

Тема 4: Кінетичні явища в напівпровідниках.

§ 1. Основні модельні уявлення.

Раніше ми вивчали поведінку напівпровідників в умові рівноваги. Стан термодинамічної рівноваги – це такий стан системи до якого вона при незмінних зовнішніх умовах спонтанно приходить із часом і який потім зберігається невизначено довгий час, поки зовнішні умови незмінні. У стані термодинамічної рівноваги температура в різних шарах системи та сама; вона однакова для різних підсистем складної системи, більш того тільки в стані термодинамічної рівноваги має сенс поняття “температура”: усі тіла при тепловій рівновазі мають температуру; крім того немає градієнту n (і p), тобто усі її частини рівномірно перемішані й усі макроскопічні потоки (струм, перенос тепла) зникнули завдяки вирівнюванню тиску. Час переходу системи від вихідного нерівноважного стану до рівноважного зветься часом релаксації. Усі наступні теми (глави) зв'язані з вивченням поведінки електронів і дірок у нерівноважних умовах. Важливу частину цього кола питань складають ряд явищ, що виникають у твердому тілі при наявності електричних, теплових і магнітних полів, $[\nabla T, \nabla \phi, \nabla E_F, B]$.

Фізичні явища (нерівноважні процеси), обумовлені рухом носіїв заряду під дією зовнішніх і внутрішніх полів або різниці температур або градієнту концентрації носіїв заряду, називаються кінетичними явищами, або явищами переносу.

До них відносяться електропровідність, теплопровідність, гальваноманітні, термомагнітні, термоелектричні явища.

Для якісного опису кінетичних явищ достатньо використати найпростіші модельні уявлення про рух частинок під дією зовнішніх сил (як це буде зроблено при елементарному розрахунку електропровідності і рухливості). Однак, щоб одержати правильні кількісні вирази для величин, що характеризують кінетичні явища, необхідно використовувати більш загальні методи їхнього опису, які враховують різну роль носіїв заряду, що знаходяться в різних станах. Таким, досить потужним, методом теоретичного дослідження кінетичних ефектів є метод кінетичного рівняння Больцмана, що описує зміну стану частинок у результаті дії різних чинників.

Треба ще раз підкреслити, що при наявності зовнішніх сил $[\nabla T, \nabla \phi, \nabla E_F, B]$ носіїв заряду знаходяться в нерівноважних умовах і, природно, їхній стан описується іншою (відмінною від рівноважної f_0) нерівноважною f , яка залежить як від енергії частинок (або від \vec{k}), так і від координати \vec{r} і часу t : $f = f(\vec{k}, \vec{r}, t)$, (фактично (формально, математично) – зміна функції розподілу).

При цьому, у випадку не дуже сильних полів, передбачається, що концентрація носіїв заряду залишається рівноважною (тобто описується f_0) або майже рівноважною (хоча вона може і змінюватися від точки до точки при наявності ∇T) таким чином, що її зміни не накладають помітний внесок на картину явищ. (Але хоча n -рівноважна, її розподіл по станах – нерівноважний). Випадок сильних полів, коли концентрація носіїв заряду залежить від зовнішнього поля (і таким чином уже не описується f_0), буде розглянуто окремо в розділі "Явища в сильних електричних полях". Перш ніж перейти до опису конкретних кінетичних ефектів, розглянемо коротко загальні основні модельні уявлення (основні поняття), які використовуються для опису цих ефектів.

У стані рівноваги усі вільні електрони беруть участь у хаотичному тепловому русі. Так як функція розподілу симетрична (по v_x), то кількість електронів, що рухаються в протилежних напрямках, завжди однакова, тому макроскопічні електричні струми

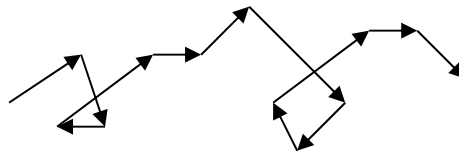
відсутні. Більш того, ця рівновага детальна: не тільки загальне число електронів, що рухаються "туди й назад", однакове, але ця рівність дотримується для будь-якої даної енергії і швидкості, тому відсутні не тільки електричні, але і теплові потоки (тобто в середньому електрон нікуди не рухається). Тобто у рівновазі:

$$\vec{v}_x = \vec{v}_y = \vec{v}_z = 0; \quad j_x = j_y = j_z = 0; \quad q_x = q_y = q_z = 0.$$

Якщо кристал знаходиться під дією зовнішнього, наприклад електричного поля ε_x , то кожний вільний електрон під впливом сили $F_x = -q \cdot \varepsilon_x$, що діє на нього, одержує прискорення $a_x = -\frac{q \cdot \varepsilon_x}{m^*}$ і збільшення швидкості (спрямовану складової швидкості)

$$\Delta v_x = \frac{q \cdot \varepsilon_x}{m^*} \Delta t = \frac{q \cdot \Delta t}{m^*} \varepsilon_x.$$

Якби в кристалі були відсутні всякі порушення внутрішнього періодичного поля, то v_x електрону безперешкодно зростала б у часі і такий ідеальний кристал володів би R , або безкінечною σ . (Як відомо, у "ідеальному" кристалі електрон рухається як вільна частка з масою m^*). Проте реальні кристали мають кінцеву електропровідність. Це обумовлено тим, що в реальному кристалі завжди існують порушення періодичності – дефекти, що спотворюють періодичне поле (фонони, атоми та іони домішки, вакансії, дислокації і т.д.) і траєкторія електронів, що рухаються, (і протонів), що потрапляють у сферу дії таких спотворень, скривлюється, тобто вони розсіюються, втрачаючи при цьому (частково або цілком) отриману в полі енергію і спрямовану складову швидкості. У результаті електрон (протон) у кристалі рухається по складній траєкторії, що змінюється після кожного акту розсіювання. При цьому все ж має місце і спрямоване переміщення носіїв заряду так (див. мал.).



Таким чином, на носії заряду, з одного боку, діє зовнішня сила, що упорядковує рух, з іншого боку – розсіювання (процеси зіткнень), що прагне повернути до розупорядкованого хаотичного (рівноважного) руху. У результаті дії цих двох протилежно діючих сил устанолюється рух носіїв заряду в кристалі (у напрямку дії зовнішньої сили) із середньою швидкістю \bar{v} , яка пропорційна ε :

$$\bar{v} = \mu \cdot \varepsilon,$$

де μ - середня швидкість носіїв заряду в полі $\varepsilon = 1$ (одиничної напруженості), так звана рухливість носіїв заряду.

\bar{v} , μ і, отже, питома провідність

$$\sigma = q \cdot n \cdot \mu_n$$

залежать від числа і характеру зіткнень (актів розсіювання).

Природно припустити (і це так і є): що й інші так звані кінетичні коефіцієнти (коефіцієнти пропорційності між кількісною характеристикою зовнішнього впливу і результуючим кількісним виразом виникаючого кінетичного ефекту, наприклад, α у термо е.р.с.

$$\varepsilon_T = \alpha \cdot \Delta T$$

R_x в ефекті Холу $\varepsilon_x = RjB$ і т.д.) визначаються процесами розсіювання.

Однією з основних кількісних характеристик процесів розсіювання є довжина вільного пробігу l (середня відстань, яку проходить носій заряду між двома зіткненнями) або, зв'язаний з нею (з l), середній час між зіткненнями (середній час вільного пробігу) τ , причому

$$\tau = \frac{l}{v},$$

де v - швидкість електрону.

Час τ називають також часом релаксації, тому що він характеризує затухання, наприклад, струму при виключенні зовнішньої сили діючої на кристал. Далі поняття τ буде весь час уточнюватися і роз'яснюватися.

Ще один параметр, який вводиться для кількісної оцінки процесу розсіювання, - ефективний переріз розсіювання σ .

Нехай n вільних електронів із тепловою швидкістю v_T рухаються в даному напрямку. Тоді $n v_T$ - густина потоку електронів, тобто кількість електронів, які проходять за одиницю часу через одиничну площадку зразку, перпендикулярну напрямку v_T . Нехай на їхньому шляху - N однакових центрів розсіювання, кожний із яких характеризується σ .

σ - це простір навколо центру розсіювання, в області якого має місце розсіювання електронів. Кількість електронів n_1 , що розсіюються за одиницю часу:

$$n_1 = \sigma \cdot N \cdot v_T.$$

Якщо W - ймовірність розсіювання однієї частинки за одиницю часу (або число зіткнень за одиницю часу), то

$$n_1 = W \cdot n$$

і

$$\sigma = \frac{n_1 / N}{n \cdot v_T} = \frac{W}{N \cdot v_T} \quad \dots \quad (1)$$

тобто σ - відношення числа електронів, виділених із пучка в результаті розсіювання (розсіяних електронів) на однім центрі за одиницю часу, до густини падаючого пучка. $[\sigma] = [M^2]$

З (1) визначимо W :

$$W = \sigma \cdot N \cdot v_T \quad (2)$$

З іншого боку ймовірність зіткнення обернено пропорційна часу вільного пробігу:

$$W = \frac{1}{\tau}$$

і тоді

$$\tau = \frac{1}{\sigma \cdot N \cdot v_T} = \frac{l}{v_T} \quad (3)$$

звідки

$$l = \frac{1}{\sigma \cdot N},$$

а

$$l^{-1} = \sigma \cdot N \quad (4)$$

(4) - ймовірність розсіювання на одиничному інтервалі шляху.

