \quad (3,112)$$

В сильном поле (также при $kT \gg \hbar\omega_0$)

$$R = \frac{1}{ce} \frac{1}{n_+ - n_-}. \quad (3,113)$$

е. Термомагнитный эффект Нернста

При $kT \ll \hbar\omega_0$ коэффициент Нернста

$$Q = \frac{1}{ce} \cdot \frac{n_+ u_+ \cdot n_- u_- (u_+ + u_-)}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2} \cdot \frac{\Delta E + 5kT}{T}. \quad (3,114)$$

При $kT \gg \hbar\omega_0$

$$Q = \frac{15}{16} \cdot \frac{3\pi}{8ce} \cdot \frac{n_+ u_+ \cdot n_- u_- (u_+ + u_-) \frac{\frac{13}{2} kT + \Delta E}{T} + \frac{k}{2} (n_+^2 u_+^3 + n_-^2 u_-^3)}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^3}. \quad (3,115)$$

ж. Изменение сопротивления в магнитном поле

Продольный эффект отсутствует как в слабых, так и в сильных полях и при низких, и при высоких температурах. Этот эффект не исчезает при наличии анизотропии¹².

Сопротивление в поперечном магнитном поле при $kT \ll \hbar\omega_0$

$$\rho = \rho_0 \left\{ 1 + \frac{n_+ n_- (u_+ + u_-)^2 \frac{u_+ u_-}{c^2} H^2}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2 + (n_+ - n_-)^2 \frac{u_+^2 u_-^2}{c^2} H^2} \right\}. \quad (3,116)$$

Как и для эффекта Холла, зависимость от поля имеется здесь, если в полупроводнике есть носители обоих знаков.

В слабом поле

$$\rho = \rho_0 \left\{ 1 + \frac{n_+ n_- (u_+ + u_-)^2}{(n_+ u_+ + n_- u_-)^2} \cdot \frac{u_+ u_-}{c^2} H^2 \right\}. \quad (3,117)$$

При высоких температурах $kT \gg \hbar\omega_0$ и в слабом магнитном поле

$$\rho = \rho_0 \left\{ 1 + \frac{27\pi}{64} \cdot \frac{eH^2}{c^2\sigma} \left[(n_+ u_+^3 + n_- u_-^3) - \frac{75\pi (n_+ u_+^2 - n_- u_-^2)^2}{256 (n_+ u_+ + n_- u_-)} \right] \right\}. \quad (3,118)$$

В сильном поле при $kT \gg \hbar\omega_0$

$$\rho_\infty = \frac{32}{9\pi} \cdot \frac{\frac{n_+}{u_+} + \frac{n_-}{u_-}}{e(n_+ - n_-)^2}. \quad (3,119)$$

Конечно, во все формулы для низких и высоких температур следует подставить различные выражения для подвижностей. В первом случае надо пользоваться формулой (3,100), во втором — формулой (3,101).

Рассмотренными явлениями все возможные эффекты подобного типа в полупроводниках не ограничиваются. Так, например, остался нерассмотренным вопрос об адиабатическом эффекте Холла и связанный с ним эффект Эттингсхаузена — образование поперечной разности температур — и некоторые другие эффекты. Мы рассмотрели наиболее существенные явления; другие при необходимости можно легко рассчитать теми же методами.

По внешнему виду формулы для ионной решетки отличаются от таковых для атомной решетки лишь несущественными коэффициентами. Однако, температурная зависимость подвижностей электронов и дырок в ионной решетке иная, чем в атомной. В атомной решетке подвижность $u \approx T^{-3/2}$, в ионной при низкой температуре $u \approx e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}}$ и при высоких $u \approx T^{-1/2}$. Вследствие того, что подвижности входят во все формулы для электропроводности, термо-эдс и пр., температурная зависимость этих величин в ионной решетке иная, чем в атомной. Кроме того, так как электроны сильнее взаимодействуют с оптическими колебаниями, чем с акустическими, то длина свободного пробега, а вместе с нею и подвижность в ионной решетке должны быть меньше, чем в атомной.

