

Д. В. КОЗЛОВ

---

ПОЛУПРОВОДНИКОВАЯ  
ЭЛЕКТРОНИКА

---

Лекции, набранные студентами

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Введение</b> . . . . .	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Элементы зонной теории</b> . . . . .	<b>7</b>
2.1	$k - p$ - метод . . . . .	10
2.2	Применение $k - p$ метода. . . . .	19
2.3	Состояние примесей в полупроводниках . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Статистика электронов и дырок в полупроводниках</b> . .	<b>22</b>
3.1	Заполнение зон в полупроводниках . . . . .	22
3.2	Пропущенная лекция . . . . .	24
3.3	Центры примесей . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Процессы рассеяния</b> . . . . .	<b>25</b>

# 1 Введение

В нашем курсе мы будем изучать следующие вопросы.

- 1) Элементы зонной теории. Какие состояния могут занимать заряды в поле кристаллической решётки.
- 2) Как заполняются эти состояния зарядами (статистика электронов и дырок в полупроводниках).
- 3) О том, с помощью каких процессов установится состояние равновесия (рассеяние зарядов) – как заряды переходят между состояниями
- 4) Явления линейного переноса в полупроводниках, полупроводники в слабых полях.
- 5) Полупроводники в сильных электрических полях.
- 6) Явления в контактах. Диод Шоттки. Гетеропереходы.
- 7) Диоды, транзисторы: на этом всё, и может быть ещё рассмотрим оптические явления.

## Литература.

1. Питер Ю, Мануэль Кордон – Основы физики полупроводников. 2002. Очень хорошая. Есть явления в контактах.
2. Бонч-Бруевич, Калашников – Физика полупроводников. Красная книжка.
3. Собственная брошюрка по рассеянию и переносу зарядов в полупроводниках.

**О химической связи.** Если взять два атома углерода, у них формула внешних орбиталей  $1S_2 2S_2 2P_2$ . У нас есть четыре электрона лишних (или не хватает) на внешних орбиталях. И вот вступают в взаимодействие два атома, у которых есть  $2$  и  $2S$  орбитали. Если они не взаимодействуют, кратность вырождения  $2$ .

При появлении взаимодействия уровни расщепятся, и у этих двух атомов на двоих на внешних оболочках  $8$  электронов.

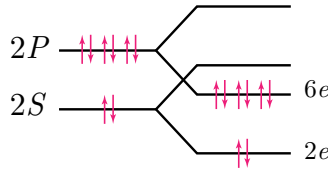


Рис. 1: Электроны на уровнях углерода

Посмотрим на нижние уровни, где оказалось по 2 и по 6 электронов. Состояния в них оказались связанными, потому что в результате взаимодействия их энергия уменьшается. А другие два состояния антисвязаны. Так возникает химическая связь. Мы рассмотрим это в дальнейшем подробно.

**Виды полупроводников.** Какие бывают полупроводники, кроме 4-й группы? Это полупроводники вида  $A_3B_5$ , например арсенид галлия, арсенид индия, фосфид галлия.

Могут быть полупроводники, которые образованы связью второй и шестой групп. При этом на второй группе должна быть валентность 2.

Ртуть, на самом деле, переходный металл: так получилось, что у нее внешняя электронная оболочка оказывается  $6S$ , и в соединениях она проявляет валентную связь.

Простейшая кристаллическая решетка – это цепочка

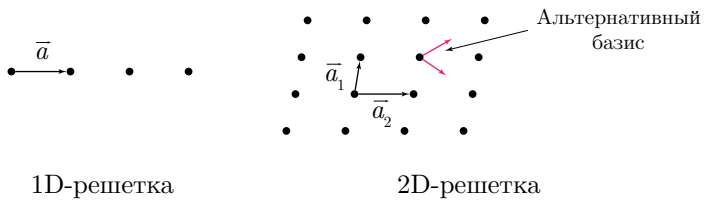


Рис. 2: Одномерная и двумерная кристаллическая решетка

В одномерной решетке (цепочке) трансляционная симметрия имеет вид

$$\vec{r}_n = \vec{a} \cdot n. \tag{1.0.1}$$

В двумерной кристаллической решетке: также можем выбрать вектора  $\vec{a}_1$  и  $\vec{a}_2$ , и каждый атом найдется как

$$\vec{r} = \vec{a}_1 \cdot m + \vec{a}_2 \cdot n \quad (1.0.2)$$

Заметим, что в случае одномерной решётки выбор базисного вектора однозначен, а для двумерной решётки уже однозначности нет.

В жизни все кристаллические решётки трёхмерные. Какие вообще они бывают? Самая простейшая – кубическая: атомы в вершинах куба. Вообще говоря, нет элементов с такой решёткой. Поэтому следующий тип - объёмно центрированная решётка (ОЦК). Это атомы в вершинах куба и один атом в центре куба (на пересечении диагоналей).

Следующий тип – гранецентрированная решетка (ГЦК): например, галлий. Атомы добавляются еще на пересечении диагоналей граней куба.

Самые распространенные решетки у полупроводников – это решетка типа алмаза и решетка типа обманки. Представим себе наложение двух ГЦК решеток, одну из которых сместили на четверть главной (внутренней) диагонали. В вершинах и в центрах граней каждый решетки – атом.

Транслируя атомы одной решетки на ее базисные вектора, мы никогда не получим другой решетки. Поэтому возникает понятие базисного набора атомов: это минимальный набор атомов, транслируя которые, получаем всю решётку. Это решётка типа «алмаз». Такой же решёткой обладают германий, кремний, одна из модификаций олова, и , вообще говоря, свинец.

Следующий тип решётки – цинковая обманка (сульфид цинка). Это алмазная решётка, только в вершинах и на гранях такой решетки разные атомы. Такой решёткой обладают оксид цинка, наиболее используемый в полупроводниковой электронике арсенид галлия, фосфид галлия, алюминия арсенид, ртуть теллур, кадмий теллур, цинк теллур.

**Чем полупроводники отличаются от металла?** У металла есть свободные носители заряда при любой температуре. Это следствие того, что в металле ширина запрещенной зоны стремится к нулю. Может возникнуть такой случай, что последняя энергетическая (валентная) зона окажется полностью заполненной. Такой материал является либо полупроводником, либо диэлектриком. Говорить о ширине запрещенной зоне (зазор между валентной зоной и зоной проводимости (первой пустой))

можно только для этих материалов.

Если в валентной зоне есть вакантные места, то это – металл.

Допустим, мы взялись описывать состояние электрона в твердом теле. Что мы должны делать? Решать уравнение Шрёдингера с гамильтонианом.

