

Баранський П.І.¹, Гайдар Г.П.²



Баранський П.І.

¹Інститут фізики напівпровідників
ім. В.С. Лашкарьова НАН України,
просп. Науки, 45, Київ, 03028, Україна;
²Інститут ядерних досліджень НАН України
просп. Науки, 47, Київ, 03680, Україна



Гайдар Г.П.

**ТЕОРІЯ АНІЗОТРОПНОГО РОЗСІЯННЯ
Й АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ КІНЕТИКИ
ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ У
БАГАТОДОЛИННИХ НАПІВПРОВІДНИКАХ**

У роботі викладено фізичні основи теорії анізотропного розсіяння. Звертається увага дослідників на вигідну їх відмінність від інших теорій, яка полягає придатості її практичного застосування і в області проміжних магнітних полів ($\mu\text{H}/c \approx 1$), у якій використання інших теорій виявляється малоефективними.

Ключові слова: теорія анізотропного розсіяння, багатодолінні напівпровідники, кінетичні явища, енергетичні і магнітні поля.

This paper deals with the physics of anisotropic scattering theory. Researchers' attention is drawn to the advantageous features of this theory which made it suitable for practical application in the region of intermediate magnetic fields ($\mu\text{H}/c \approx 1$), where the use of other theories proved to be inefficient.

Keywords: theory of anisotropic scattering, many-valley semiconductors, kinetic phenomena, electric and magnetic fields.

Вступ

Без будь-яких перебільшень можна стверджувати, що реальною передумовою успішного розвитку ряду розділів кінетики електронних процесів у напівпровідниках у нашій країні (і за її межами) за останні три-чотири десятиліття була розробка теорії анізотропного розсіяння (ТАР), розвитком якої її автор проф. А. Г. Самойлович та його школа успішно займалися (в м. Чернівці), починаючи з 1960 р. і фактично до його останнього дня творчо насиченого і далеко не простого життя.*

Деякі розділи ТАР фігурували в окремих виданнях [1–4], що були присвячені розгляду виділених проблем. Тому в даному огляді буде не зайве, по можливості, стисло і послідовно викласти основні положення ТАР, акцентуючи увагу на тих особливостях цієї теорії, які забезпечують практичну можливість її використання в таких областях напруженості магнітних полів (зокрема задовольняючих критерію $\mu\text{H}/c \approx 1$), опис кінетики електронного газу в яких для інших теорій виявляється, по суті, неможливим.

*А. Г. Самойлович в 5 років втратив можливість не тільки рухатися без сторонньої допомоги, але навіть і приймати їжу.

Найбільш детально і повно (так би мовити, з перших рук) ТАР наведено в конспекті лекцій А. Г. Самойловича [5], підготовленому до друку учнями Анатолія Григоровича – Вихор Л. М., Охрем О. А. і Снарським А. О.

Зауважимо, що теоретичний спецкурс із ТАР (виданий у вигляді конспекту лекцій) є, безумовно, самодостатнім і повним. Але оскільки він обмежений у своєму об'ємі рамками вузівської програми, у ньому, звичайно, не знайшли свого відображення результати експериментальних досліджень, які виконувалися в ІФН імені В. С. Лашкарьова НАН України за активної участі в роботі теоретиків Чернівецького державного університету. Саме цю прогалину у висвітленні взаємодії ТАР із експериментом хотіли б певною мірою ліквідувати автори цього огляду, посилаючись, звичайно, лише на наукові статті і монографії, опубліковані з А. Г. Самойловичем і співробітниками очолюваної ним кафедри.

1. Фізичні основи теорії анізотропного розсіяння і її внесок у вивчення кінетики електронного газу в багатодолинних напівпровідниках (Ge і Si *n*-типу)

Дослідження електричних і гальваномагнітних властивостей твердих тіл дає важливі відомості щодо структури енергетичного спектра носіїв, характеру їх розсіяння та інших величин, які описують явища переносу. Знання точної кількісної теорії цих явищ робить можливим визначити цілу низку параметрів і дає можливість широкого практичного використання електричних і гальваномагнітних властивостей твердих тіл у науці та техніці.

Розглядаючи рух електронів у кристалічній ґратці, необхідно коректно враховувати анізотропію ефективної маси і анізотропію розсіяння електронів як на коливаннях кристалічної ґратки, так і на іонізованих домішках.