В связи с этим следует сделать одно принципиальное замечание о применимости всех расчетов, проделанных в этом параграфе. Для вероятности столкновения электрона с фононом мы пользовались формулами теории возмущений. Эти формулы законны, если возмущение мало. Для электронов условие малости возмущения выражается в том, что их де-броглевская длина волны $\frac{\hbar}{mv}$ должна быть значительно больше длины свободного пробега. Во многих же случаях мы, повидимому, находимся на границе применимости всего метода, и тогда полученные результаты следует рассматривать лишь как грубые качественные оценки.

Что касается примесных металлов, то, чтобы перенести на них все формулы, выведенные в этом параграфе, следует концентрацию тех носителей, которые имеются в этих металлах, считать независимой от температуры, а концентрацию носителей другого знака положить равной нулю. Формулы, конечно, пригодны, только если электронный газ не вырожден.

4. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ

В противоположность металлам, для которых закон Ома верен во всей области практически достижимых полей, электропроводность полупроводников зависит от напряженности поля. Эмпирически эта зависимость обычно выражается так называемым ростом электропроводности с полем

$$\sigma = \sigma_0 e^{bE}. \quad (4,1)$$

При некотором критическом поле порядка $10^5 - 10^6 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$ плавный рост электропроводности сменяется резким ее увеличением с переходом к нестационарному режиму. Это — электрический пробой, — явление, для которого еще не существует законченной теории. Мы этого вопроса подробно рассматривать не будем и только в конце скажем о нем несколько слов.

Что же касается роста электропроводности, то школа Гуддена вообще считает, что электропроводность полупроводников не зависит от поля вплоть до пробоя. Так, Хенингер¹³, исследовавший поведение полупроводников в сильном поле, объясняет рост электропроводности с полем пробоем и выведением из строя плохо проводящих прослоек.

Устранение прослоек приводит, конечно, к увеличению электропроводности. Более того, во второй части этого обзора будет показано, что явления, происходящие на границе между микрокристалликами, могут приводить к росту проводимости с полем.

Тщательные измерения А. В. Иоффе и А. Ф. Иоффе¹⁴ показали, однако, что отклонения от закона Ома далеко не всегда могут быть сведены к влиянию плохо проводящих прослоек. Даже там, где исключено влияние этих прослоек, например в монокристаллах, все же вслед за более или менее широким омическим участком (независимость σ от E) наступает возрастание электропроводности с полем.

С другой стороны, теоретически нет оснований предполагать, что в сильном электрическом поле полупроводники должны подчиняться закону Ома. Наоборот, мы сейчас покажем, что в сильных полях должны наступать отклонения от закона Ома.

Рассмотрим сначала полупроводники с атомной решеткой^{15,16}. Как мы видели в первой части третьего раздела, электрон при каждом столкновении с фононом теряет или приобретает лишь малую часть своей энергии. Поэтому в сильном поле электроны могут накопить энергию, значительно превышающую их среднюю тепловую энергию $\frac{3}{2} kT$. Благодаря этому функция распределения будет сильно отличаться от равновесной максвелловской. Можно поэтому ожидать, что в сильном поле не только средняя энергия электронов, но и их подвижность будут зависеть от поля. Подтвердим это количественно.

Энергия, приобретаемая или теряемая электроном, при каждом столкновении $\hbar\omega = \hbar q\omega$. Для электронов, у которых $\epsilon \gg kT$, можно следующим образом оценить теряемую ими в среднем при каждом

столкновении энергию $\Delta\epsilon$: отношение вероятности испускания фонона к вероятности его поглощения равно $\frac{N_q+1}{N_q}$, где $N_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$;

поэтому

$$\Delta\epsilon \approx \frac{(N_q+1) - N_q}{(N_q+1) + N_q} \hbar\omega_q = \frac{\hbar\omega_q}{2N_q+1}. \quad (4,2)$$