Нам нужно учесть движение ядер и электронов:

$$H = - \sum_j \frac{\hbar^2 \Delta_{R_j}}{2M_j} - \sum_i \frac{\hbar^2 \Delta_{r_i}}{2m_0} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{z^2 e^2}{|R_i - R_j|} - \sum_{i,j} \frac{ze^2}{|R_i - r_j|} \quad (1.0.3)$$

Используется ряд приближений: первое – мы будем искать не просто электроны в поле ядер, а говорить о наличии глубоких электронов, которые связаны с ядром и не двигаются, и валентных. Поэтому вместо координат ядер будут координаты ионных остовов: ядро плюс два глубоких электрона.

Будем решать задачу о движении валентных электронов в поле ионных остовов.

Второй шаг – адиабатическое приближение (Борна-Оппенгеймера): будем считать, что масса ионов велика и двигаются они медленно по сравнению с валентными электронами.

Далее можно найти движение ионов в некоем усреднённом поле электронов.

Третий шаг – давайте ионы закрепим в узлах идеальной кристаллической решётки. Тогда одно из слагаемых становится внешним потенциалом идеальной кристаллической решётки.

Все равно все не слишком хорошо. Давайте мы движение каждого электрона представим как движение в периодическом потенциале, образованном потенциалом решётки и потенциалом остальных электронов.

Решаем такую задачу (с учётом спин-орбитального взаимодействия):

$$-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_0} \Psi + U(r) \Psi - \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} ([\nabla \times \nabla U(r)], \vec{\sigma}) \Psi = E \Psi \quad (1.0.4)$$

Зная потенциал электронов, можем записать

$$U = U_0(r) + \tilde{U}, \quad (1.0.5)$$

где  $U_0$  - от кристаллической решетки,  $\tilde{U}$  - от электронов.

Общая схема решения – с помощью метода псевдопотенциала. Метод последовательных итераций (функция - потенциал - функция - потенциал и так далее)

Когда  $U_n$  станет примерно равным  $U_{n+1}$ , можно сказать о том, что метод сошёлся.

Для решения вспомним функции Блоха:

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}U_k(r), \quad (1.0.6)$$

где период квазиволнового вектора больше периода решетки, а период функции  $U_k$  равен периоду решетки. Эти волновые функции нормированы, и

$$\int_V \Psi(\vec{r})d^3\vec{r} = 1, \quad (1.0.7)$$

где  $V$  - объем кристалла.

$$-\frac{\pi}{a_x} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a_x}, \quad -\frac{\pi}{b_y} \leq k_y \leq \frac{\pi}{b_y}, \quad -\frac{\pi}{c_z} \leq k_z \leq \frac{\pi}{c_z} \quad (1.0.8)$$

$a_x, b_y, c_z$  - размеры решетки по осям  $x, y, z$ .  $k_x, k_y, k_z$  - это физически неэквивалентные квазиволновые вектора.

С каким шагом может принимать квазиволновой вектор эти значения? Задаются периодические граничные условия

$$\Psi(0, y, z) = \Psi(L_x, y, z) \quad (1.0.9)$$

При таких условиях

$$e^{iL_x K_x} = 1 \quad \Rightarrow \quad K_x = \frac{2\pi}{L_x} n \quad (1.0.10)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta U_k(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{2m_0} U_k(\vec{r}) - \frac{i\hbar^2 (\vec{K}, \nabla) U_k(\vec{r})}{m_0} + \\ & + \frac{\hbar^2}{2m_0 c^2} ([\nabla \times \nabla U(r)], \vec{\sigma}) U_k - \frac{i\hbar^2}{2m_0 c^2} ([\nabla \times \nabla U]) U_k + U(r) U_k(r) = E U_k(r) \end{aligned} \quad (1.0.11)$$

Движение финитное: электрон заперт в кристалле и спектр должен быть

дискретным.

$$E_l(\vec{k}) \quad (1.0.12)$$

Номер зоны  $l$  и квазиволновой вектор  $\vec{k}$  определяет квантовое состояние.

Дно какой-то из зон все равно будет ниже:

$$\min E_{l_1} < \min E_{l_2} \quad (1.0.13)$$

Возможна следующая ситуация. У нас есть максимум

$$\max E_{l_1} > \min E_{l_2} \quad (1.0.14)$$

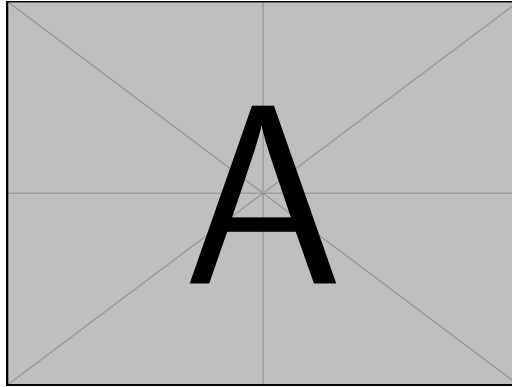


Рис. 3: Зонная структура

А может быть так, что

$$\max E_{l_1} < \min E_{l_2} \quad (1.0.15)$$

это и есть появление запрещённой зоны  $E_g$ .

## 2 Элементы зонной теории

Если зоны не перекрываются, то возникает запрещенная зона – полоса энергий, где нет электронов. Валентная зона – последняя заполненная зона при  $T = 0$ .



Алмаз обладает большой шириной запрещенной зоны, а значит из него можно делать радиационно устойчивую электронику. Зачем её делать? Нетрудно догадаться.

Дно валентной зоны образовано  $S$ -подобными функциями. Потолок валентной зоной образован  $P$ -подобными функциями.

Чем больше атомный номер, тем слабее расщепятся  $S$ -состояния.

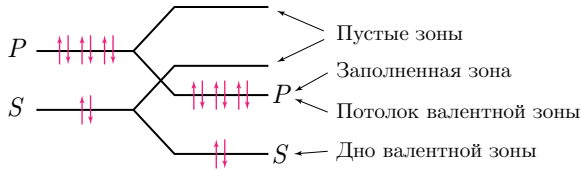


Рис. 4: Структура последних уровней кремния

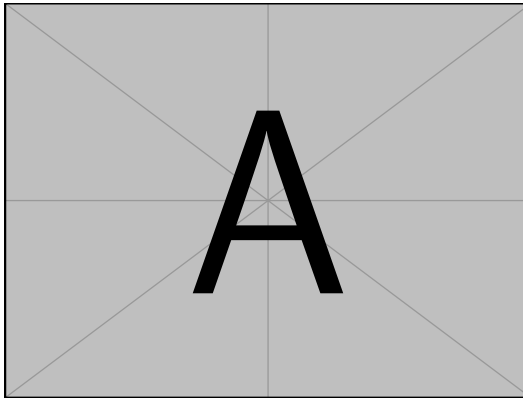


Рис. 5: Структура последних уровней германия

Примеси в кристаллической решетке – элементы с другой валентностью. Например, бор. Он встраиваясь в кристаллическую решетку кремния отдаст не 4 электрона, а три. У нас будет не хватать одного электрона. Недостающий атом – акцептор.