Якщо є декілька центрів розсіювання, то відповідно до теорії ймовірності повна ймовірність розсіювання за одиницю часу дорівнює сумі окремих ймовірностей розсіювання:

$$W = \sum_i W_i,$$

або

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i},$$

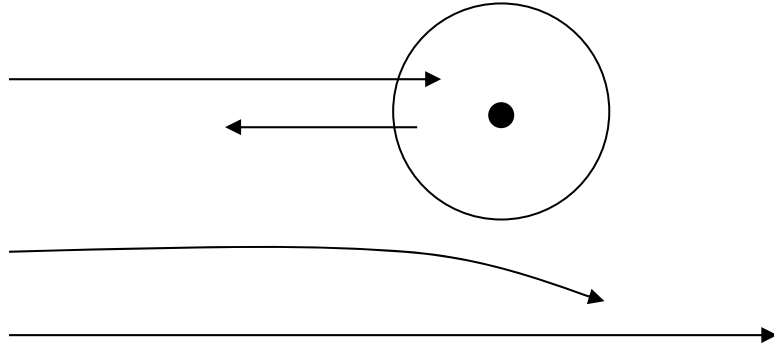
$$\tau = \left(\sum_i \tau_i^{-1} \right)^{-1}, \quad (5)$$

і

$$\frac{1}{l} = \sum_i l_i^{-1}.$$

Тобто повне τ і повна l завжди менше найменшого парціального τ_i і найменшої l_i .

Для кількісної оцінки за σ приймемо площадку, у межах котрої можлива взаємодія між носіями заряду і дефектом.



Для точкових дефектів – вакансії, міжвузлові атоми, атоми домішки заміщення – за σ можна прийняти площу квадрата зі стороною, рівною a , тобто

$$\sigma_A = (5 \cdot 10^{-8})^2 \approx 3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$$

і при

$$N_A = 10^{16} \text{ см}^{-3}$$

$$l_A = (3 \cdot 10^{-15} \cdot 10^{16})^{-1} \approx 3 \cdot 10^{-2} \text{ см} = 300 \text{ мкм}.$$

Для іона домішки вважають, що його діаметр у 10 разів більший, ніж в атома і

$$\sigma_I = (5 \cdot 10^{-8} \cdot 10)^2 \approx 3 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2,$$

при $N_I = 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $l_I = 3 \cdot 10^{-4} \text{ см} = 3 \text{ мкм}$

Для дислокації $\sigma \approx 5 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2$.

σ для теплових коливань визначається площею перерізу, яку займає атом, що коливається, якщо не враховувати перерізу самого атому. Амплітуда коливань – порядку $0,05 \text{ нм} = 5 \cdot 10^{-9} \text{ см}$, $\alpha = 10^{-8} \text{ см}$ (діаметр атома), то $\sigma_T = (d + r)^2 - d^2 \approx 2rd \approx 10^{-16} \text{ см}^2$ - значно менше, ніж для інших центрів розсіювання, але тому що число атомів, що коливаються, велике ($N_T = 10^{22} \text{ см}^{-3}$), то $l_T = 10^{-6} \text{ см} = 0,01 \text{ мкм}$.

Уже з цієї грубої оцінки ясно, що якщо T велике (число фононів велике), то розсіювання повинно переважати на теплових коливаннях. Як уже відзначалося, поняття σ і $\varepsilon(l)$, в міру вивчення кінетичних явищ і теорії розсіювання, будуть розширятися й уточнюватися.

Загалом, задача кількісного розгляду явищ переносу умовно може бути розбита на дві частини: перша полягає у знаходженні зв'язку кожного з кінетичних коефіцієнтів із часом релаксації τ (точніше в знаходженні виразу нерівноважної добавки до рівноважної f_0 , вираженої через τ); друга - у знаходженні виразу τ для різних механізмів розсіювання, тобто для різних видів центрів, що розсіюють. (Перша частина в теорії (у підручниках) називається "Теорія кінетичних явищ" або "Явища переносу", друга – "Теорія розсіювання носіїв заряду". Але цей розподіл умовний). Перша частина задачі вирішується за допомогою рівняння Больцмана.

§ 2. Кінетичне рівняння Больцмана.

У рівноважних умовах f_0 є функцією тільки E (при даній T), а так як

$$E = E(\vec{p}) \quad [\text{або } E(\vec{v}), E(\vec{k})],$$

то і

$$f_0 = f_0(\vec{p}) \quad (f_0(\vec{v}), f_0(\vec{k})).$$

У нерівноважних умовах у загальному випадку зовнішнє поле може бути функцією й \vec{r} і t . Тому, як уже відзначалося, нерівноважна функція розсіювання є функцією

$$\vec{p}(\vec{v}, \vec{k}), \vec{r} \text{ і } t:$$

$$f = f(\vec{p}, \vec{r}, t) = f(\vec{k}, \vec{r}, t).$$

Тобто вона

$$f(p_x, p_y, p_z; x, y, z; t) dp_x dp_y dp_z dx dy dz = f(\vec{p}, \vec{r}, t) d^3 p d^3 r$$

(або \vec{k} замість \vec{p}) дорівнює числу електронів у момент t у точці \vec{r} в об'ємі $d^3 r = dx dy dz$, з імпульсами (швидкостями, $k_{x,y,z}$), які лежать між p_i і $p_i + dp_i$ ($i = x, y, z$) [або v_i й $v_i + dv_i$; k_i і $k_i + dk_i$].

Такий опис електронів, коли одночасно задані їхні координати і імпульси, можливий тільки в тій мірі, у якій їхній рух підкоряється законам класичної механіки.

У шестивимірному фазовому просторі координат і імпульсів [$(\vec{p} - \vec{r})$ - просторі] елемент фазового об'єму

$$dV_\phi = dx dy dz dp_x dp_y dp_z = d^3 r d^3 p = \hbar^3 d^3 k d^3 r \quad (6)$$

$$(d^3 p = dp_x dp_y dp_z = \hbar^3 dk_x dk_y dk_z = \hbar^3 dk)$$

У dV_ϕ кристалу одиничного об'єму є dV_ϕ / \hbar^3 елементарних ячеек у кожній з яких може знаходитися не більш двох електронів. Тобто в елементі фазового об'єму dV_ϕ

міститься $2 \frac{dV_\phi}{\hbar^3}$ квантових станів і якщо $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ - ймовірність знаходження електронів у цих станах, то число електронів в dV_ϕ у момент часу t :

$$dn = 2 \frac{dV_\phi}{h^3} f(\vec{k}, \vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3k d^3r, \quad (7)$$

а повне число електронів у кристалі одиничного об'єму одержимо проінтегрувавши формулу (7) по фазовому об'єму:

$$n = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(V_\phi)} f(\vec{k}, \vec{r}, t) d^3k d^3r. \quad (8)$$

Тепер, якщо відома $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ можна обчислити, наприклад, густину струму в точці \vec{r} , у момент часу t , який буде (для кристалу одиничного об'єму) дорівнювати:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{q}{4\pi^3} \int_{(V_k)} \vec{v} f(\vec{k}, \vec{r}, t) d^3k. \quad (9)$$

Таким чином при розгляді кінетичних явищ необхідно знати нерівноважну f .

Виведемо рівняння, якому задовольняє $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$. Запишемо рівняння, що визначає зміну f в часі, тобто її повну похідну за часом:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(\vec{k}, \vec{r}, t) &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial k_x}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial k_x} + \frac{\partial k_y}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial k_y} + \frac{\partial k_z}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial k_z} + \frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial z} = \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} \cdot f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} \cdot f), \end{aligned} \quad (10)$$

де

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} \left(\frac{dx}{dt} \vec{i} + \frac{dy}{dt} \vec{j} + \frac{dz}{dt} \vec{k} \right) - \text{швидкість електрону};$$

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \hbar \left(\frac{\partial k_x}{\partial t} \vec{i} + \frac{\partial k_y}{\partial t} \vec{j} + \frac{\partial k_z}{\partial t} \vec{k} \right) - \text{узагальнена сила, що діє на носії заряду в кристалі};$$

$$\nabla_r = \text{grad}_r = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k};$$

$$\nabla_k = \text{grad}_k = \frac{\partial}{\partial k_x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial k_y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial k_z} \vec{k};$$

∇_r, ∇_k - оператори градієнту (∇ - оператор Гамільтона "набла") у просторі координат і k - просторі;

$\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ - одиничні вектори, спрямовані по осях координат.

Скалярний добуток в (10) можна розкрити таким способом:

$$(\vec{v} \cdot \nabla_r f) = v_x \frac{df}{dx} + v_y \frac{df}{dy} + v_z \frac{df}{dz};$$

$$(\vec{F} \cdot \nabla_k \cdot f) = \left(\frac{dk_x}{dt} \cdot \frac{df}{dk_x} + \frac{dk_y}{dt} \cdot \frac{df}{dk_y} + \frac{dk_z}{dt} \cdot \frac{df}{dk_z} \right).$$

Відповідно до відомої зі статфізики теореми Леувілля, функція розподілу (по станам) у замкнутій системі в часі зберігається постійною. (Це значить, що f являється такою функцією від \vec{p} і \vec{r} , що не змінюється при русі частинок (такі функції називають інтегралами руху). В іншому формулюванні теорема Леувілля стверджує, що при русі уздовж фазових траєкторій, фазовий об'єм залишається незмінним (зберігається число станів). Тому можна записати:

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad (11)$$

або

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = (\vec{v} \cdot \nabla_r f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{F} \cdot \nabla_k f). \quad (11^*)$$

Рівняння (11) показує, що зміна f з часом у кожній точці фазового простору (\vec{r}, \vec{k}) обумовлена рухом частинок у звичайному просторі й у k - просторі.