Так как подавляющее большинство электронов взаимодействует с фононами, у которых $\hbar\omega \ll kT$, то $2N_q+1 \approx 2\frac{kT}{\hbar\omega}$. С другой стороны, из законов сохранения при столкновении электрона с фононом следует, что $\hbar\omega = \hbar q\omega \approx mv \cdot \omega$, где v — скорость электрона [см. (3,17)]. Поэтому

$$\Delta\epsilon \approx \frac{m\omega^2}{kT} \epsilon. \quad (4,3)$$

Поскольку $\frac{m\omega^2}{kT} \ll 1$, это соотношение подтверждает то, что мы говорили о малой потере энергии электрона при столкновениях с фононами. В стационарном состоянии эта потеря энергии должна компенсироваться действием электрического поля. Следовательно,

$$\frac{m\omega^2}{kT} \epsilon \approx eEu \frac{l}{v}. \quad (4,4)$$

Здесь u — средняя поступательная скорость электронов в направлении поля, а $\frac{l}{v}$ — время их свободного пробега. В разделе 3 было показано, что l не зависит от энергии.

Аналогично условию для энергии (4,4) мы можем написать условие для импульса. Именно,

$$mu \approx eE \frac{l}{v}. \quad (4,5)$$

Это соотношение выражает то обстоятельство, что в стационарном состоянии импульс, приобретаемый электроном в поле за время свободного пробега, в среднем полностью теряется при каждом столкновении.

Соотношения (4,4) и (4,5) дают

$$\epsilon \approx \sqrt{\frac{kT}{m\omega^2}} eEl, \quad u \approx \sqrt{\frac{m\omega^2}{kT}} v. \quad (4,6)$$

Таким образом, уже при полях $E \approx \sqrt{\frac{m\omega^2 kT}{el}} \approx 10^3 \text{ В/см}$ средняя энергия электронов начинает заметно возрастать с усилением поля.

Подвижность $u = \frac{el}{mv}$. Используя первое из соотношений (4,6), получаем

$$u \approx u_0 \left(\frac{V \overline{m\omega^2 kT}}{eEl} \right)^{1/2}, \quad (4,7)$$

где u_0 — подвижность в слабом поле.

(4,7) показывает, что в сильном поле подвижность электронов уменьшается как $\frac{1}{\sqrt{E}}$. Электропроводность $\sigma = ne\mu$; поэтому можно

было бы думать, что, несмотря на уменьшение подвижности, электропроводность все-таки увеличивается благодаря возрастанию концентрации. В самом деле, средняя энергия электронов в сильном поле гораздо больше тепловой; поэтому меняется характер равновесия электронного газа с решеткой. Например, может уменьшиться вероятность прилипания электронов к атомам примеси и благодаря этому увеличится концентрация электронов проводимости. Поскольку, однако, средняя энергия $\bar{\epsilon}$ значительно меньше атомной, вероятность рекомбинации электрона с положительной дыркой можно считать независимой от $\bar{\epsilon}$ и, следовательно, от поля. Как указывают Фрелих и Мотт¹⁰, это соответствует закону $1/v$ для поперечного сечения захвата медленных нейтронов ядрами.

Таким образом, концентрация электронов проводимости не должна изменяться при не слишком сильных полях, и, следовательно, электропроводность должна уменьшаться. Надо, однако, сказать, что уменьшения электропроводности в сильных полях до сих пор никогда не наблюдалось.

Несколько слов о решении кинетического уравнения для электронов в сильном электрическом поле. Второе из соотношений (4,6) показывает, что антисимметричная часть функции распределения (которая только и создает среднюю поступательную скорость) гораздо меньше, чем симметричная часть. Математически это приводит к тому, что также и в сильном поле функция распределения, с точностью до членов высшего порядка относительно $\frac{m\omega^2}{kT}$, может быть представлена в виде

$$f(\mathbf{p}) = f_0(\epsilon) + f_1(\epsilon) \frac{p_x}{p}, \quad (4,8)$$

т. е. в виде, подобном функции распределения в слабом поле [см. уравнение (3,38); $f_1(\epsilon)$ соответствует функции $\frac{df_0}{d\epsilon} \mathbf{j} \cdot \mathbf{p}$ в этом уравнении]. Однако, $f_0(\epsilon)$ теперь уже не является максвелловской функцией распределения. Вычисляя $(b-a)f_0$, мы можем произвести разложение всех функций кроме δ -функций, входящих под знак интеграла, по степеням $\frac{\hbar\omega}{\epsilon}$, ограничившись квадратичными членами. Например,

$$f_0(\epsilon \pm \hbar\omega_0) = f_0(\epsilon) \pm \hbar\omega \frac{df_0}{d\epsilon} + \frac{1}{2} (\hbar\omega)^2 \frac{d^2 f_0}{d\epsilon^2}.$$