Для полупроводников 4-ой группы, акцепторами являются элементы 1-2-3 группы.

А если вместо бора будет мышьяк? От него будет на один больше электронов, чем нужно. Такой элемент называется донором.

Можем ввести решетку в  $k$ -пространстве

$$\vec{b}_1 = \frac{[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]}{([\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] \cdot \vec{a}_1)}, \vec{b}_2 = \frac{[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1]}{([\vec{a}_3 \times \vec{a}_1] \cdot \vec{a}_2)}, \vec{b}_3 = \frac{[\vec{a}_1 \times \vec{a}_2]}{([\vec{a}_1 \times \vec{a}_2] \cdot \vec{a}_3)} \quad (2.0.1)$$

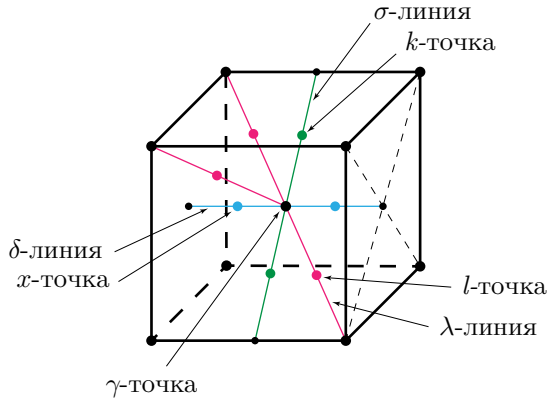


Рис. 6: Ячейка обратной решетки (в  $k$ -пространстве)

Точка с самой высокой симметрией в решетке ( $k = 0$ ) называется  $\gamma$ -точкой. Линии, которые соединяют  $\gamma$ -точку с вершинами куба называются  $\lambda$ -линий. Точки, лежащие на пересечении зоны Бриллюэна с  $\lambda$ -линиями, называются  $l$ -точки. Линии, соединяющие  $\gamma$  точку с центрами граней куба  $\delta$ -линиями. Точка пересечений  $\delta$  линий с границей зоны Бриллюэна –  $x$ -точка. Линия из  $\gamma$  к серединам ребер –  $\sigma$ -линия, а её пересечение с зоной Бриллюэна –  $k$ -точка.

Потолок валентной зоны в  $C, Si, Ge, GaAs, AlAs, InAs, InP, GaP \dots$  и других находится в  $\gamma$ -точке.

Дно зоны проводимости находится в разных точках  $k$ -пространства.

Полупроводники, где потолок совпадает с дном называются прямозонными. В германии дно зоны проводимости находится в  $l$ -точке. В кремнии, дно зоны находится на  $\delta$  линии.

## 2.1 $k - p -$ метод

Как говорили раньше, общий вид волновой функции в периодическом потенциале

$$\Psi = e^{i\vec{k}\vec{r}} U_k(r) \quad (2.1.1)$$

Ищем состояния электронов вблизи  $k = 0$ . Мы считаем, что удалось найти состояние электрона в этой точке. Хотим найти вблизи. Для этого запишем уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar\Delta}{2m_0} U_k - \frac{\hbar^2(\vec{k}, \nabla)}{m_0} U - \frac{i\hbar^2([\nabla, \nabla V], \sigma)}{4mc^2} U_k + \frac{\hbar([\nabla, \nabla V], \sigma)}{4mc^2} U_k + V(k)U(k) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} U_k = E U_k, \quad k \ll \frac{\pi}{a} \quad (2.1.2)$$

Все, что в точке  $k = 0$  обозначим как гамильтониан  $H_0$ , и представим  $H = H_0 + H_k$ .

$$H_k = \frac{i\hbar^2(\vec{k}, \nabla)}{m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2 \Delta}{2m_0} U_k, \quad U_k = \sum_{n=1}^{\infty} C_n U_{0j}(r) \quad (2.1.3)$$

$$(H_0 + H_k) \sum_{n=1}^{\infty} C_n U_{0i} = E \sum_{n=1}^{\infty} C_n U_{0i} \quad \Big| \cdot U_{0j} \quad (2.1.4)$$

$$E_g C_j + \sum C_i \langle U_{0j} | H_k | U_{0i} \rangle = E U_{0j} \quad (2.1.5)$$

Точно решить это сложно, так как никогда не знаем всех волновых функций. Но если рассматривать состояние электрона вблизи края, можно учитывать только ближайшие зоны. Отсюда вытекают различные методы упрощения: самый общий – метод Кейна. В нем учитывается зона валентности и зона проводимости и раскладывается только по ним.

Второй метод – модель Латтинжера-Кона. Зоны делятся на ближние и дальние: дно валентной зоны не учитывается, оно очень далеко.

Наконец, в  $k - p$  методе учитываются только края зоны.  $k - p$  называется из-за вида гамильтониана возмущения:

$$H_k = \frac{i\hbar^2(\vec{k}, \nabla)}{m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.1.6)$$

На самом деле,  $p = -i\hbar\nabla$ , и  $H$  имеет вид

$$H_k = \frac{\hbar(\vec{k}, \vec{p})}{m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.1.7)$$

Это теория возмущений, и условие малости возмущения  $|\hbar k| \ll |\vec{p}|$ . Мы решаем УШ с гамильтонианом

$$(H_0 + H_k)u_k(r) = Eu_k(r) \quad (2.1.8)$$

и ищем решение в виде разложения по собственным функциям гамильтониана  $H_0$ :

$$u_k = \sum_i C_i u_{0i}(r) \quad (2.1.9)$$

Тогда

$$E_j + \sum_{j=1}^{16} C_j \langle u_{0j} | H_k | u_{0i} \rangle = EC_i \quad (2.1.10)$$

Давайте оставим только индексы, отвечающие валентной зоне и зоне проводимости: две волновые функции, соответствующие дну зону валентности, и две для зоны проводимости в  $\gamma$ -точке (это может быть не так, но для арсенида галлия, например, так). Итого 4  $s$ -состояний, 12  $p$ -состояний.