Перший успішний крок у цьому напрямку зроблено у праці Херрінга і Фогта [6]. У цій праці нерівноважна добавка до функції розподілу n'_k приймалася у вигляді лінійної функції квазіімпульсу \vec{k} , що еквівалентно врахуванню лише першої гармоніки у розкладі n'_k по сферичних функціях, тобто використано лінійне наближення.

$$n'_k = \vec{A}(\varepsilon) \vec{k}, \quad (1)$$

За обмеження лінійним наближенням відсутня можливість оцінки виникаючих похибок. У випадку сильно анізотропного розсіяння (розсіяння на іонізованих домішках) такий підхід узагалі непридатний.

У рамках же ТАР розв'язок кінетичного рівняння, як буде показано нижче, має надійне математичне обґрунтування. Цей метод еквівалентний варіаційному. Обмежимося розглядом пружного розсіяння електронів, що мають ізоенергетичні поверхні у формі еліпсоїдів обертання. Розв'язок кінетичного рівняння розшукується у вигляді ряду розкладу за сферичними функціями і зводиться до нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів цього розкладу.

Для обчислення потоків необхідно із системи визначити коефіцієнти при першій гармоніці. Коли ймовірність розсіяння в осях еліпсоїда має не залежить від азимута вектора \vec{q} , рівного зміні квазіімпульсу за розсіяння, і магнітне поле дорівнює нулю, коефіцієнти при першій гармоніці можна подати у вигляді рядів, перший член яких дає лінійне наближення Херрінга-Фогта. У випадку продовговуватих ізоенергетичних еліпсоїдів обертання ($m_{\parallel} > m_{\perp}$) за розсіяння на іонізованих домішках ці ряди швидко сходяться для будь-яких (значних) відношень m_{\parallel}/m_{\perp} , тому досить зберігати два

члени ряду. У випадку *Si* та *Ge* (як показують оцінки) за розсіяння на акустичних фонах досить обмежитися першим членом розкладу, адже другий член на два порядки менший від першого. Як показують оцінки, останнє твердження залишається вірним і за змішаного розсіяння.

2. Розв'язок кінетичного рівняння за анізотропного розсіяння електронів

2.1. Зведення кінетичного рівняння до системи алгебраїчних рівнянь

(за даними робіт [1–10])

За умов анізотропного розсіяння ймовірність переходу $W_{\vec{k} \vec{k}'}$ зі стану \vec{k} в стан \vec{k}' залежить від напрямків \vec{k} і \vec{k}' . Таке розсіяння може обумовлюватися або анізотропією енергетичного спектру електронів, або анізотропним характером розсіювача. Будемо розглядати лише пружне розсіяння. Припустимо, що енергетичний спектр електронів, які знаходяться в зовнішньому електричному полі за відсутності магнітного поля ($H = 0$), має вигляд

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2 k_i^2}{2 m_i} \quad (2)$$

Тоді при слабких електричному полі і градієнті температури ($grad T$), у відповідності з [2, 3, 7–10], можна записати кінетичне рівняння у вигляді

$$\hat{D}n_{\vec{k}}^{(0)} + \hat{R}n_{\vec{k}}' = 0, \quad (3)$$

де

$$\hat{R}n_{\vec{k}}' = \sum_{\vec{k}'} w_{\vec{k}\vec{k}'} (n_{\vec{k}'}' - n_{\vec{k}}'), \quad (4)$$

де $n_{\vec{k}}^{(0)}$ – рівноважна функція розподілу, $n_{\vec{k}}'$ – нерівноважна добавка до функції розподілу, \hat{R} – оператор зіткнень, $\hat{D}n_{\vec{k}}^{(0)}$ – вільний член кінетичного рівняння

$$\hat{D}n_{\vec{k}}^{(0)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial n_{\vec{k}}^{(0)}}{\partial \varepsilon} \sum_i \left(\frac{\partial \mu}{\partial x_i} + \frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} - e E_i \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i}, \quad (5)$$

μ – хімічний потенціал, E – зовнішнє електричне поле.

Кінетичне рівняння розв'язують для кожного окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда (перекиди між мінімумами не враховуємо).