При этом первый член разложения $(b-a)f_0$ равен нулю. Таким приемом интегральное выражение $(b-a)f_0$ превращается в дифференциальное. При вычислении $(b-a) \left(f_1 \frac{p_x}{p} \right)$ можно везде пренеб-

речь $\hbar\omega$ по сравнению с ε , так как здесь, в отличие от f_0 , уже первый член (не зависящий от $\frac{\hbar\omega}{\varepsilon}$) не равен нулю (так же как и при решении кинетического уравнения в слабом поле). В результате для f_0 и f_1 получаются следующие дифференциальные уравнения:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{2m\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[-\frac{4m\omega^2\varepsilon^2}{\hbar kT} \left(f_0 + kT \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) - \frac{2eE}{3} \varepsilon f_1 \right] = 0, \quad (4,9)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} - eEv \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{v}{l} f_1 = 0. \quad (4,10)$$

Уравнение (4,9) можно рассматривать как уравнение непрерывности, и величина, стоящая под знаком производной $\frac{\partial}{\partial \varepsilon}$, равна потоку электронов j_ε в энергетическом пространстве:

$$j_\varepsilon = -\frac{4\pi\omega^2\varepsilon^2}{\hbar kT} \left(f_0 + kT \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) - \frac{2eE}{3} \varepsilon f_1, \quad (4,11)$$

если при этом f_0 нормировать так, что

$$\int_0^\infty f_0(\varepsilon) \sqrt{2m\varepsilon} d\varepsilon = n, \quad (4,12)$$

где n — концентрация электронов (или дырок).

В стационарном состоянии

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial f_1}{\partial t} = 0 \quad \text{и} \quad j_\varepsilon = \text{const.}$$

На бесконечности в энергетическом пространстве не должно быть потока электронов. Мы должны, следовательно, положить $j_\varepsilon = 0$. Это дает следующее уравнение для f_0 , если f_1 с помощью (4,10) выразить через $\frac{df_0}{d\varepsilon}$:

$$kT \left[1 + \frac{1}{6} \frac{(eEl)^2}{m\omega^2\varepsilon} \right] \cdot \frac{df_0}{d\varepsilon} + f_0 = 0. \quad (4,13)$$

В предельном случае сильных полей единицей в квадратных скобках можно пренебречь. Тогда:

$$f_0 = \bar{C} e^{\frac{3m\omega^2}{kT(eEl)^2} \varepsilon^2}. \quad (4,14)$$

Постоянная $\bar{C}$ определяется из условия нормировки (4,12). Средняя энергия

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{n} \int_0^\infty f_0(\varepsilon) \varepsilon \sqrt{2m\varepsilon} d\varepsilon = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2}{3}} \Gamma^2\left(\frac{5}{4}\right) \sqrt{\frac{kT}{m\omega^2}} eEl. \quad (4,15)$$

Плотность тока

$$i = -\frac{2e}{3} \int_0^{\infty} f_1(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon = ne \frac{4}{3^{3/4} \pi^{1/2}} \Gamma\left(\frac{5}{4}\right) \left(\frac{e^2 l^2 \omega^2}{mkTE^2}\right)^{1/4}. \quad (4,16)$$

Отсюда подвижность

$$\mu = 2^{1/2} \cdot 3^{1/4} \Gamma\left(\frac{5}{4}\right) u_0 \cdot \left(\frac{V m \omega^2 kT}{eEl}\right)^{1/2}. \quad (4,17)$$

Уравнения (4,15) и (4,17) отличаются от приближенных соотношений (4,7) и первого из соотношений (4,6) численным множителем порядка единицы $\left(\Gamma\left(\frac{5}{4}\right) \approx 0,91\right)$.