Узагальнена сила F в (10) і (11) визначається як зовнішніми макроскопічними полями, так і будь-якими порушеннями ґратки, що приводять до розсіювання носіїв заряду. Для більшості практичних випадків необхідно знати поведінку твердого тіла в результаті впливу зовнішніх полів. У цьому випадку всі сили, обумовлені будь-якими локальними порушеннями періодичного поля, є внутрішніми для даного кристалу, вони повинні бути виділені в особливий клас сил. Розділимо узагальнену силу F на два класи: F_i - зовнішні (породжувані зовнішніми полями) і внутрішні F_j (обумовлені розсіюванням). Тоді

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = (\vec{v} \cdot \nabla_r f) + \frac{1}{\hbar} (F_i \cdot \nabla_k f) + \frac{1}{\hbar} (F_j \cdot \nabla_k f) \quad (12)$$

Перший доданок у правій частині (12) $(\vec{v}_r \cdot \nabla_r \cdot f)$ визначає зміну кількості носіїв заряду при русі у фазовому просторі за рахунок дифузії носіїв заряду при наявності градієнту їхніх концентрацій (∇E_F) або градієнту температури (∇T) .

Другий доданок $\frac{1}{\hbar}(\vec{F}_i \nabla_k f)$ визначає зміну числа носіїв заряду при русі у фазовому просторі в результаті дії зовнішніх сил, обумовлених електричним і (або) магнітним полями.

Третій $\frac{1}{\hbar}(\vec{F}_j \nabla_k f)$ визначає зміну числа носіїв заряду при русі у фазовому просторі за рахунок зіткнень.

Позначимо

$$-\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{пол}} = (\vec{v} \nabla_r f) + \frac{1}{\hbar}(\vec{F}_i \nabla_k f) \quad (13)$$

$$-\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{см}} = \frac{1}{\hbar}(\vec{F}_j \nabla_k f). \quad (14)$$

Тоді (12) приймає вид :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{см}}. \quad (15)$$

Записане в такій формі, воно і являє собою кінетичне рівняння Больцмана.

$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол}}$ визначає швидкість зміни f в результаті безупинного руху носіїв заряду в \vec{r} - і \vec{k} - просторі (змінюється f внаслідок дифузії і дії зовнішніх сил, тобто переносу) і зветься польовим членом рівняння Больцмана.

$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{см}}$ визначає швидкість зміни f в результаті зіткнень (розсіювання) електронів (носіїв заряду) і називається інтегралом зіткнень (або співударів). Остання назва пов'язана з інтегральним зображенням $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{см}}$.

Якщо зовнішні поля F_i приводять до «повільної» зміни стану частинок, то внутрішні F_j можуть привести (і звичайно приводять) до різких змін стану за короткий час, протягом якого електрон проходить малу область локального збудження. Дійсно, якщо область дії локального збудження має розміри в декілька періодів ґратки, тобто порядку 10^{-7} см, а швидкість частки $\sim 10^7$ см/сек ($\sim v_T$), то час взаємодії з центром розсіювання $\sim \frac{10^{-7}}{10^7} \approx 10^{-14}$ сек. Ця дуже короткочасна взаємодія приводить до значної зміни $\vec{v}(\vec{p}, \vec{k})$ (у той час як координата не випробовує різкої зміни), що рівносильно удару у механіці, тому цю взаємодію називають зіткненням або співударом. У зв'язку з тим, що зіткнення приводять до зміни числа частинок, що мають спрямований рух, процеси зіткнень називають також процесами розсіювання.

Нехай у результаті зіткнень частинки переходять із станів (\vec{r}, \vec{k}) у стан (\vec{r}', \vec{k}') . Так як у результаті зіткнення координата не має різкої зміни, то ймовірність такого переходу не

буде залежати від \vec{r} і \vec{r}' . Нехай ймовірність такого переходу в одиницю часу дорівнює $W(\vec{k}, \vec{k}')$.

Візьмемо два елементарних об'єми d^3k і d^3k' навколо точок \vec{k} і \vec{k}' . Число зайнятих станів у цих об'ємах дорівнює відповідно

$$f(\vec{r}, \vec{k}, t) \frac{d^3k}{4\pi^3} \text{ і } f(\vec{r}, \vec{k}', t) \frac{d^3k'}{4\pi^3},$$

а число вільних

$$\left[1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)\right] \frac{d^3k}{4\pi^3} \text{ і } \left[1 - f(\vec{r}, \vec{k}', t)\right] \frac{d^3k'}{4\pi^3}.$$

У результаті зіткнень електрони переходять з d^3k в d^3k' і з d^3k' в d^3k . Число переходів буде визначаться не тільки $W(\vec{k}, \vec{k}')$, а й числом зайнятих вихідних станів і вільних кінцевих станів. Тому, повна зміна числа електронів в елементі фазового об'єму

$$dV_\phi = d^3r \cdot d^3k$$

в результаті прямих і зворотних переходів за час dt матиме величину:

$$\begin{aligned} & -W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot f(\vec{r}, \vec{k}, t) \frac{d^3k}{4\pi^3} \left[1 - f(\vec{r}, \vec{k}', t)\right] \frac{d^3k'}{4\pi^3} \cdot d^3r dt + \\ & + W(\vec{k}', \vec{k}) \cdot f(\vec{r}, \vec{k}', t) \frac{d^3k'}{4\pi^3} \left[1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)\right] \frac{d^3k}{4\pi^3} d^3r dt \end{aligned} \quad (16)$$

Перший доданок визначає зменшення числа частинок в елементі dV_ϕ за час dt у результаті прямих переходів із стану \vec{k} в стан \vec{k}' (з ймовірністю $W(\vec{k}, \vec{k}')$), другий – збільшення числа часток у $dV_\phi = d^3k \cdot d^3r$ за dt в результаті зворотних переходів з \vec{k}' в \vec{k} .

Повну зміну числа зайнятих станів за час dt в елементі dV_ϕ можна визначити, якщо врахувати всі можливі \vec{k}' , тобто проінтегрувавши (16) по всій області зміни \vec{k}' , тобто по об'єму зони Бріллюена $V_B^{(k)}$:

$$\frac{d^3k}{4\pi^3} \cdot d^3r \cdot dt \int_{V_B^{(k)}} \left\{ W(\vec{k}', \vec{k}) \cdot f(\vec{k}') \left[1 - f(\vec{k})\right] - W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot f(\vec{k}) \cdot \left[1 - f(\vec{k}')\right] \right\} \frac{d^3k'}{4\pi^3} \quad (17)$$

(В (17) для стислості замість $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ записана $f(\vec{k})$ і замість $f(\vec{r}, \vec{k}', t)$ - $f(\vec{k}')$).

З іншого боку зміну числа зайнятих станів у dV_ϕ за час dt у результаті зіткнень можна представити у вигляді:

$$\left[f(\vec{r}, \vec{k}, t + dt) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) \right] \frac{d^3 k}{4\pi^3} \cdot d^3 r = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cm} \cdot \frac{d^3 k}{4\pi^3} \cdot d^3 r \cdot dt \quad (18)$$

$\left[f(x + dx, y) - f(x, y) = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \Big|_{y=const} \cdot dx \right]$ - визначення часткової похідної із функції багатьох змінних.

Тоді, після скорочення на $\frac{d^3 k}{4\pi^3} \cdot d^3 r \cdot dt$ одержимо з (17), (18) і (14):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cm} = -\frac{1}{\hbar} (\vec{F}_j \cdot \nabla_k f) = \int_{V_B^{(k)}} \left\{ W(\vec{k}', \vec{k}) \cdot f(\vec{k}') [1 - f(\vec{k})] - W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot f(\vec{k}) \cdot [1 - f(\vec{k}')] \right\} \cdot \frac{d^3 k'}{4\pi^3}$$

У випадку коли $W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k})$ (із принципу мікроскопічної оборотності ймовірності прямих і обернених переходів):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cm} = \int_{V_B^{(k)}} W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot [f(\vec{r}, \vec{k}', t) - f(\vec{r}, \vec{k}, t)] \cdot \frac{d^3 k'}{4\pi^3} \quad (19)$$

З урахуванням (13), (15) і (19), одержимо

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) = -(\nu \cdot \nabla_r f) - \frac{1}{\hbar} (\vec{F}_j \cdot \nabla_k f) + \int_{V_B^{(k)}} W(\vec{k}', \vec{k}) \cdot [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] \cdot \frac{d^3 k'}{4\pi^3} \quad (20)$$

(20) - кінетичне рівняння Больцмана (у явному вигляді). Це рівняння є інтегрально-диференціальним відносно $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$. Його розв'язок в загальному вигляді є дуже складною задачею і цей розв'язок не отримано.

Якщо величини, що визначають явища переносу ($j, \nabla T, E$ і т.д.) не залежать від часу, то процес переносу називається стаціонарним. Ми будемо вивчати стаціонарні явища. У цьому випадку f явно не залежить від t (тільки через \vec{r} і \vec{k}) і $df/dt=0$. Тоді з (20) і (15)

$$(\vec{\nu} \cdot \nabla_r f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{F}_j \cdot \nabla_k f) = \int_{V_B^{(k)}} W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] \cdot \frac{d^3 k'}{4\pi^3}$$

або

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{пол} = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cm} \quad (21)$$

З (21) випливає, що в стаціонарному стані зміни f , обумовлені зовнішніми полями і рухом частинок, компенсуються зіткненнями носіїв заряду із дефектами ґратки. Якщо $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{пол} \neq - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cm}$, то f змінюється з t в той або інший бік, в залежності від того який процес переважає.