Суммирование должно вестись по 16-ти состояниям. Это первое приближение. Вообще говоря, это справедливо: когда мы рассматриваем состояние электрона вблизи точки в  $k$ -пространстве, мы отступим от нее на расстояние много больше ширины зон. Это естественное приближение.

Есть три модели: первая – это поправки к состояниям зоны проводимости – приближение эффективной массы в зоне проводимости. В этом случае мы предполагаем, что

$$E = E_i + \Delta E, \quad (2.1.11)$$

где  $\Delta E \ll E_g, \Delta E_c$ . В этом случае очевидно, что

$$u_k(r) = \underbrace{c_1 u_{0c}}_{\text{тут два состояния}} + \sum_{j=1}^{14} b_j u_{0j}. \quad (2.1.12)$$

В этой модели обычно пренебрегают спин-орбитальным взаимодействием, и суммирование будет не до 14, а до 7. Мы выделили в разложении близкое состояние (первое слагаемое, в зоне проводимости), и далекие (сумма всех остальных).

**Вторая модель – Латтинжера-Кона.** Она описывает состояние электрона вблизи края валентной зоны (поправка к энергии в зоне валентности). В этом случае

$$u_k(r) = \sum_{j=1}^6 c_j u_{Vj} + \sum_{j=1}^6 b_j u_{0j} + \sum_{j=1}^2 a_j u_{0j} \quad (2.1.13)$$

Последним мы пренебрегаем: это очень далёкие состояния,  $a_j \ll b_j \ll c_j$ . По сути, мы расписали сумму на близкие, далекие и очень далекие состояния, и последнее отбросили.

Эта модель справедлива, когда

$$\Delta E \ll E_g. \quad (2.1.14)$$

Здесь  $\Delta E \sim kT$ .

Эти модели могут и не работать, когда материал существенно узкозонный (например, кадмий-3 теллур). В ртуть-теллур зоны перекрываются, и при содержании кадмия меньше 16.8% исчезает запрещенная зона, да и до 25 процентов очень мала (меньше 100 мэВ).

Есть случаи, когда поправки, которые мы ищем в энергии, сравнимы по величине с шириной запрещенной зоны: в этом случае работает модель Кейна.

**Модель Кейна.** В этом случае близкими зонами являются зоны потолка валентности и дна проводимости. Аналогично разбивая сумму, получаем

$$u_k(r) = \sum_{j=1}^8 c_j u_{0j} + \sum_{j=1}^8 b_j u_{0j}. \quad (2.1.15)$$

Здесь опять, первая сумма по близким состояниям, вторая - по дальним.

Будем развивать кр-метод в общем виде для любой из этих трах

моделей: в общем виде для любой из этих моделей

$$u_k(r) = \sum_{j=1}^N c_j u_{0j} + \sum_{j=1}^M b_j u_{0j} \quad (2.1.16)$$

Подставим такое решение в уравнение Шрёдингера:

$$H_0 \sum_{j=1}^N c_j u_{0j} + H_0 \sum_{j=1}^M b_j u_{0j} + \sum_{j=1}^N c_j H_k u_{0j} + \sum_{j=1}^M b_j H_k u_{0j} = E \left( \sum_{j=1}^N + \sum_{j=1}^M \right) \quad (2.1.17)$$

Распишем сначала для близких состояний (учтем, что функции ортонормированны:  $\langle u_{0j} | u_{0i} \rangle = \delta_{ij}$ ) тогда

$$E_{0i} c_i u_{0i} + \sum_{j=1}^N c_j \langle u_{0j} | H_k | u_{0i} \rangle + \sum_{j=1}^M b_j \langle u_{0j} | H_k | u_{0i} \rangle = E c_i \quad (2.1.18)$$

Казалось бы, пренебречь вторым слагаемым в силу малости и все получится очень просто. Давайте найдем скалярное произведение под суммами выше.

Дело в том, что волновые функции зоны проводимости и валентной зоны в гамма-точке обладают определенной четностью. Оказывается, что волновые функции валентной зоны – четные, а проводимости – нечетные.

Если  $u_j$  и  $u_i$  одной чётности, то

$$\langle u_{0i} | (\vec{k}, \nabla) | u_{0j} \rangle = 0, \quad (2.1.19)$$

так как интеграл от произведения четной функции на нечетную равен нулю (тут функция на градиент функции).

Линейные по  $k$  слагаемые есть только в модели Кейна, а в двух других – только квадратичные. Поэтому на порядок малости слагаемых нужно смотреть аккуратно.

Умножим скалярно уравнение Шрёдингера на волновую функцию  $u_{0m}$  далекой зоны и получим уравнение для коэффициентов разложения:

$$b_m E_m + \sum_{j=1}^N c_j \langle u_{0m} | H_k | u_{0j} \rangle + \sum_{j=1}^M b_j \langle u_{0m} | H_k | u_{0j} \rangle = E b_m \quad (2.1.20)$$

Это выражение было пока без приближений. Мы можем смело пренебречь вторым слагаемым, как второго порядка малости (по ашка и по  $b$ ). Еще момент – рассмотрим разность искомой энергии и  $E_m$ , где  $E_m$  – потолок валентной зоны. Мы заведомо знаем, что

$$|E - E_m| \gg \Delta E \quad (2.1.21)$$

Тогда можно примерно написать  $E \sim E_{c,v}$ . Вопрос только, к какой из этих энергий мы ближе.

Тогда из уравнения можно найти коэффициент:

$$b_m = \frac{\sum_{j=1}^N c_j \langle u_{0m} | H_k | u_{0j} \rangle}{E_{c,v} - E_m} \quad (2.1.22)$$

Переобозначив соответствующим образом индексы суммирования  $j \rightarrow m$ , мы подставим  $b_m$  в исходное уравнение:

$$E_{0i} c_i u_{0i} + \sum_{j=1}^N c_j \langle u_{0i} | H_k | u_{0j} \rangle + c_j \sum_{m=1}^M \sum_{j=1}^N \frac{c_j \langle u_{0m} | H_k | u_{0j} \rangle}{E_{c,v} - E_m} \langle u_{0i} | H_k | u_{0m} \rangle = c_i E \quad (2.1.23)$$

По сути, это уравнение выглядит вот так:

$$H_{ij} c_j = E c_i \delta_{ij}, \quad (2.1.24)$$

где

$$H_{ij} = E_{0i} \delta_{ij} + \langle u_{0i} | H_k | u_{0j} \rangle + \sum_{m=1}^M \frac{\langle u_{0m} | H_k | u_{0j} \rangle \langle u_{0i} | H_k | u_{0m} \rangle}{E_{c,v} - E_m} \quad (2.1.25)$$

Это общий вид всех гамильтонианов приведенных выше моделей для простой валентной зоны. Суммирование ведется по далеким зонам.