Переходим к полупроводникам с ионной решеткой¹⁷. Здесь следует различать два предельных случая: а) средняя энергия электронов $\bar{\varepsilon} \ll \hbar\omega_0$ и б) $\bar{\varepsilon} \gg \hbar\omega_0$. В первом случае, очевидно, $kT \ll \hbar\omega_0$ и, кроме того, поле не слишком велико, так что $\bar{\varepsilon} \ll \hbar\omega_0$. Установление стационарного распределения электронов происходит здесь благодаря двойным переходам, описанным в начале второй части третьего раздела. При этом существенна зависимость частоты оптических колебаний ω от волнового вектора [см. уравнение (3,5)]. Второй случай, $\bar{\varepsilon} \gg \hbar\omega_0$, осуществляется либо при высокой температуре ($kT \gg \hbar\omega_0$) и любом поле, либо при низкой температуре и очень сильном поле. При этом зависимость ω от q можно пренебречь и считать, что все фононы обладают одинаковой энергией $\hbar\omega_0$.

$$а) \quad \bar{\varepsilon} \ll \hbar\omega_0.$$

Уравнение непрерывности в энергетическом пространстве в стационарном случае имеет вид:

$$\frac{1}{V 2m\varepsilon} \cdot \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ -\frac{4\lambda^2}{3\pi} \sqrt{2m} \cdot \hbar\omega_0 \cdot \varepsilon^{3/2} \left(\frac{df_0}{d\varepsilon} + \frac{1}{kT} \cdot f_0 \right) - \frac{2eE}{3} \varepsilon f_1 \right\}. \quad (4,18)$$

Согласно (3,97) время свободного пробега

$$\tau = \frac{l}{v} = \frac{Ma^3 (\hbar\omega_0)^{3/2} \cdot e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}}}{2\pi \sqrt{2m} \gamma^2 Z^2 e^4} = \frac{l_0}{\sqrt{\frac{2\hbar\omega_0}{m}}} e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}}. \quad (4,19)$$

Здесь удобнее пользоваться не длиной, а временем свободного пробега, так как оно не зависит от энергии. В (4,18) обозначено:

$$\lambda = a \frac{\hbar\omega_0}{\hbar^2}, \quad (4,20)$$

$$\frac{2ma^2}{\hbar^2}$$

где a — коэффициент в формуле (3,5). Связь между f_1 и f_0 дается обычной формулой:

$$f_1 = eEl \frac{df_0}{d\varepsilon} = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} \tau eE \frac{df_0}{d\varepsilon}. \quad (4,21)$$

Подставляя (4,21) в (4,18) и полагая поток в энергетическом пространстве j_ε равным нулю, получаем уравнение, решение которого:

$$f_0 = C e^{-\frac{\varepsilon}{k\theta}}. \quad (4,22)$$

Таким образом, получается максвелловское распределение с температурой, отличающейся от температуры решетки

$$k\theta = kT \left[1 + \left(\frac{eE\tau}{\lambda \sqrt{2m\hbar\omega_0}} \right)^2 \right]. \quad (4,23)$$

Средняя энергия

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2} kT \left[1 + \left(\frac{eE\tau}{\lambda \sqrt{2m\hbar\omega_0}} \right)^2 \right]. \quad (4,24)$$

Подвижность

$$u = \frac{e\tau}{m}. \quad (4,25)$$

Независимость подвижности, а вместе с нею и электропроводности, от поля (несмотря на рост средней энергии) является, конечно, следствием того, что время свободного пробега τ не зависит от энергии.