Умови застосування кінетичного рівняння Больцмана:

- 1) зовнішнє поле не повинно змінювати спектр енергії електронів у кристалі (тобто коли стають істотними квантові ефекти). Це накладає обмеження на розміри полів.
- 2) Рівняння (20) і (21) – квазікласичне, воно не застосовується до процесів малої тривалості, що відбуваються в малих об'ємах, тому що це приводить до великої невизначеності в \vec{E} і \vec{k} . (ℓ повинно бути менше \AA де Бройля або $m v^2 < \frac{h}{\tau}$).

§ 3. Наближення часу релаксації.

Для розв'язку (20) або (21) потрібно знати інтеграл зіткнень, явний вид якого досить складний (див. (19)) і розв'язок (20) або (21) у загальному виді дуже складний, але він значно спрощується для того випадку, коли можна ввести так званий час релаксації τ .

Припустимо, що в деякий момент $t = 0$ польовий член обертається в нуль (виключаються поля): $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{пол.}} = 0$. Тоді з (15) випливає, що зміна f буде відбуватися тільки за рахунок зіткнень:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{см.}}$$

У момент виключення поля система знаходилася в стаціонарному нерівноважному стані, після виключення поля процеси розсіювання повинні привести систему частинок у рівноважний стан, що характеризується $f_0(\vec{r}, \vec{k}) [f_0(\vec{k})]$; іншими словами, розсіювання відновлює порушений полями стан рівноваги.

Найпростіше припущення щодо процесу відновлення рівноваги (релаксації) полягає в тому, що швидкість відновлення пропорційна розміру відхилення $[f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k})]$ від рівноваги, тобто

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{см.}} = -\frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} = -\frac{f_1(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\tau(\vec{k})} \quad (22)$$

де f_1 – нерівноважна добавка до рівноважної функції розподілу (або різниця $f - f_0$), причому $f_1 \ll f_0$;

$\frac{1}{\tau(\vec{k})}$ – коефіцієнт пропорційності, що узагалі-то залежить від \vec{r} і \vec{k} , але тому що

надалі для нас важлива залежність від \vec{k} , то $\tau(\vec{k}) = \tau(E(\vec{k}))$.

Рівняння (22) розв'язується елементарно:

$$\begin{cases} f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k}) = [f(\vec{r}, \vec{k}, 0) - f_0(\vec{r}, \vec{k})] e^{-t/\tau(\vec{k})} \\ f_1(\vec{k}) = f_1(\vec{k})|_{t=0} e^{-t/\tau} \end{cases} \quad (23)$$

З (23) випливає, що $\tau(\vec{k})$ показує, наскільки швидко відновлюється рівновага, порушена зовнішніми полями, тому вона зветься часом релаксації. Іншими словами τ - час впродвж якого f_1 (або $f - f_0$) зменшується в e раз після виключення полів [після виключення збудження ($f - f_0$) зменшується по *exp* - закону з постійної часу τ , див. (23)]. Так як ($f - f_0$) вважається малим, то τ по суті є середній час існування нерівноважного стану після виключення збудження (або середній час існування нерівноважного розподілу).

Так як встановлення рівноваги відбувається в результаті зіткнень і при цьому досить декількох зіткнень для відновлення рівноваги, то час релаксації по порядку величини повинен бути рівним середньому часу вільного пробігу або середньому часу між зіткненнями. (Звичайно вважають, що вони рівні). Тому можна вважати, що ℓ (середня довжина вільного пробігу) визначається \vec{v} і $\tau(\vec{k})$.

Подальше припущення, необхідне для розв'язку рівняння Больцмана, полягає в тому що $\tau(\vec{k})$ є однозначною характеристикою процесів розсіювання як під час релаксації, так і при дії \vec{F}_i . Іншими словами $\tau(\vec{k})$ не залежить від зовнішніх полів. Тоді можна записати:

$$(\vec{v} \cdot \nabla_r \cdot f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{F}_i \cdot \nabla_k \cdot f) = - \frac{f(\vec{k}, \vec{r}) - f_0(\vec{k}, \vec{r})}{\tau(\vec{k})} \quad (24)$$

(24) – стаціонарне рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації.

Якщо відомий явний вид $\tau(\vec{k})$ (цю задачу вирішує теорія розсіювання носіїв заряду), то задавши для кожного конкретного зовнішнього впливу \vec{F}_i , можна розв'язати рівняння (24) (знайти f або f_1) і одержати вирази для різних кінематичних коефіцієнтів.

Прикладений зовнішній вплив	Сила \vec{F}_i в рівнянні Больцмана	Кінетичний ефект
$\vec{\varepsilon}$	$q \vec{\varepsilon}$	Електропровідність, (σ)
$\vec{\varepsilon}, \vec{B}$	$q(\vec{\varepsilon} + [\vec{v}, \vec{B}])$	Ефект Холу, (R_x)
∇T	$-q \nabla \left[\varphi - \frac{E_F}{q} \right]$	Термо е.р.с., (α)
∇T	$-q \nabla \left[\varphi - \frac{E_F}{q} \right]$	Теплопровідність, (κ)
$\nabla T, \vec{B}$	$q \left\{ -\nabla \left(\varphi - \frac{E_F}{q} \right) + [\vec{v}, \vec{B}] \right\}$	Ефект Нернета-Еттинсгаузена

Наближення часу релаксації обґрунтовано досить строго лише якщо:

1) зіткнення часток пружні, і 2) час розсіювання залежить тільки від кута розсіювання.

§ 4. Елементарний підрахунок електропровідності і рухливості.

Електропровідність – явище переносу носіїв заряду в електричному полі. На початку цієї теми ми зазначили, що в електричному полі носій заряду набуває прискорення $a_x = \frac{qE_x}{m^*}$ і спрямовану складову (дрейфову) швидкості $\Delta v_x = \frac{qE_x}{m^*} \cdot \Delta t$.

Відповідно до елементарної теорії електропровідності вважають, що після кожного чергового зіткнення носій заряду цілком утрачає придбану в полі дрейфову складову \vec{v} . Тоді кінцевий спрямований додаток до швидкості (дрейфова швидкість наприкінці довжини вільного пробігу)

$$v_{др.} = \Delta \bar{v}_{tx} = a_x \bar{\tau} = \frac{qE_x}{m^*} \bar{\tau}, \quad (25)$$

де $\bar{\tau}$ - середній час вільного пробігу (між двома зіткненнями), (середній час релаксації). Передбачається, що $\Delta \bar{v}_{др} \ll v_T$, $\bar{\tau}$ не залежить від E_x .

Початкова дрейфова швидкість $\Delta \bar{v}_{\Delta x} = 0$ і тоді середня швидкість у напрямку поля буде:

$$\bar{v}_x = \bar{v}_{др.} = \frac{\Delta \bar{v}_{tx} + \Delta \bar{v}_{0x}}{2} = \frac{g \bar{\tau}}{2m^*} E_x \quad (26)$$

Якщо число носіїв заряду у 1см^3 - n і усі вони рухаються зі швидкістю \vec{v}_x і кожний переносить заряд q , то густина струму

$$j_x = qn\bar{v}_x = \frac{q^2 n \bar{\tau}}{2m} \varepsilon_x \quad (27)$$

У цьому висновку при обчисленні \bar{v}_x ми відразу ж замінили час вільного пробігу його середнім значенням, ніяк це не обґрунтувавши. У дійсності τ може залежати від цілого ряду чинників (m^* , E , T , типу центрів, що розсіюють). Ми докладніше зупинимося на цьому нижче, а поки врахуємо просто статистичний розкид часу вільного пробігу (зіткнення r , і τ - випадкові розміри), тобто визначимо функцію розподілу часу вільного пробігу і з її допомогою обчислимо \bar{v}_x .

Зробимо найпростіше і найбільш природне допущення:

Ймовірність того, що електрон зштовхнеться (розсіється) протягом проміжку часу dt , пропорційна $\frac{dt}{\tau}$, де $\frac{1}{\tau}$ - поки невідомий параметр.

Ймовірність того, що електрон рухався протягом часу t без зіткнення позначимо $p(t)$. Тоді ймовірність того, що електрон пролетів час t без зіткнення, а потім відбувається зіткнення за час dt , буде дорівнювати добутку цих двох ймовірностей

$$d\omega(t) = p(t) \frac{dt}{\tau}$$

Але це $d\omega(t)$ і є зменшення $p(t)$ за час dt :

$$d\omega = -dp ;$$

отже

$$dp = -p \frac{dt}{\tau}$$

і

$$p = p_0 e^{-t/\tau}$$

$$f(t) = \frac{d\omega}{dt} = \frac{1}{\tau} p_0 e^{-t/\tau} .$$

Тоді

$$d\omega(t) = \frac{1}{\tau} p_0 e^{-t/\tau} dt .$$

З умови нормування

$$\int_0^{\infty} d\omega(t) = \int_0^{\infty} \frac{1}{\tau} p_0 e^{-t/\tau} dt = 1 ,$$

$$- p_0 e^{-t/\tau} \Big|_0^{\infty} = 1 ,$$

$$p_0 = 1 .$$

Отже, нормована функція розподілу часу вільного пробігу

$$f(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} \quad (28)$$

($p(t)$ можна було відразу одержати у вигляді $p(t) = e^{-t/\tau}$, якщо почати відлік із моменту після зіткнення, коли $p = 1$). Тепер

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} t \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} dt = \tau$$

$$\bar{v}_x = \int_0^{\infty} \frac{qE_x}{m^*} t \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} dt = \frac{qE_x}{m^*} \tau \quad (29)$$

$$j_x = qn\bar{v}_x = \frac{g^2 n \tau}{m^*} \varepsilon_x = \sigma \varepsilon_x$$

$$\sigma = qn\mu = qn \frac{q\tau}{m^*}$$

В такому способі двійка у знаменнику (27) була зайвою

$\frac{q\tau}{m^*} = \mu = \frac{\bar{v}_x}{\varepsilon_x}$ - дрейфова швидкість у полі одиничного напрямку - рухливість.