Уведемо "деформовані" координати в просторі квазі імпульсів

$$\xi_i = \frac{\hbar}{\sqrt{2 m_i \varepsilon}} k_i. \quad (6)$$

Тоді вираз (2) матиме вигляд

$$\sum_i \xi_i^2 = 1. \quad (7)$$

Уведемо сферичну систему координат з полярною віссю, орієнтованою вздовж осі OZ еліпсоїда сталої енергії

$$\xi_1 = \sin \vartheta_0 \cos \varphi_0, \quad \xi_2 = \sin \vartheta_0 \sin \varphi_0, \quad \xi_3 = \cos \vartheta_0. \quad (8)$$

У цьому випадку, позначаючи через

$$K_i = -\frac{\partial \mu}{\partial x_i} - \frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} + eE_i, \quad (9)$$

можна записати вільний член кінетичного рівняння у вигляді

$$\hat{D} n_{\vec{k}}^{(0)} = \sum_m D_m Y_{1m}(\nu_0 \varphi_0), \quad (10)$$

де $Y_{lm}(\vartheta_0 \phi_0)$ – нормована на одиницю сферична функція.

$$\left. \begin{aligned} D_1 &= \sqrt{\frac{4\pi\varepsilon}{3}} \frac{\partial n_{\vec{k}}^{(0)}}{\partial \varepsilon} \left(\frac{K_1}{\sqrt{m_1}} - \frac{i}{\sqrt{m_2}} K_2 \right) \\ D_0 &= \sqrt{\frac{8\pi E}{3m_3}} \frac{\partial n_{\vec{k}}^{(0)}}{\partial \varepsilon} K_3, \quad D_{-1} = -D_1^* \end{aligned} \right\}. \quad (11)$$

З огляду на вираз (10), природно шукати розв'язок кінетичного рівняння у вигляді розкладу за сферичними функціями

$$n_{\vec{k}}' = \sum_{km} X_{km}(\varepsilon) Y_{km}(\nu_0 \varphi_0). \quad (12)$$

Оскільки за умов пружного розсіяння оператор зіткнень діє тільки на кутову частину функції $n_{\vec{k}}'$, то отримаємо

$$\hat{R} n_{\vec{k}}' = - \sum_{jkm} X_{km}(\varepsilon) B_{jk}(pm) Y_{jp}(\nu_0 \varphi_0), \quad (13)$$

де

$$- \sum_{jp} B_{jp}(pm) Y_{jp}(\vartheta_0 \phi_0) = \hat{R} Y_{km}(\nu_0 \varphi_0). \quad (14)$$

Підставляючи (10) і (13) в (3), одержимо систему рівнянь відносно невідомих $X_{km}(\varepsilon)$

$$\sum_{km} B_{jk}(pm) X_{km} = D_p \delta_{j1}. \quad (15)$$

Таким чином, задача визначення $n_{\vec{k}}'$ з рівняння (3) звелася до знаходження X_{km} з нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь (15). Компоненти струму пропорційні сферичним функціям першого порядку. А тому для обчислення струму досить знайти із наведеної системи X_{1m} . Частина функції розподілу $n_{\vec{k}}'$, якою визначається струм, має вигляд

$$n_{\vec{k}}' = \sum_m X_{1m}(\varepsilon) Y_{1m}(\vartheta_0 \phi_0). \quad (16)$$

Виходячи з принципу мікроскопічної оборотності, можна показати, що в розклад (11) входять тільки непарні гармоніки.

Відмітимо, що систему рівнянь (15) можна також отримати, використавши принцип максимуму швидкості зростання ентропії.

У результаті дії оператора зіткнень на кутову частину функції $n_{\vec{k}}'$ і після проведення необхідних розрахунків [8, 9] було отримано наступний вираз для коефіцієнтів $B_{jk}(pm)$:

$$B_{jk}(pm) = \frac{4\sqrt{2m_1 m_2 m_3 \varepsilon}}{(2\pi\hbar)^3} i^{m-p} \sum_{s_{\text{парні}}} \sqrt{\frac{(2j+1)(2k+1)(j-s)!(k-s)!}{(j+s)!(k+s)!}} \times \int d\Omega \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \cos\theta W(\theta\vartheta\phi) P_j^s(\cos\theta) P_k^s(\cos\theta) P_{sp}^j(\cos\vartheta) P_{sm}^{*k}(\cos\vartheta) e^{i(m-p)\phi} \quad (17)$$

Підсумовування в (16) за $s_{\text{парні}}$ проводиться від $-k+1$ до $k-1$, якщо $k < j$; і від $-j+1$ до $j-1$, якщо $j < k$; P_j^s – приєднана функція Лежандра; P_{sp}^j – орбітальна частина узагальненої сферичної функції (функція Вігнера), визначеної в [11]. $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\phi$. ϑ_0 і ϕ_0 – визначають напрямки $\vec{\zeta}$ квазіімпульсу електрона в "деформованій" системі координат (6) до розсіяння, ϑ і ϕ – визначають напрямки вектора $\vec{q} = \vec{\xi} - \vec{\xi}'$, рівного зміні квазіімпульсу за розсіяння, $\chi = \pi - 2\theta$ – кут розсіяння, тобто, кут між $\vec{\xi}$ і $\vec{\xi}'$ (рис. 1).