Границы применимости формул (4,24) и (4,25) устанавливаются из требования, чтобы $\bar{\varepsilon}$ было значительно меньше, чем $\hbar\omega_0$. Необходимо, следовательно, чтобы выполнялось неравенство

$$\frac{eE\tau}{\lambda \sqrt{2m\hbar\omega_0}} \ll \frac{\hbar\omega_0}{kT} \quad (4,26)$$

или

$$E \ll \lambda \frac{\hbar\omega_0}{kT} \cdot \frac{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}{e\tau} \approx 1000 \text{ В/см}, \quad (4,27)$$

т. е. вплоть до этих полей выполняется закон Ома [формула (4,25)]

$$\text{b) } \bar{\varepsilon} \gg \hbar\omega_0.$$

Основные уравнения в этом случае следующие:

$$\frac{1}{\sqrt{2m\varepsilon}} \frac{dj_\varepsilon}{d\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{2m\varepsilon}} \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ -\frac{2\pi m \gamma^2 Z^2 e^4}{Ma^3} \lg \frac{4\varepsilon}{\hbar\omega_0} \left[f_0 + \hbar\omega_0 \left(N_q + \frac{1}{2} \right) \frac{df_0}{d\varepsilon} \right] - \frac{2eE}{3} \varepsilon f_1 \right\} = 0, \quad (4,28)$$

$$eE \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} \frac{df_0}{d\varepsilon} = -\frac{4\pi m \gamma^2 Z^2 e^4 \left(N_q + \frac{1}{2} \right)}{Ma^3 \cdot \hbar\omega_0 \sqrt{2m\varepsilon}} f_1(\varepsilon). \quad (4,29)$$

Если $E=0$, то при $kT \gg \hbar\omega_0$, $\hbar\omega_0 \left(N_q + \frac{1}{2} \right) \approx kT$ и из уравнения (4,28) для f_0 получается максвелловское распределение. Если же $kT \ll \hbar\omega_0$, то $\hbar\omega_0 \left(N_q + \frac{1}{2} \right) \approx \frac{1}{2} \hbar\omega_0$, но тогда уравнение (4,28) не справедливо.

В рассматриваемом случае $\bar{\epsilon} \gg \hbar\omega_0$, мы не можем положить j_{ϵ} равным нулю, так как решение уравнения $j_{\epsilon} = 0$ дает такую функцию $f_0(\epsilon)$, которую нельзя нормировать, ибо интеграл $\int_0^{\infty} f_0(\epsilon) \sqrt{2m\epsilon} d\epsilon$ расходится на верхнем пределе. Это обстоятельство связано с возрастанием длины свободного пробега электронов при увеличении их энергии. Согласно формуле (3,98) l пропорционально ϵ . Поэтому уже в слабых полях (конечно, при высоких температурах $kT \gg \hbar\omega_0$) происходит сильное изменение функции распределения электронов в области больших энергий. Торможение быстрых электронов благодаря их столкновениям с фононами незначительно. Вследствие этого необходимо учитывать ионизацию электронами атомов решетки или же атомов примесей, если их энергия ионизации ϵ_i значительно меньше, чем для атомов решетки. Вместе с ионизацией тогда нужно принимать во внимание также и прилипание электронов.

Мы не можем здесь входить в детали вычислений и ограничимся лишь приведением результатов. Оказывается, что заметные отклонения от закона Ома, именно рост электропроводности с полем, наступают в полях порядка $\sqrt{6} \pi \frac{m}{M} \frac{\gamma Ze^2/a}{\hbar\omega_0} \cdot \frac{\gamma Ze^2}{a^2} \approx 10^5 \text{ В/см.}$

Итак, мы имеем следующую картину зависимости электропроводности от поля для полупроводников с ионной решеткой. При низких температурах $kT < \hbar\omega_0$ подвижность до полей порядка 1000 В/см не зависит от поля, т. е. выполняется закон Ома, несмотря на то, что средняя энергия электронов может стать значительно больше $\frac{3}{2} kT$. Подвижность при этом экспоненциально уменьшается с температурой [см. (3,100)]. Далее начинается возрастание электропроводности, которое становится значительным при полях порядка 10^5 В/см . В этих полях подвижность перестает зависеть от температуры (при $kT \ll \hbar\omega_0$, $N_q + \frac{1}{2} \approx \frac{1}{2}$).