Отже, σ визначається μ , а μ визначається τ . Уся проблема в τ .

§ 5. Підрахунок втрати спрямованої складової швидкості. Уточнення понять ε і σ .

До цього ми припустили, що кожне зіткнення приводить до повної втрати спрямованої складової \bar{v} , тобто що напрямок \bar{v} після зіткнення зовсім не залежить від напрямку швидкості до зіткнення. Але часто це не так. Наприклад, при розсіюванні на іоні домішки, кут відхилення електрона θ залежить від прицільної відстані b й E (або v). (Чим повільніше рухається електрон, тим більше часу він знаходиться поблизу іона і тем сильніше відхилиться). Врахуємо цю обставину і внесемо відповідне узагальнення в поняття часу релаксації.

Припустимо, що до зіткнення електрон мав швидкість $\mathbf{v} = v_x$, спрямовану уздовж поля і при зіткненні відхилився на кут θ . Вважаємо, що зіткнення чисто пружне, тобто $\Delta E = 0$ і $|\bar{v}_x| = |\bar{v}'|$. Так як по модулю швидкість не змінюється, то ми знайдемо Δv і час релаксації лише для електронів із заданою по величині швидкістю. (надалі ще має бути проведено усереднення по енергії (по v))

У результаті зіткнення спрямована складова швидкості зменшується на

$$\Delta v = v [1 - \cos(\bar{v}, \bar{v}')] \quad (30)$$

Якщо число таких (на такий кут θ) зіткнень за 1 сек (ймовірність зіткнення) - $W(\bar{v}, \bar{v}')$, то відповідне зменшення v за 1 сек :

$$W(\bar{v}, \bar{v}') \Delta v = v [1 - \cos(\bar{v}, \bar{v}')] W(\bar{v}, \bar{v}')$$

або

$$\Delta v W(\theta) = v [1 - \cos(\theta)] W(\theta). \quad (31)$$

Щоб одержати повне зменшення v за 1 сек, потрібно просумувати (або проінтегрувати) (31) по всіляких зіткненнях, що відповідають відхиленням на різні кути:

$$\Delta \bar{v} = \sum_{\bar{v}'} v [1 - \cos(\bar{v}, \bar{v}')] W(\bar{v}, \bar{v}') = \sum_{\theta} v [1 - \cos(\theta)] W(\theta). \quad (32)$$

Якщо за одну сек спрямована складова зменшується на $\Delta\bar{v}$, то час, необхідний для її повного зникнення, буде $\frac{v}{\Delta\bar{v}}$; цей час і вважається ефективним часом вільного пробігу релаксації τ .

$$\tau = \frac{v}{\Delta\bar{v}} = \frac{1}{\sum_{\theta} (1 - \cos\theta) W(\theta)} \quad (33)$$

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\theta} (1 - \cos\theta) W(\theta) \quad (34)$$

Рівняння (34) можна вивести точно так само й у хвильовій формі, тобто одержати τ як функцію \vec{k} .

$$\Delta k = k(1 - \cos(\vec{k}, \vec{k}'))$$

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \sum_{\vec{k}'} (1 - \cos(\vec{k}, \vec{k}')) \cdot W(\vec{k}, \vec{k}') \quad \text{або} \quad \frac{1}{\tau(\vec{k})} = \sum_{\vec{k}'} \frac{\Delta k}{k} \cdot W(\vec{k}, \vec{k}')$$

або в інтегральній формі

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \int_{k'} W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot (1 - \cos(\vec{k}, \vec{k}')) \cdot dk' \quad (35)$$

В рівняння (34) і (35) входить множник $(1 - \cos\theta)$, - так званий «ваговий множник», - який враховує, що частка енергії (швидкості), що втрачається, при відхиленні на великі кути більше, ніж у випадку відхилення на малі кути. (При $\theta = 90$, $\Delta v = v$ - повна втрата спрямованої складової швидкості).

Для тривимірного простору (випадку) (35) можна перетворити так:

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \int_{V_k} W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot (1 - \cos(\vec{k}, \vec{k}')) \cdot d^3 k' = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_k^*} W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot (1 - \cos(\vec{k}, \vec{k}')) \cdot d^3 k' \quad (36)$$

або

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \int_{\theta} W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot (1 - \cos\theta) \cdot d\Omega, \quad (37)$$

де $d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$ - елемент тілесного кута, що знаходиться між кутами розсіювання θ і $\theta + d\theta$; θ - кут між початковим напрямком руху частинки і напрямком її руху після розсіювання. Кут φ відраховується від деякої площини, що проходить через полярну вісь (вісь z), що збігається з напрямком початкового руху частинки. Якщо центр, що розсіює, має осьову симетрію, то

$$d\Omega = \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi \sin\theta d\theta .$$

Тоді

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = 2\pi \int_{\theta} W(\vec{k}, \vec{k}') \cdot (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta . \quad (38)$$

Вирази (36) або (37) можуть бути отримані з рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації. Дійсно, із (24) і (21) випливає, що

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{cm.} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_B} W(\vec{k}, \vec{k}') [f_1(\vec{k}') - f_1(\vec{k})] d^3k' = -\frac{f_1(\vec{k})}{\tau(\vec{k})} ,$$

$$f_1(\vec{k}') = f(\vec{k}') - f_0(\vec{k}') \quad f_1(\vec{k}) = f(\vec{k}) - f_0(\vec{k}) \quad f_0(\vec{k}') = f_0(\vec{k}) .$$

Якщо $f_1(\vec{k})$ представити, як це звичайно робиться, у вигляді

$$f_1(\vec{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{k} \vec{\chi}(E) ,$$

де $\vec{\chi}(E)$ – деякий вектор, що залежить тільки від E , то

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = -\frac{1}{4\pi^3} \int_{V_B} W(\vec{k}, \vec{k}') \frac{f_1(\vec{k}') - f_1(\vec{k})}{f_1(\vec{k})} d^3k' =$$

[$f_1(\vec{k})$ - під знак інтеграла можна внести, тому що інтегрування ведеться по k']

$$= \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_B} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{\frac{\partial f_0}{\partial E'} \cdot \vec{k}' \cdot \vec{\chi}(E')}{\frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \vec{k} \cdot \vec{\chi}(E)} \right] d^3k' .$$

Вважаємо, що зіткнення пружні, тобто $E' = E, \nu' = \nu, k' = k$. Тоді

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_B} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{\vec{k}' \cdot \vec{\chi}(E')}{\vec{k} \cdot \vec{\chi}(E)} \right] d^3k' .$$

Якщо вектори $\vec{\chi}, \vec{k}', \vec{k}$ спрямовані як на рис., то проєкції k на χ :
 $k_{\chi} = k$, $k'_{\chi} = k' \cos\theta = k \cos\theta$
і тоді

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_B} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{k'_x}{k_x} \right] d^3k' = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_B} W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - \cos\theta] d^3k' .$$

У виразах (34)-(38) у явному вигляді не враховано ту обставину, що для різних типів зіткнень час вільного пробігу по різному залежить від енергії частинки. Ця залежність входить в $W(\vec{k}, \vec{k}')$. (Знаходження явного вигляду $\tau(E)$ й обчислення середніх значень з урахуванням цієї залежності і є задачею теорії розсіювання носіїв заряду.)

Звичайно $W(\vec{k}, \vec{k}')$ виражають через так званий диференціальний переріз розсіювання $\sigma(\theta, \varphi)$, швидкість і число центрів, що розсіюють, (див. Киреев стор. 361-366, 352-361; Шалимова 158-159):

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = \sigma(\theta, \varphi) N\nu(\vec{k}) . \quad (39)$$

Уводячи поняття ефективний переріз розсіювання σ (див. вступ), ми визначали його як ймовірність того, що частинка відхилиться на будь-який довільний кут від початкового напрямку руху. Якщо врахувати, що різні частинки будуть відхилитися на різні кути θ і φ (у сферичній системі координат) [тобто те, що процес розсіювання є випадковим процесом], можна ввести диференціальний ефективний переріз розсіювання $\sigma(\theta, \varphi)$, що відноситься до однієї частинки, що являє собою ймовірність розсіювання однієї частинки на одному центрі, що розсіює, на одиниці шляху в одиничний тілесний кут $d\Omega$ (Горбачов, стор.170).

Нехай в елемент тілесного кута $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ на ділянці dx в одиниці часу розсіється dn' частинок. Це число можна представити у вигляді

$$dn' = dn'(\theta, \varphi) = nNdx\sigma(\theta, \varphi)d\Omega ,$$

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dn'}{nNdx d\Omega} .$$

Величина $\sigma(\theta, \varphi)$ чисельно дорівнює числу частинок dn' , розсіяних за одиницю часу в одиничний кут $d\Omega=1$ на одиничній ділянці шляху $dx=1$ для одиничного потоку $n = n_1 \cdot \nu = 1$ на одному центрі, що розсіює, $N=1$.

Величина

$$\sigma(\theta, \varphi)d\Omega = \frac{dn'}{1} \quad (n_1 \cdot \nu = n = 1; Ndx = 1)$$

- є ймовірність розсіювання частинки з одночасткового потоку на одному центрі, що розсіює, на кути φ й θ у тілесний кут $d\Omega$, тому $\sigma(\theta, \varphi)$ називається диференціальним ефективним перерізом. (Киреев, стор. 355).