Получим гамильтониан эффективной массы для простой, невырожденной

денной зоны проводимости (её края).

$$\langle u_{0c} | H_k | u_{0c} \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.1.26)$$

$$H_{11} = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \sum_{m=1}^3 \frac{\langle u_{Vm} | H_k | u_c \rangle^2}{E_g} + \sum_{m=1}^3 \frac{|\langle u_{cm} | H_k | u_c \rangle|^2}{\Delta_c} \quad (2.1.27)$$

$$H_k \approx -\frac{i\hbar^2(\vec{k}, \nabla)}{m_0} \quad (2.1.28)$$

Утверждение:

$$\left\langle u_j \left| \frac{\partial}{\partial x_i} \right| x_i \right\rangle \neq 0 \quad \text{if } i = j \quad (2.1.29)$$

Давайте обозначим

$$\left\langle u_c \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| x_c \right\rangle = Q, \quad \left\langle u_c \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| x_v \right\rangle = P \quad (2.1.30)$$

$$\frac{\hbar^4}{E_g m_0^2} \sum_{m=1}^3 \left\langle u \left| k_x \frac{\partial}{\partial x} + k_y \frac{\partial}{\partial y} + k_z \frac{\partial}{\partial z} \right| x, y, z \right\rangle^2 \quad (2.1.31)$$

$$H_{11} = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^4 P^2}{m_0^2 E_g} k^2 - \frac{\hbar^4 Q^2}{m_0^2 \Delta_c} k^2 \quad (2.1.32)$$

По сути, получили простой параболический закон дисперсии, как для электрона. Можно записать это в общем виде

$$E = H_{11} = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left( 1 + \frac{\hbar^2 P^2}{m_0 E_g} - \frac{\hbar^2 Q^2}{m_0 \Delta_c} \right) \quad (2.1.33)$$

Если решать уравнение  $H_{11}C = EC$ , получим собственные значения.

Закон для электрона на краю зоны получился как для свободного электрона, но с другой массой: можно ввести эффективную массу

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} \left( 1 + \frac{\hbar^2 P^2}{m_0 E_g} - \frac{\hbar^2 Q^2}{m_0 \Delta_c} \right) \quad (2.1.34)$$

Из-за зоны проводимости масса увеличивается, а из-за валентной – уменьшается. Чем меньше ширина запрещённой зоны, тем меньше эффективная масса и круче идут ветви квадратичной дисперсии. Чаще всего ока-



зывается

$$1 \ll \frac{\hbar^2 Q^2}{m_0 \Delta_c} \ll \frac{\hbar^2 P^2}{m_0 E_g}, \quad (2.1.35)$$

и эффективную массу можно записать как

$$\frac{m^*}{m_0} \approx \frac{m_0 E_g}{\hbar^2 P^2} \quad (2.1.36)$$

Мы везде рассматривали в окрестности гамма-точки – точки высокой симметрии. А если смотреть на  $\delta$ -линии, в  $L$ -точке, что будет тогда? Оказывается, что в случае простой невырожденной зоны закон дисперсии немного изменится: на  $\lambda$  или  $\delta$  линиях

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}^*} \quad (2.1.37)$$

Рассмотрим приближение Латтинжера-Кона-:

$$H_{ij} = E_i + \langle u_{vi} | H_k | u_{vj} \rangle + \sum_{m=1}^2 \frac{\langle u_{vi} | H_k | u_{cm} \rangle \langle u_{cm} | H_k | u_{v0} \rangle}{E_v - E_c} + \sum_{m=1}^6 \frac{\langle u_{vi} | H_k | u_{cm} \rangle \langle u_{cm} | H_k | u_{vj} \rangle}{E_v - E_c - \Delta_c} \quad (2.1.38)$$

Первое слагаемое дает энергию состояния вблизи края валентной зоны. Если  $i = 1 \dots 4$ , то  $E_i = E_v$ , иначе  $i = 5 \dots 6$ ,  $E_i = E_v - \Delta$ .

Какой вид принимает гамильтониан Латтинжера? В нем сильное упрощение: в нем пренебрегается спин-отщепленной зоной. Это, к примеру, происходит в германии, где спин-орбитальное расщепление порядка 200 мэВ, в арсениде галлия, где 340 мэВ. А в кремнии - уже непонятно (там 40 мэВ, что может быть сравнимо с  $kT$ .) Есть элемент, где величина спин-орбитального расщепления очень мала: в углероде она составляет всего лишь 6 мэВ.

$$H_{ij} = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \sum_{m=1}^2 \frac{\langle u_{vi} | H_k | u_{cm} \rangle \langle u_{cm} | H_k | u_{vj} \rangle}{E_v - E_c} + \sum_{m=1}^6 \frac{\langle u_{vi} | H_k | u_{cm} \rangle \langle u_{cm} | H_k | u_{vj} \rangle}{E_v - E_c - \Delta_c} \quad (2.1.39)$$

Здесь можно увидеть, что диагональные члены такого гамильтониана отрицательны, так как  $E_v - E_c = -E_g$ .

Квадратичным членом можно пренебречь, и в общем случае гамильтониан Лапинджера даст квадратичную форму по компонентам квази-волнового вектора  $k$ .

Вид гамильтониана Латтинжера

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{pmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{pmatrix} \quad (2.1.40)$$

где

$$F = (\gamma_1 + \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2, \quad (2.1.41)$$

$$G = (\gamma_1 - \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2, \quad (2.1.42)$$

$$H = i\sqrt{3}\gamma_3 k_z (k_x - ik_y) \quad (2.1.43)$$

Данные выражения верны, если оси совпадают с кристаллографическими осями.

$$I = \frac{\sqrt{3}}{2} ((\gamma_2 + \gamma_3)(k_x - ik_y)^2 + (\gamma_2 - \gamma_3)(k_x + ik_y)^2) \quad (2.1.44)$$

Константы  $\gamma_{1,2,3}$  называются константами Лапинджера и зависят от материала. Еще вводят константы  $A, B, C, D$ , которые

$$A = \gamma_1, \quad B = 2\gamma_2, \quad D = 2\sqrt{3}\gamma_2, \quad C = \sqrt{D^2 - 3B^2} \quad (2.1.45)$$

У нас есть кубическая симметрия в  $\gamma$ -точке. Какие есть операции в кубической симметрии? У нас есть кубик

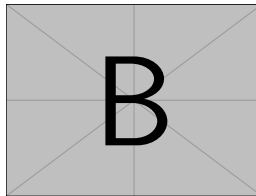


Рис. 7: Кубик

Такой кубик сам в себя переходит в том случае, если мы будем его поворачивать на 90 градусов вокруг осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Так же можно менять координаты  $x$ ,  $y$ ,  $z$  местами, отражать куб в плоскости, проходящей через центр куба.