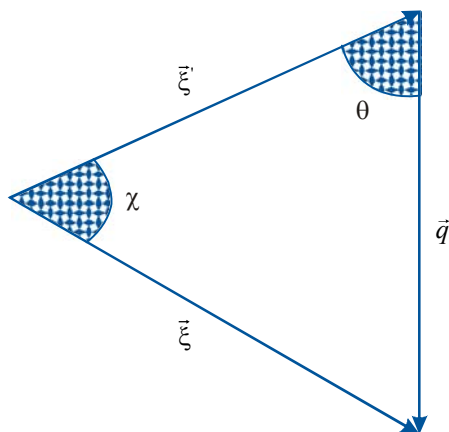


Рис. 1. Схематичне зображення кута розсіяння χ .

Коли ймовірність розсіяння в осях еліпсоїда мас не залежить від азимута вектора \vec{q} (від кута φ), то матриця $\|B_{jk}(pm)\|$ діагоналізується по p і по m :

$$B_{jk}(pm) = B_{jk}(p) \delta_{mp} \quad (18)$$

При цьому система (15) розпадається на незалежні системи з різними p :

$$\sum_k B_{jk}(p) X_{kp} = D_p \delta_{j1} \quad (19)$$

У відповідності з цим $W(\theta\vartheta\phi)$ в (17) не буде залежати від φ і отримаємо:

$$B_{jk}(pm) = B_{jk}(m) \delta_{mp} = \frac{\sqrt{2m_1 m_2 m_3 \varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3} \sum_{s_{\text{paired}}} \sqrt{\frac{(2j+1)(2k+1)(j-s)!(k-s)!}{(j+s)!(k+s)!}} \times \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \cos\theta W(\theta, \vartheta) P_j^s(\cos\theta) P_k^s(\cos\theta) P_{sm}^j(\cos\vartheta) P_{sm}^{*k}(\cos\vartheta) \times \delta_{mp} \quad (20)$$

Як видно з (17),

$$B_{jk}(pm) = B_{kj}^*(mp) \quad (21)$$

Користуючись явним виразом для функцій $P_{sm}^j(\cos\vartheta)$ [11], легко бачити з (20), що коефіцієнти $B_{jk}(m)$ (як дійсні) задовольняють умові

$$B_{jk}(m) = B_{kj}(m), \quad (22)$$

а, враховуючи (20), можна також записати

$$B_{jk}(m) = B_{jk}(-m). \quad (23)$$

2.2. Ітераційний спосіб визначення X_{lm}

Метод обчислення X_{lm} , який буде викладено нижче, можна ефективно використати для визначення X_{lm} із системи (19).

Нехай $B(X X)$ є квадратична форма змінних X_{lm} .

$$B(X X) = \sum_{jk} B_{jk} X_j X_k \quad (24)$$

(індекс m поки що опускаємо).

Уведемо позначення

$$A_i(X) = \sum_k B_{ik} X_k, \quad (25)$$

$$Z_1 = A_1(X), \quad Z_k = \begin{vmatrix} B_{11} & B_{13} & \dots & B_{1,2k-3} & A_1(X) \\ B_{31} & B_{33} & \dots & B_{3,2k-3} & A_3(X) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{2k-1,1} & B_{2k-1,3} & \dots & B_{2k-1,2k-3} & A_{2k-1}(X) \end{vmatrix}. \quad (26)$$

У відповідності з формулою Якобі

$$B(X X) = \sum_l \frac{Z_l^2}{\Delta_l \Delta_{l-1}}, \quad (27)$$

де Δ_l – визначник головного мінора " l " порядку матриці $\|B_{jk}\|$. Але в нашому випадку змінні X_{lm}

задовольняють системі (18), тому

$$A_l(X) = D, \quad A_{l>1} = 0, \quad B(X X) = D X_1. \quad (28)$$

Таким чином для X_{lm} одержимо із (27) наступний ряд

$$X_{lm} = D_m \sum_l \frac{\bar{Z}_{l-1}^2}{\Delta_l(m) \Delta_{l-1}(m)}, \quad (29)$$