$\sigma(\theta, \varphi)$ є ймовірність того, що одна частинка, що має $\nu = 1$, при зіткненні з одним центром, що розсіює, потрапить в одиничний тілесний кут $d\Omega=1$, побудований навколо напрямку, що визначається кутами φ , θ при сполученні початку відліку з центром, що розсіює. Знаючи $\sigma(\theta, \varphi)$, можемо знайти число частинок $dn'(\theta, \varphi, x)$, що потрапляють у

тілесний кут $d\Omega(\theta, \varphi)$ при розсіюванні частинок, що мають концентрацію у пучку n_1 і швидкість v при розсіюванні на N центрах, при проходженні шляху dx :

$$-dn'(\theta, \varphi, x) = \sigma(\theta, \varphi)n(x)vNdx d\Omega(\theta, \varphi)$$

(Киреев, стор.365) .

Якщо центр, що розсіює, має осьову симетрію, то σ не залежить від φ і тоді $\sigma(\theta)$ [відповідно до (1), Шалимова] дорівнює відношенню числа частинок, відхилених одним центром за 1 сек на кут $d\theta$ в одиничний тілесний кут, до потоку падаючих часток на 1 см^2 за 1 сек. (Шалимова с.153).

Знайшовши суму величин $\sigma(\theta, \varphi) d\Omega$ по всіх кутах θ і φ , визначимо ймовірність розсіювання на довільні кути, тобто повну ймовірність розсіювання або інтегральний ефективний переріз

$$\int_{\substack{4\pi \\ (\theta, \varphi)}} \sigma(\theta, \varphi) d\Omega = \sigma ,$$

який збігається з уведеним раніше ефективним перерізом σ .

Якщо $W(\vec{k}, \vec{k}')$ визначається з (39), то

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{1}{\tau(E)} = Nv(\vec{k})\sigma_c = Nv(\vec{k}) \int_{\theta} 2\pi \sigma(\theta)(1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta , \quad (40)$$

де

$$\sigma_c = 2\pi \int_{\theta} \sigma(\theta)(1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma(\theta)(1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta$$

- так званий усереднений диференціальний переріз або ефективний переріз провідності або рухливості, або транспортний ефективний переріз. Вагова функція $(1 - \cos\theta)$ зменшує внесок від $\sigma(\theta)$ [далі скрізь вважаємо, що σ_D не залежить від φ і тому $\sigma(\theta)$] у σ_c при розсіюванні на малі кути і збільшує майже в два рази роль відхилень на великі кути. (Це ясно, тому що при розсіюванні на великі кути, частка енергії, що втрачається, велика.

У загальному випадку відношення σ (інтегрального ефективного перерізу) до σ_c визначає середнє число зіткнень q , при яких цілком утрачається швидкість спрямованого руху:

$$q = \frac{v_z}{\langle \Delta v_z \rangle} = \frac{\sigma}{\sigma_c}$$

Отже, знаючи $\sigma(\theta)$, що у загальному випадку саме залежить від σ (від \vec{k} , або від E) можна визначити $\tau(\vec{k})$ ($\tau(E)$):

$$\tau(\vec{k}) = \frac{1}{N\sigma_c(\vec{k})\nu(\vec{k})} \quad (41)$$

Довжина вільного пробігу

$$\ell(\vec{k}) = \tau(\vec{k})\nu(\vec{k}) = \frac{1}{\sigma_c N} \quad (42)$$

§ 6. τ і ℓ при різних механізмах розсіювання (різних центрах, що розсіюють).

а) Розсіювання на іонах домішки.

$$\tau_I(\vec{k}) = \frac{\varepsilon^2 m^{*2} \nu^3(\vec{k})}{2\pi z^2 q^4 N_I \ln \left[1 + \left(\frac{\varepsilon m^* \nu^2}{2z q^2 N_I^{1/3}} \right)^2 \right]} \quad (43)$$

(43) - формула Конуелла – Вайскопфа.

Якщо врахувати, що

$$m\nu^2/2 = E \quad \text{і} \quad \nu = \left(2E/m^* \right)^{1/2},$$

і з огляду на те, що в (43) логарифм слабка функція (від $\nu(E)$), то

$$\tau_I(E) = \tau_{0I} E^{3/2} \quad (44)$$

$$\tau_{0I} = \frac{(2m^*)^{1/2} \varepsilon_n^2}{\pi z^2 q^4 N_I \ln \left[1 + \left(\frac{\varepsilon_n E}{z q^2 N_I^{1/3}} \right)^2 \right]} = \frac{16\pi \sqrt{2m^*} \varepsilon^2 \varepsilon_0^2}{z^2 q^4 N_I \ln \left[1 + \left(\frac{4\pi \varepsilon \varepsilon_0 E}{z q^2 N_I^{1/3}} \right)^2 \right]}$$

і

$$\ell_I(\vec{k}) = \tau_I(\vec{k})\nu(\vec{k}) = \ell(E) = \left(\frac{2}{m^*} \right)^{1/2} \tau_{0I} E^2 \quad (45)$$

У виразах (43)-(45):

N_I – концентрація іонізованої домішки;

z – зарядність іона, що розсіює;

q – елементарний заряд;

m^* - ефективна маса носія заряду;

ε_n - діелектрична постійна напівпровідника.

Якщо ε_n представити як

$$\varepsilon_n = 4\pi\varepsilon_{omt} \cdot \varepsilon_0 = 4\pi\varepsilon\varepsilon_0,$$

то

$$\tau_{0I} = \frac{16\pi\sqrt{2m^*}\varepsilon^2\varepsilon_0^2}{z^2q^4N_I \ln[1+\eta^2]},$$

де $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ ф/м}$ - діелектрична постійна,

ε - відносна діелектрична проникність напівпровідника;

$$\eta = \frac{4\pi\varepsilon\varepsilon_0E}{zq^2N_I^{1/3}}$$

б) Розсіювання на атомах домішки.

$$\tau_A = \frac{q^2(m^*)^2}{8\pi\varepsilon\varepsilon_0\hbar^3} \cdot \frac{1}{N_A} \quad \tau_A \neq f(E)$$

τ_A не залежить ні від E ні явно від T , а тільки від N_A . Цей механізм розсіювання важливий при низьких T , коли N_A (нейтральні) велике. (При $T \leq T_S, N_A = N_t - \frac{n}{(p)}$).

(τ_A неявно залежить від T через N_A при $T \leq T_S$).

в) Розсіювання на акустичних фононах.

Можна показати, що електрони (дірки) можуть ефективно взаємодіяти тільки з довгохвильовими фононами, для котрих $q_{\max} \leq 2k_0$ (де k_0 - початковий хвильовий вектор електрону). При цьому, при $T \approx T_{\text{кімн.}}$ і вище, зіткнення майже пружні ($v_{\text{зв.}} \approx 10^5 \text{ см/с}$, $v_{\text{Тел.}} \approx 10^7 \text{ см/с}$). e і p взаємодіють в основному з подовжніми коливаннями.

$$\tau_{a.\text{ф.}} = \frac{9\pi\hbar^4\omega_{\text{зв.}}^2 M}{4\sqrt{2}c^2 a^3 (m^*)^{3/2} KTE^{1/2}} = \tau_{oa.\text{ф.}}(T)E^{-1/2} \quad (47)$$

де

$$\tau_{oa.\text{ф.}}(T) = \frac{9\pi\hbar^4\omega_{\text{зв.}}^2 M}{4\sqrt{2}c^2 a^3 m^{3/2}} \cdot \frac{1}{KT} = c_{a.\text{ф.}} \frac{1}{T};$$

M - маса атому основної речовини;

$\omega_{\text{зв.}}$ - швидкість подовжньої звукової хвилі в напівпровіднику;

a – постійна ґратки;
 c – постійна, що має розмірність енергії і характеризує інтенсивність взаємодії носія заряду із коливаннями ґратки [порядок розміру c можна оцінити зі співвідношення

$$c \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (\approx 0,5 - 5 \text{ эВ }).$$

$$\ell_{a.ф.} = \tau_{a.ф.} \nu = \ell_0(T) = \sqrt{\frac{2}{m}} \tau_{oa.ф.}(T) \sim \frac{1}{T} \neq f(E) .$$

г). Розсіювання на оптичних коливаннях.

Взаємодія з $\hbar\omega_{opt.}$ вносить помітний внесок у τ лише в іонних кристалах і напівпровідникових з'єднаннях типу А¹¹В^V.

В області низьких T ($T \ll \theta_{opt.}$)

$$\tau_{opt.н.} = \frac{3\sqrt{2}Ma^3(h\nu_0)^{3/2}}{4\pi z^2 q^4 (m^*)^{1/2}} \exp\left(\frac{h\nu_0}{KT}\right) \quad (48)$$

не залежить від E , але залежить від T ($\ell = \ell_0 \sqrt{E}$),

ν_0 – максимальна частота подовжньої оптичної гілки фононів, що може бути визначена як $\nu_0 = \frac{K\theta_{opt.}}{h}$.

В області високої T ($T \gg \theta_o$)

$$\tau_{opt.в.} = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \cdot \frac{Ma^3(h\nu_0)^2}{z^2 q^4 (m^*)^{1/2} KT} \cdot E^{1/2} = \tau_{o.opt.в.}(T) E^{1/2} \quad (49)$$

$$\ell_{opt.} = \ell_{opt.} E = \ell \frac{E}{T}$$

д). Розсіювання на дислокаціях.

$$\tau_D = \frac{3}{8R\nu} \cdot \frac{1}{N_D} \quad (50)$$

$\nu = \sqrt{\frac{2}{m}} E^{1/2}$ – швидкість носія заряду;

R – радіус просторового заряду дислокації

$$R \approx \sqrt{\frac{10^9}{N_t}} ,$$

N_t – концентрація домішки в м⁻³;

N_D – концентрація дислокацій, м⁻².