Все операции должны быть симметричными относительно перестановки координат.

Чтобы найти собственные значения энергии, нужно решить биквадратное относительно энергии уравнение

$$\det(H_{ij} = \delta_{ij}E) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_{1,2} = Ak^2 \pm \sqrt{B^2k^4 + c^2(k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2)} \quad (2.1.46)$$

Следует отметить, что  $A$  отрицательно, и ветви дисперсии идут вниз. Из выражения видно, что энергии не меняются при перестановках кубической симметрии, и видно, что закон дисперсии существенно анизотропный, то есть зависит от направления квазиволнового вектора.

В случае изотропного закона дисперсии изоэнергетические поверхности имеют вид сферы, а в случае анизотропии они будут иметь вид, изображённый на рис. 8.

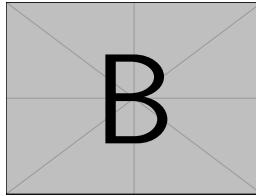


Рис. 8: Вид изоэнергетических поверхностей

Иногда при описании состояний электронов и дырок используется сферическое приближение, в котором в гамильтониане Латтинжера делают замены

$$\gamma_3 = \gamma_2, \quad \gamma_2 \rightarrow \bar{\gamma} = 3\gamma_2 + \frac{2\gamma_3}{5} \quad (2.1.47)$$

Если мы нарисуем зависимость  $E(k)$  в виде двух ветвей, то плюс соответствует тяжёлым дыркам, минус – лёгким.

## 2.2 Применение $k - p$ метода.

1. Описание состояний электронов и дырок ведется вблизи краев зон
2. Кристалл находится во внешнем поле  $V(r)$

Пусть поле мало меняется на масштабе решетки (это бывает часто, так как решетка мала - доли нанометра):

$$\frac{V(r)}{\frac{dV}{dx}} \gg a, \quad L \gg a. \quad (2.2.1)$$

Можно искать волновую функцию электрона в следующем виде:

$$\Psi(r) = \sum_j \chi_j(r) u_{0j}(r), \quad (2.2.2)$$

где  $\chi$  - медленно меняющаяся амплитуда, а  $u$  - блоховские функции. Оказывается, что

$$H_{ij}(-i\nabla)\chi_j + V(r)\chi_i = E\chi_j. \quad (2.2.3)$$

Доказательство этого уравнения. Давайте разложим медленные амплитуды в ряд Фурье:

$$\psi(r) = \sum_j \int c_j(k) d^3k \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{0j}(r) \quad (2.2.4)$$

Запишем уравнение Шрёдингера в виде

$$(H_0 + H_k)\psi + V(r)\psi = E\psi(r) \quad (2.2.5)$$

и подставим в него ряд:

$$\begin{aligned} H_0 \sum_j \int c_j(k) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3\vec{k} u_{0j}(r) + H_k \sum_j \int d^3\vec{k} c_j(k) e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{0j}(r) + \\ + \sum_j \int d^3\vec{k} V(r) u_{0j}(r) = E \sum_j \int d^3k c_j(k) e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{0j}(r) \quad \Big| \times e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{0j}(r) \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

Сейчас мы будем использовать одно допущение, что в разложении

$$|k|, |q| \ll \frac{\pi}{a} \quad (2.2.7)$$

и в силу этого

$$\int e^{i(\vec{k}-\vec{q})\vec{r}} u_q^*(r) u_k(r) d^3\vec{r} = \int e^{i(\vec{k}-\vec{q})\vec{r}} \delta_{ik} d^3\vec{r} \quad (2.2.8)$$

С другой стороны, интеграл от экспоненты тоже даст дельта-функцию, и тогда

$$\begin{aligned} E_k \delta_{ij} \delta(\vec{k} - \vec{q}) + \delta(\vec{k} - \vec{q}) \sum_j \langle u_{0i} | H_k | u_{0j} \rangle + \delta_{ij} \int d^3\vec{r} c_j(k) e^{i(\vec{k}-\vec{q})\vec{r}} V(\vec{r}) = \\ = E \delta_{ij} \delta(\vec{k} - \vec{q}) + C_i(q) \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

Первые два слагаемых представляют собой

$$H_{ij}(\vec{k}) c_j(k) \delta(\vec{k} - \vec{q}) + \int c_i(k) \underbrace{V_k(\vec{k} - \vec{q})}_{f.o.} d^3\vec{k} = E c_i(q) \quad (2.2.10)$$

$$H_{ij}(q) c_j(q) + \int d^3\vec{k} c_j(k) V_k(\vec{k} - \vec{q}) = E c_i(q) \quad (2.2.11)$$

Здесь есть свёртка образов, если перейти к прообразам, получим их произведение.

$$H_{ij}(-i\nabla) \chi_j + V(r) \chi_i = E \chi_j \quad (2.2.12)$$

Из-за этого  $k-p$  метод еще называют методом огибающих. Огибающие здесь – это функции  $\chi$ .

## 2.3 Состояние примесей в полупроводниках

Есть доноры, а есть акцепторы: акцептор забирает электрон из валентной зоны и заряжается отрицательно, донор отдаёт электрон проводимости и при этом заряжается положительно.

Если в решётке есть заряженные кулоновские центры, то они взаимодействуют с электронами и дырками и создают дополнительный потенциал решётки  $V(r)$ . Потенциал, который создаёт примесь, отличается от точечного заряда.

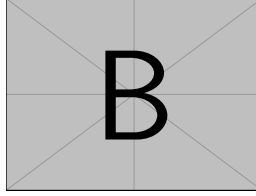


Рис. 9: Потенциал

Вблизи ионов потенциал  $\sim \frac{ze^2}{r}$ , а вдали потенциал точечного заряда с диэлектрической проницаемостью кристалла  $\sim \frac{ze^2}{\chi r}$ . Посередине ничего не знаем.

Для описания можно использовать метод приближения эффективной массы. Давайте найдём состояния доноров в арсениде галлия. Там простая изотропная зона, и дно зоны проводимости находится в  $\gamma$ -точке.