При $kT \gg \hbar\omega_0$ электропроводность при полях, меньших чем 10^5 В/см , не зависит от поля. Подвижность пропорциональна $\frac{1}{\sqrt{T}}$ [см. формулу (3,101)]. При полях, больших чем 10^5 В/см , электропроводность возрастает с полем как благодаря увеличению подвижности, так и благодаря возрастанию концентрации электронов из-за ионизации. Одновременно возрастает и средняя энергия электронов. Что касается результирующей концентрации электронов в сильном поле, то для ее определения необходимо, кроме вероятности ионизации, знать еще вероятность рекомбинации или прилипания электронов. Эта последняя и зависимость ее от самой концентрации зависят от расположения и заполнения локальных уровней энергии. Подобный расчет для полупроводников с атомной решеткой был сделан Н. Л. Писаренко¹⁸.

Может случиться, что электронам с большой энергией легче затратить свою энергию, например, на возбуждение атомов, чем на их

ионизацию. В таком случае концентрация электронов не будет отличаться от равновесной. Рост электропроводности в сильном поле будет тогда обязан только увеличению подвижности электронов.

Мы видим, что поведение полупроводников с ионной решеткой в сильном поле значительно отличается от поведения полупроводников с атомной решеткой и как будто лучше согласуется с экспериментальными фактами.

Все рассуждения этого раздела, разумеется, в равной мере применимы и к электронам в верхней, почти свободной полосе уровней, и к положительным дыркам в почти заполненной нижней полосе.

Явления, связанные с электрическим пробоем, значительно сложнее и должны, вероятно, рассматриваться с учетом образования объемных зарядов и связанных с ними весьма сильных неравномерных полей, возникающих благодаря распространению лавины¹⁹.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Bloch, Z. Physik, **52**, 555, 1928.
 2. A. H. Wilson, Proc. Roy. Soc., **A 133**, 458, 1931; **A 134**, 277, 1932.
 3. R. H. Fowler, Proc. Roy. Soc., **A 140**, 505, 1933; Sow. Phys., **3**, 507, 1933; Б. Гудден, Успехи физич. наук, **15**, 703, 1935; B. Gudden u. W. Schottky, Physik. Z., **36**, 717, 1935; F. Hund, Physik. Z., **36**, 725, 1935. См. также: А. Ф. Иоффе, Электронные полупроводники, Л., 92 стр., 1933.
 4. B. R. A. Nijboer, Proc. Phys. Soc., **51**, 575, 1939.
 5. M. Bronstein, Sow. Rhys., **2**, 28, 1932; **3**, 140, 1933.
 6. J. W. Harding, Proc. Roy. Soc., **A 140**, 205, 1933.
 7. М. Борн и Гепперт-Мейер, Теория твердого тела, ОНТИ, 1938.
 8. Г. Бете и А. Зоммерфельд, Электронная теория металлов, ОНТИ, 1938.
 9. В. Жузе и Б. Курчатов, ЖЭТФ, **2**, 309, 1932.
 10. H. Fröhlich and N. F. Mott, Proc. Roy. Soc., **A 171**, 496, 1939.
 11. H. Fröhlich Proc. Roy. Soc., **A 160**, 230, 1937.
 12. И. Д. Рожанский, ЖЭТФ, в печати.
 13. F. P. Henninger, Physik. Z., **6**, 216, 1933; Ann. Physik, **28**, 245, 1937.
 14. А. В. Иоффе и А. Ф. Иоффе, ДАН, **16**, 77, 1937; ЖЭТФ, **9**, 1428, 1939.
 15. Л. Ландау и А. Компанеев, ЖЭТФ, **5**, 276, 1935.
 16. Б. Давыдов, ЖЭТФ, **7**, 1069, 1937.
 17. Б. Давыдов и И. Шмушкевич, ЖЭТФ, в печати.
 18. Н. Л. Писаренко, Изв. Акад. Наук СССР, сер. физ., № 5—6, 631, 1938.
 19. L. B. Loeb, Rev. Mod. Phys., **8**, 267, 1936.
-