§ 7. Питома провідність напівпровідників. (висновок із кінетичного рівняння Больцмана).

Розглянемо однорідний напівпровідник, який помістили у постійне поле, спрямоване уздовж осі x , тобто одномірний випадок, коли $F_x = -q\varepsilon_x, F_y = F_z = 0$.

Тоді (24) з урахуванням того, що $\nabla \vec{r} f = 0$ (напівпровідник однорідний), буде мати вигляд:

$$-\frac{q}{\hbar} \left(\frac{\partial f}{\partial k_x} \cdot \varepsilon_x \right) = -\frac{f - f_0}{\tau(E)}$$

$$-q \left(\frac{\partial f}{\partial p_x} \cdot \varepsilon_x \right) = -q \frac{E_x}{m^*} \left(\frac{\partial f}{\partial v_x} \right) = -q \varepsilon_x v_x \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right)$$

або

$$-\frac{1}{\hbar} q \left(\frac{\partial f}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_x} \cdot \varepsilon_x \right) = -q \varepsilon_x v_x \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right)$$

$$q \varepsilon_x v_x \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right) = \frac{f - f_0}{\tau(E)}$$

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x}.$$

Якщо

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

то

$$v = \hbar \frac{K}{m} = \frac{p}{m}$$

$$f = f_0 + f_1$$

$$q \varepsilon_x v_x \frac{\partial}{\partial E} (f_0 + f_1) = \frac{f - f_0}{\tau}$$

Розглянемо слабкі поля, коли f_1 мале і $\frac{\partial f}{\partial E} \approx \frac{\partial f_0}{\partial E}$, тоді

$$q\varepsilon_x v_x \frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{f - f_0}{\tau},$$

звідки

$$f = f_0 + q\varepsilon_x \tau v_x \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (51)$$

З формули (9) можна одержати для електронів

$$j_x = -\frac{q}{4\pi^3} \int_{(V_B)} v_x f d^3 \vec{k} \quad (52)$$

При підстановці (51) у (52) одержимо суму двох інтегралів, перший із котрих

$$-\frac{q}{4\pi^3} \int f_0 v_x d^3 k = 0, \text{ тому що він виражений так у рівноважних умовах.}$$

Другий доданок дає

$$j_x = -\frac{q}{4\pi^3} \int v_x f_1 d^3 \vec{k} = -\frac{q}{4\pi^3} \int v_x q\varepsilon_x \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 \vec{k} = -\frac{q^2 \varepsilon_x}{4\pi^3} \int \tau(E) v_x^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 \vec{k} \quad (53)$$

тобто j обумовлений f_1 – нерівноважна добавка до f_0 .

Далі врахуємо, що

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = \frac{2E}{m^*}$$

і вважаючи

$$v_x^2 \approx v_y^2 \approx v_z^2.$$

Виразимо v_x^2 через E :

$$v_x^2 \approx \frac{2E}{3m^*} \quad (54)$$

($E_c = 0$) відлік ведемо від E_c (для електронів).

Врахуємо також, що

$$d^3 k = dk_x dk_y dk_z = 4\pi k^2 dk$$

і

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \text{ (найпростіші зони) } (E_c = 0)$$

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*},$$

$$dE = \frac{\hbar^2}{2m^*} 2k dk ;$$

$$dk = \frac{m^* dE}{\hbar^2 k} = \frac{m^* \hbar}{\hbar^2 \sqrt{2m^*} \sqrt{E}} dE = \frac{m^* E^{-1/2}}{\hbar \sqrt{2m^*}} dE ,$$

$$d^3k = 4\pi k^2 dk = \frac{4\pi E (2m^*) m^* E^{-1/2}}{\hbar^2 \hbar \sqrt{2m^*}} dE = \frac{4\pi (2m^*) m^* E^{-1/2}}{\hbar^3 \sqrt{2m^*}} dE \quad (54^*)$$

Підставивши (54) і (54*) у (53) одержимо

$$\begin{aligned} j_x &= -\frac{q^2 \varepsilon_x \cdot 2 \cdot 4\pi \sqrt{2m^*} m^*}{4\pi^3 3m^* \hbar^3} \int_{E_c=0}^{\infty} \tau(E) E^{3/2} \frac{\partial f_0}{\partial E} dE = \\ &= -\frac{8\pi q^2 (2m^*)^{3/2} \varepsilon_x}{3m^* \hbar^3} \int_0^{\infty} \tau(E) E^{3/2} \frac{\partial f_0}{\partial E} dE \end{aligned} \quad (55)$$

Для невиродженого електронного газу

$$f_0 = e^{\frac{E_F}{KT}} e^{-\frac{E}{KT}} (M - B)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{1}{KT} e^{\frac{E_F}{KT}} e^{-\frac{E}{KT}}, \quad (56)$$

$$j_x = \frac{8\pi q^2 (2m^*)^{3/2} \varepsilon_x}{3m^* \hbar^3 KT} e^{\frac{E_F}{KT}} \int_0^{\infty} \tau E^{3/2} e^{-\frac{E}{KT}} dE . \quad (56)$$

З огляду на те, що $n_0 = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{KT}}$, при $E_c = 0$

$$e^{\frac{E_F}{KT}} = \frac{n_0}{N_c} = \frac{n_0 \hbar^3}{2(2\pi m^* KT)^{3/2}} .$$

Підставивши останній вираз в (56) і з огляду на те, що

$$\int_0^{\infty} E^{3/2} e^{-\frac{E}{KT}} dE = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} (KT)^{5/2}$$

Одержимо

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{8\pi q^2 (2m_n^*)^{3/2} n_0 h^3 \varepsilon_x}{3m_n^* h^3 KT 2(2m_n^*)^{3/2} (KT)^{3/2} \pi^{3/2}} \int_0^{\infty} \tau E^{3/2} e^{-\frac{E}{KT}} dE = \\ &= \frac{4q^2 n_0 \varepsilon_x}{3m_n^* (KT)^{5/2} \sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau E^{3/2} e^{-\frac{E}{KT}} dE = \frac{q^2 n_0}{m_n^*} \varepsilon_x \langle \tau \rangle = qn_0 \frac{q \langle \tau \rangle}{m^*} \varepsilon_x \end{aligned}$$

де

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \tau(E) E^{3/2} e^{-\frac{E}{KT}} dE}{\int_0^{\infty} E^{3/2} e^{-\frac{E}{KT}} dE} \quad (57)$$

(57) – усереднений по енергії час релаксації.

Якщо зробити заміну $\frac{E}{KT} = x$ і врахувавши, що

$$\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} .$$

Одержимо

$$\langle \tau \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau(x) x^{3/2} e^{-x} dx . \quad (58)$$

Отже:

$$j = \frac{q^2 n_0}{m_n^*} \langle \tau \rangle \varepsilon = \sigma_n \varepsilon , \quad (59)$$

де

$$\sigma_n = \frac{q^2 n_0}{m^*} \langle \tau_n \rangle = qn_0 \mu_n , \quad (60)$$

$$\mu_n = \frac{q}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle = \frac{q}{m_n^*} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau(x) x^{3/2} e^{-x} dx . \quad (61)$$

Аналогічні обчислення можна провести для дірочної складової струму й одержати

$$\sigma_p = q p_0 \mu_p$$

$$\mu_p = \frac{q}{m_p^*} \langle \tau_p \rangle = \frac{q}{m_p^*} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau_p(x) x^{3/2} e^{-x} dx . \quad (62)$$

Повна питома провідність

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_n + \sigma_p = q(n_0 \mu_n + p_0 \mu_p) = \\ &= q^2 \left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \right) \left(\frac{n_0}{m_{n_0}^*} \int_0^{\infty} \tau_n(x) x^{3/2} e^{-x} dx + \frac{p_0}{m_{p_0}^*} \int_0^{\infty} \tau_p(x) x^{3/2} e^{-x} dx \right) \end{aligned} \quad (63)$$

Для виродженого напівпровідника

$$f_0 = f_{\phi-D} \quad \text{і} \quad -\frac{\partial f_0}{\partial E} \cong \delta(E - E_F)$$

і можна показати, що час релаксації можна вважати постійною величиною $\tau(E_F)$, що відповідає електронам, що займають рівень Фермі (саме ця частина електрону виродженого електронного газу, розташовуються поблизу E_F , обумовлює електропровідність). У цьому випадку в (60) і (62) замість $\langle \tau \rangle$ варто ставити просто $\tau(E_F)$.

Отже, якщо:

$$1) \tau = \text{const} (\neq f(E)), \text{ то}$$

$$\mu = \frac{q}{m^*} \tau$$

$$2) \quad \tau = \tau(E) \text{ для неvirодженого напівпровідника}$$

$$\mu = \frac{q}{m^*} \langle \tau \rangle, \text{ де } \langle \tau \rangle \text{ визначається по (37) або (58)}$$

$$3) \quad \tau = \tau(E_F) \text{ для виродженого напівпровідника}$$

$$\mu = \frac{q}{m^*} \tau(E_F), \text{ тобто вироджений газ поводитья так, що } \tau = \text{const} .$$

Рухомість носіїв заряду при різних механізмах розсіювання (залежність $\mu(T)$).