В силу применяемого метода,  $\chi$  медленно меняется на масштабе решётки. Вклад будут давать далёкие по масштабам решётки ионы примеси. Поэтому мы аппроксимируем

$$V(r) \approx -\frac{e^2}{\chi r} \quad (2.3.1)$$

и получаем уравнение Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m^*} \chi(r) - \frac{e^2}{\chi r} \chi(r) = (E - E_c) \chi(r). \quad (2.3.2)$$

Собственные значения представляют собой

$$E = E_c - \frac{E_D}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.3.3)$$

где  $E_D = 13.6 \text{ эВ} \cdot \frac{m^*}{m_0} \frac{1}{\chi^2} \approx 6 \text{ мЭВ}$ .

Нетрудно сосчитать масштаб локализации

$$a = 0.52 \frac{m_0}{m^*} \chi \approx 90A, \quad (2.3.4)$$

что много больше размеров решетки, которая для арсенида галлия 5 ангстрем.

Недостаток подхода заключается в том, что энергия электрона на примеси, как получилось, не зависит от её химического типа, а зависит

только от заряда.

Можно ввести понятие мелкой примеси, когда модуль

$$|E_A - E_c| \ll E_g, \quad |E_A - E_v| \ll E_g. \quad (2.3.5)$$

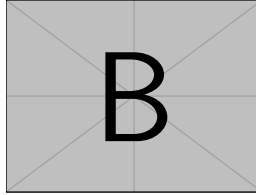


Рис. 10: Уровни энергии и ширина запрещенной зоны

Как показали эксперименты, в реальности зависимость от химического типа примеси есть.

Такое различие в энергии в зависимости от химического элемента называется *химическим сдвигом*. Как его описывать, большой вопрос и является открытым вопросом в науке. Можно увидеть, что чем больше атом акцептора, тем больше оказывается энергия связи примеси. Это связано с тем, что ион акцептора деформирует решётку. Если мы встроили большой атом, решётка растягивается и создается дополнительная отрицательная плотность заряда относительно потенциала решетки – увеличивается энергия ионизации. Наоборот, если сжимаем, сжимается.

## 3 Статистика электронов и дырок в полупроводниках

### 3.1 Заполнение зон в полупроводниках

Будем считать, что законы дисперсии электронов и дырок простые и изотропные:

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}, \quad E = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*}. \quad (3.1.1)$$

Здесь  $m_p^*$  – эффективная масса тяжёлых дырок. Такое описание модельное.

Хотим понять, отчего зависит концентрация свободных электронов и дырок в полупроводниках.

$$N = \sum_k f(k) \quad (3.1.2)$$

В равновесии функция распределения для электронов подчиняется распределению Ферми-Дирака

$$f(k) = \frac{1}{\exp\left\{\frac{E(k)-\mu}{T}\right\} + 1} \quad (3.1.3)$$

Можно перейти от суммирования к интегрированию. Для этого нужно умножить на фазовый объём пространства и разделить на объём, приходящийся на одно состояние

$$N = \sum_k \frac{d^3\vec{k}}{V_k} f(\vec{k}) \quad (3.1.4)$$

Тогда, учитывая вырождение по спину,

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} f(\vec{k}) \quad (3.1.5)$$

Концентрация электронов в зоне проводимости

$$n_e = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} f(\vec{k}) \quad (3.1.6)$$

Аналогично концентрация дырок

$$n_p = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} [1 - f(\vec{k})] \quad (3.1.7)$$

**Плотность состояний в зоне.** Это число состояний, приходящееся на единичный интервал энергий  $g(\mathcal{E})$ .

$$N_{\mathcal{E}} = \int g(\mathcal{E}) d\mathcal{E}, \quad (3.1.8)$$



с другой стороны

$$N_{\mathcal{E}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \int \delta(\mathcal{E}(k) - \mathcal{E}) d\mathcal{E} = \\ = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathcal{E} \int \delta(\mathcal{E}(k) - \mathcal{E}) d^3\vec{k} \quad (3.1.9)$$

отсюда сразу

$$g(\mathcal{E}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \delta(\mathcal{E}(k) - \mathcal{E}) d^3\vec{k} \quad (3.1.10)$$

Если, например,  $\mathcal{E} = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$ , то

$$g(\mathcal{E}) \sim \sqrt{\mathcal{E}} \quad (3.1.11)$$

## 3.2 Пропущенная лекция

## 3.3 Центры примесей

В каждом полупроводнике какая-то примесь является доминирующей: её больше, чем другой. Очень трудно попасть так, чтобы доноров и акцепторов было поровну. Если доноров хоть чуть-чуть больше, то при низкой температуре его проводимость будет определяться именно донорами, и носители будут поставляться именно с донорных уровней.

При низкой температуре проводимость всегда примесная: исключение – узкозонные проводники.

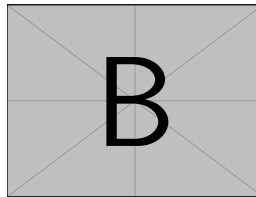


Рис. 11:  $\mu(T)$

Чем мы ранее пренебрегли? Отбросили зависимость ширины запрещённой зоны от температуры. Для узкозонных полупроводников этим пренебрегать нельзя.

Второе – считали все центры однозарядными. Что делать, если у нас центры могут быть многозарядными? Следует записать уравнение электронейтральности

$$n + N_A^- = p + \rho_D^+ \quad (3.3.1)$$

Для нахождения запишем статсумму

$$\begin{aligned} z &= \sum_{n=0}^2 \exp\left\{-\frac{(\mathcal{E}_D(n) - \mu)n}{T}\right\} = \\ &= 1 + g_D^{(1)} \exp\left\{\frac{-E_1 - \mu}{T}\right\} + g_D^{(2)} \exp\left\{2\frac{\mu - E_2}{T}\right\} \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

Состояние акцептора одночастичное будет 4-кратно вырождено, а двухчастичное – 6-кратно. Проверьте это утверждение.

Можно найти термодинамический потенциал и число частиц на центре:

$$\Omega = -T \ln z, \quad \bar{n} = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \quad (3.3.3)$$

$$\rho_D^+ = (2 - \bar{n})N_D \quad (3.3.4)$$

Нетрудно видеть, что

$$\bar{n} = \frac{g_D^{(1)} e^{\frac{\mu - E_1}{T}} + 2g_D^{(2)} e^{\frac{2(\mu - E_1)}{T}}}{1 + g_D^{(1)} e^{\frac{\mu - E_1}{T}} + g_D^{(2)} e^{\frac{2(\mu - E_1)}{T}}} \quad (3.3.5)$$

Уравнение электронейтральности получается таким, что его не решить аналитически даже с упрощениями.