а). Розсіювання на іонах домішки.

$$\tau_I(E) = \sigma_{0I} E^{3/2}$$

$$\mu_I = \frac{4(kT)^{3/2} q}{3\sqrt{\pi} \cdot m^*} \tau_{0I} \int_0^\infty x^3 e^{-x} dx = \frac{8q(kT)^{3/2}}{\sqrt{\pi} \cdot m^*} \tau_{0I} = \mu_{I0} T^{3/2} \quad (64).$$

(Якщо не вся домішка іонізована, то $\mu_{I0} = f(T)$, так як туди входить N_I).

б). Розсіювання на атомах домішки.

$$\tau_A = const \text{ и } \mu_A = \frac{q}{m^*} \tau_A \quad (65)$$

- в явному виді не залежить від T (хоч якщо N_A залежить від T ($N_A = N_d - n$), то
і $\mu_A = f(T)$).

в). Розсіювання на акустичних фононах.

$$\tau_{a.ф.} = \tau_{0a.ф.} E^{-1/2}; \quad \tau_{0a.ф.} \sim \frac{1}{T} \quad \left(\mu = c \frac{1}{T} \frac{1}{(kT)^{1/2}} \underbrace{\int_0^\infty x e^{-x} dx}_1 \right)$$

$$\mu_{a.ф.} = \mu_{0a.ф.} (T)^{-3/2}.$$

г). Розсіювання на оптичних фононах.

$$T \ll \theta_{opt} \quad \mu_{офн} = \frac{q}{m^*} \tau_{opt.н} = f(T), \text{ так як } \tau_{opt.н.} = f(T)$$

$$T \gg \theta_{opt} \quad \mu_{офв} = \mu_{офв}^0 \cdot T^{-1/2}.$$

д). Розсіювання на дислокаціях.

$$\tau_d = \frac{3\sqrt{m^*}}{8RN_d \sqrt{2kT} x^{1/2}}$$

$$\mu_d = \mu_{од} T^{-1/2}.$$

1. Рухомість носіїв заряду при заданому механізмі розсіювання визначається виразом

$$\mu_k = \frac{q}{m_k^*} \langle \tau_k \rangle = \frac{q}{m_k^*} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau_k x^{3/2} e^{-x} dx, \quad (66)$$

де $x = \frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{K_0 T}$ - для електронів і $x = \frac{\varepsilon_v - \varepsilon}{K_0 T}$ - для дірок;

τ_k - час релаксації носіїв заряду при заданому механізмі розсіювання, що залежить в загальному випадку від енергії ε_k (або від x);

$$\langle \tau_k \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau_k x^{3/2} e^{-x} dx - \text{усереднений (по енергії) час релаксації.}$$

2. У випадку, коли діють декілька механізмів розсіювання одночасно і всі механізми незалежні, можемо сказати, що повна ймовірність розсіювання дорівнює сумі ймовірностей розсіювання на кожному типі розсіюючих центрів. Тоді повний час релаксації τ_k^{Σ} буде мати вигляд

$$\tau_k^{\Sigma} = \left(\sum_i \frac{1}{\tau_{ki}} \right)^{-1}, \quad (67)$$

де τ_{ki} - час релаксації при i -му механізмі розсіювання.

При цьому усереднений час релаксації визначається в результаті інтегрування

$$\langle \tau_k^{\Sigma} \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau_k^{\Sigma} x^{3/2} e^{-x} dx. \quad (68)$$

А рухомість

$$\mu_k^{\Sigma} = \frac{q}{m_k^*} \langle \tau_k^{\Sigma} \rangle = \frac{q}{m_k^*} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau_k^{\Sigma} x^{3/2} e^{-x} dx. \quad (69)$$

Із (67) видно, що залежність τ_k^{Σ} від енергії може бути досить складною і інтегрування по (68) та (69) буде являти собою задачу, що важко розв'язується. Для її розв'язку потрібно зробити деякі спрощуючі припущення.

Аналіз виразу (67) показує, що повний час релаксації τ_k^{Σ} визначається тим парціальним процесом, який має найменший час релаксації в даних умовах. Оскільки τ_{ki} залежать від енергії, потрібно порівнювати роль того чи іншого процесу релаксації при даній енергії носіїв заряду. Однак при цьому повільні та швидкі носії заряду можуть грати різноманітну роль в різних процесах. Для того, щоб отримати правильний результат в

цьому випадку необхідно оцінити роль частинок, які мають середню енергію $\frac{3}{2}K_0T$, так як частинки з енергією, близькою до середньої, складають основну частину вільних носіїв заряду. Тому при розрахунку температурної залежності рухливості у випадку дії одночасно декількох механізмів розсіювання діють таким чином. На кожному кроці температури обчислюють значення кожного із τ_{ki} при $\varepsilon_k = \frac{3}{2}K_0T$; вибирають із отриманих значень найменше і вважають, що при цьому механізм розсіювання являється переважаючим; потім τ_{ki} , що відповідає цьому виду розсіювання, тепер уже з ε_k (або x) в якості змінної в (69) і обчислюють значення рухомості при заданій температурі. На наступному кроці температури весь алгоритм повторюється.

Звичайно експериментальна залежність $\mu(T)$ (в області переважання розсіювання на акустичних фононах) не відповідає теоретичному $\sim T^{-3/2}$, так як вносять вклад і інші механізми розсіювання (на оптичних коливаннях, двофононне, носіїв на носіях). Експериментальні значення p для $\mu \sim T^{-p}$ див. Шалімова, стор.180, Кирєєв, стор.435.

Найбільш практично важливим випадком являється сумісна дія розсіювання на іонах і акустичних фононах.

Електропровідність напівпровідника тепер легко визначити із

$$\sigma = q \sum_i n_i \mu_i \quad (70)$$

знаючи n і μ для кожного конкретного випадку (в загальному випадку в (3) потрібно підставити (1) і (2)). В загальному випадку

$$\sigma = \frac{16\pi m q^2}{3h^3} l_0(T) (kT)^{r+1} F_r(E_F^*).$$

Розглянемо σ для різних випадків.

Для бездомішкового невідродженого напівпровідника

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}},$$

а рухомість буде в основному визначатися розсіюванням на фононах. У випадку атомних напівпровідників – тільки акустичні фонони, тоді

$$\mu = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{q}{m^*} \frac{\tau_{0ак}}{(kT)^{3/2}} \approx \mu_0 T^{-3/2}$$

$$\begin{aligned} \sigma &= q n_i (\mu_n + \mu_p) = q n_i T^{-3/2} (\mu_{0n} + \mu_{0p}) = q n_i B T^{-3/2} = \\ &= q \sqrt{N_c N_v} B T^{-3/2} e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}} = q A e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}} = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}} \end{aligned}$$

В загальному випадку, коли $\mu = \mu_0 T^b$ ($b < 0$)

$$\sigma = qAT^{3/2+b} \exp\left(-\frac{\Delta E_d}{2kT}\right) = \sigma_0(T) \exp\left(-\frac{\Delta E_d}{2kT}\right). \quad (71)$$

В першому наближенні можна вважати, що $\sigma_0 = qAT^{3/2+b}$ слабо залежить від T (якщо порівнювати з ехр) і

$$\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{\Delta E_d}{2kT} \quad (72)$$

і залежність $\ln \sigma = f\left(\frac{1}{T}\right)$ - пряма.

$tq\alpha = \frac{\Delta E_d}{2k}$, звідки можна знайти ΔE_d .

У виродженому власному напівпровіднику (металі)

$$n = \frac{8\pi}{3} \frac{(2m^*)^{3/2}}{h^3} (E_F - E_C)^{3/2}$$

Тут також вирішальну роль грає розсіювання на фононах і

$$\mu = \mu_0 T^{-3/2},$$

$$\sigma = C \left(\frac{E_F - E_C}{kT} \right)^{3/2}. \quad (73)$$

Тобто σ зі збільшенням температури зменшується, так як n (точніше E_F) зі збільшенням температури збільшується слабо [у випадку сильного, але не повного виродження; n збільшується за рахунок $E_F = f(T)$] або не залежить від T взагалі (у випадку повного виродження), в той час як рухомість зменшується зі збільшенням температури.

В домішковому напівпровіднику n суттєво залежить від T , причому в різних температурних інтервалах по різному. Вихідне співвідношення як і раніше $\sigma = qn\mu$.

Низькі температури (донорний напівпровідник):

$$n = \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}}.$$

Для рухомості скористаємося експериментальними значеннями

$\mu_{Ge} \sim T^{-1,66}$, $\mu_{Si} \sim T^{-2,5}$ або в загальному випадку $\mu = DT^{-b}$, так як сказати який із механізмів розсіювання являється визначаючим в кожному конкретному випадку дуже важко.

$$\sigma_{\text{д}} = q \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} DT^{-b} e^{-\frac{\Delta E_{\text{д}}}{2kT}} = \sigma_{0\text{д}}(T) e^{-\frac{\Delta E_{\text{д}}}{2kT}} \quad (74)$$

$$\ln \sigma = \ln \sigma_{0\text{д}}(T) - \frac{\Delta E_{\text{д}}}{2kT}.$$

Таким чином в області низьких температур $\ln \sigma = f\left(\frac{1}{T}\right)$ - пряма, а $tq\beta = \frac{\Delta E_{\text{д}}}{2kT}$, якщо температурною залежністю $\sigma_{0\text{д}}$ знехтувати.

Область високих температур (мається на увазі температури не дуже високі, коли ще не наступає власна провідність)

$$n = Nd$$

$$\mu = DT^{-b}$$

$$\sigma = qNdDT^{-b}. \quad (75)$$

Тобто σ зі збільшенням температури спадає (див. рис.).

При подальшому зростанні температури перейдемо в область власної провідності, але при цьому треба мати на увазі, що в μ дає вклад і розсіювання на $I_{\text{пр}}$, тобто σ_0 можна буде вважати постійним лише наближено.