Ту же процедуру можно развернуть для любого многозарядного центра.

## 4 Процессы рассеяния

Давайте рассмотрим, как система электронов в твёрдом теле приходит к состоянию равновесия с помощью процессов рассеяния носителей (переходов электронов между состояниями в зонах в идеальной кристаллической решётке).

Это нужно для изучения динамики макро-характеристик: тока, сред-

ней энергии частиц.

$$\vec{j} = e \sum_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k}) \cdot f(\vec{k}) \quad (4.0.1)$$

Средняя энергия

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k}) \cdot f(\vec{k}) \quad (4.0.2)$$

И вообще любое среднее

$$\langle A \rangle = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) \cdot f(\vec{k}) \quad (4.0.3)$$

Нужно вывести систему из равновесия:

$$f(\vec{k}) = f_T + \delta f(t) \quad (4.0.4)$$

тогда

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) \frac{\partial \delta f}{\partial t} \quad (4.0.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta f}{\partial t} = & - \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} \delta f(\vec{k}) \cdot (1 - \delta f(\vec{k}')) + \\ & + \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k}' \rightarrow \vec{k}} \delta f(\vec{k}') \cdot (1 - \delta f(\vec{k})) = \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} \delta f(\vec{k}') \end{aligned} \quad (4.0.6)$$

Используем приложение, что  $\delta f \ll 1$ .

Получим

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) \sum_{\vec{k}'} \left( W_{\vec{k}' \rightarrow \vec{k}} \delta f(\vec{k}') - W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} \delta f(\vec{k}) \right) \quad (4.0.7)$$

Переобозначим первое слагаемое:

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = \sum_{\vec{k}} \delta f(\vec{k}) \sum_{\vec{k}'} \left( A(\vec{k}') - A(\vec{k}) \right) \cdot W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \sum_{\vec{k}} R(\vec{k}) \delta f(\vec{k}) \quad (4.0.8)$$

Здесь  $R(\vec{k})$  есть темп релаксации величины  $A$ , и он равен

$$R(\vec{k}') = \sum_{\vec{k}} \left( A(\vec{k}') - A(\vec{k}) \right) \cdot W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'}, \quad (4.0.9)$$

Если  $A$  – энергия, то

$$R(\vec{k}) = Q(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}'} \Delta \mathcal{E}(\vec{k}, \vec{k}') W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'}, \quad (4.0.10)$$

Можно ввести время релаксации энергии

$$Q(\vec{k}) = \frac{\mathcal{E}(\vec{k}) - \mathcal{E}^*}{\tau_{\mathcal{E}}(\vec{k})}, \quad (4.0.11)$$

тогда

$$\frac{1}{\tau_{\mathcal{E}}} = \sum_{\vec{k}'} \frac{\Delta \mathcal{E}}{\mathcal{E}(\vec{k}') - \mathcal{E}^*} W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'}, \quad (4.0.12)$$

Время жизни в состоянии  $\vec{k}$  обозначают

$$\frac{1}{\tau_0(\vec{k})} = \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'}, \quad (4.0.13)$$

Теперь введём транспортное время рассеяния, или время релаксации импульса, когда  $A(\vec{k}) = \vec{k}$ :

$$\vec{R}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}'} (\vec{k}' - \vec{k}) W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'}, \quad (4.0.14)$$

При этом время релаксации вводится как

$$\vec{R}_{\vec{k}}(\vec{k}) = \frac{\vec{k}}{\tau_1(\vec{k})} \quad (4.0.15)$$

Это так может быть не всегда:  $\vec{R}$  не обязан быть сонаправлен с импульсом. Но есть такие ситуации, когда можно ввести такую скалярную характеристику, как темп релаксации импульса.

Можно выделить разные типы рассеяния: первый – квазиупругое.

Это значит, что изменение энергии частицы при рассеянии много меньше собственной энергии частицы  $\Delta\mathcal{E} \ll \mathcal{E}(\vec{k})$ . Например, это рассеяние на кулоновском центре: частица подлетела и улетела, а энергия у неё осталась прежней. Также рассеяние на акустических фононах, как правило, является квазиупругим.

Еще можно выделить малоугловое рассеяние: когда изменение импульса при рассеянии  $|\Delta\vec{k}| \ll |\vec{k}|$ . Любое малоугловое рассеяние является квазиупругим, а наоборот - необязательно: пример - рассеяние на примесях. Подлетел и улетел в противоположном направлении, изменение импульса в два раза больше импульса: а рассеяние квазиупругое.

Итак, темп релаксации импульса можно ввести при квазиупругих рассеяниях.

Докажем это.

$$R(\vec{k}) = P(\vec{k}) = \sum (\vec{k}' - \vec{k}) W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'}, \quad (4.0.16)$$

В простой изотропной зоне в случае квазиупругого рассеяния

$$W_{\vec{k}' \rightarrow \vec{k}} = W_{\vec{k}' \rightarrow \vec{k}}(k, \Theta) \quad (4.0.17)$$

Направим ось  $z$  параллельно вектору  $\vec{k}$ , тогда координаты вектора  $\vec{k}'$

$$\vec{k}' = \begin{pmatrix} k \sin \theta \cos \varphi \\ k \sin \theta \sin \varphi \\ k \cos \varphi \end{pmatrix} \quad (4.0.18)$$

Тогда покомпонентно

$$P(k) = \vec{z}_0 \sum (k \cos \theta - k) W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} + \vec{x}_0 \sum k \sin \theta \sin \varphi W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} + \vec{y}_0 \sum k \sin \theta \cos \varphi W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \vec{k} \sum (\cos \theta - 1) W_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'}, \quad (4.0.19)$$

здесь везде суммирование ведётся по  $\vec{k}'$ . Отсюда в случае квазиупругого рассеяния

$$\frac{1}{\tau_1} = \sum_{\vec{k}'} (1 - \cos \theta) W_{\vec{k} - \vec{k}'}, \quad (4.0.20)$$

Итак, есть три времени: время жизни, время релаксации энергии и время релаксации импульса.

Что есть рассеяние? Это переход между состояниями в зоне под дей-

ствием возмущения. Идеальную кристаллическую решётку нарушают примеси и дефекты. Их потенциал – возмущающий для электрона в зоне. Во-вторых, идеальный кристаллический потенциал возмущён смещением атомов – фононами.

Отсюда первый тип рассеяния – на примесях (обычно на заряженных, так как на нейтральных потенциал короткодействующий), и второй – на фононах. Фононы бывают акустическими и оптическими.

Третий тип рассеяния – электрон-электронное.