де

$$\bar{Z}_{l-1}^{(m)} = \begin{vmatrix} B_{31}(m) & B_{33}(m) & \dots & B_{3,2l-3}(m) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{2l-1,1}(m) & B_{2l-1,3}(m) & \dots & B_{2l-1,2l-3}(m) \end{vmatrix}; \quad \bar{Z}_0 = 1. \quad (30)$$

Сума перших n членів ряду для X_{lm} є розв'язок системи (19), якщо покласти $X_{lm}=0$ за $l>n$. У цьому сенсі вказаний спосіб обчислення X_{lm} може бути названо ітераційним. Відмітимо, що ряд (29) при розгляді розсіяння на фонах і домішкових іонах швидко сходиться. Наприклад, за розсіяння

на іонізованих домішках у випадку найбільш сильної анізотропії (коли розсіяння відбувається в основному вперед і $m_1/m_3 \ll 1$) відношення перших чотирьох членів цього ряду таке: $1 : 0.72 : 0.015 : 0$. При цьому недиагональні елементи матриці $\|B_{jk}(m)\|$ не малі.

2.3. Розсіяння на іонізованих домішках

Будемо вважати діелектричну сталу ζ ізотропною і приймемо потенціал домішки у вигляді

$$V = \frac{e_0^2}{\zeta r} e^{-r/a}, \quad (31)$$

де e_0 – заряд електрона, a – радіус екранування, який у невідродженому випадку обчислюється за формулою

$$a^{-2} = \frac{4\pi e_0^2 n'}{\zeta kT}, \quad (32)$$

де $n' = n + (n + N_A)(1 - n - N_A/N_D)$. Тут n – концентрація електронів у зоні провідності, N_D і N_A концентрації донорів і акцепторів. Величина n' , згідно з Бруксом [12], враховує вплив компенсуючої домішки на екранування.

За цих умов у борнівському наближенні для матричного елемента переходу отримано

$$V_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{e_0^2}{\zeta} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}', \vec{r})} \frac{e^{-r/a}}{r} d\vec{r} = \frac{4\pi e_0^2}{\zeta} \frac{1}{(\vec{k}-\vec{k}')^2 + a^{-2}}. \quad (33)$$

Якщо виразити $(\vec{k}-\vec{k}')^2$ через кути θ , ϑ і ϕ (див. пояснення до (17)), отримаємо у випадку еліпсоїда обертання наступний вираз для ймовірності переходу:

$$W(\theta\vartheta\phi) = \frac{2\pi}{\hbar} N \left| V_{\vec{k}\vec{k}'} \right|^2 = \frac{\pi^3 e_0^4 N \hbar^3}{2 \varepsilon^2 m_3^2 \chi^2 \left[\left(\cos^2 \vartheta + \frac{m_1}{m_3} \sin^2 \vartheta \right) \cos^2 \theta + \gamma^2 \right]^2}, \quad (34)$$

де

$$\gamma^2 = \frac{\hbar^2}{8 a^2 m_3 \varepsilon}, \quad (35)$$

N – число іонізованих домішок в 1 см^3 , $m_1 = m_2 < m_3$.

Параметр γ^2 в області $5 \leq T \leq 300 \text{ К}$ і $10^{14} \leq N_D \leq 10^{17} \text{ см}^{-3}$ знаходиться в інтервалі $10^{-7} \leq \gamma^2 \leq 10^{-2}$. За таких малих γ^2 кутовий доданок у знаменнику (34) істотний, оскільки ймовірність розсіяння на деякий кут χ (кут розсіяння $\chi = \pi - 2\theta$) за реальних значень m_1/m_3 дуже сильно залежить від кута θ , тобто, від напрямку руху електрона.

Оскільки в нашому випадку $W(\theta\vartheta\phi)$ не залежить від ϕ , коефіцієнти $B_{jk}(pm) = B_{jk}(m) \delta_{pm}$ (див. (18)) – можна визначити X_{Im} за допомогою ряду (29). У граничному випадку малих, але скінчених γ^2 і $\frac{m_1}{m_3}$, одержимо

$$X_{10} = \frac{D_0}{\tilde{B}_{11}(0)} (1 + 0.72 + 0.015 + 0.00018 + \dots). \quad (36)$$

Значення $\tilde{B}_{jk}(m)$ для $m = 0.1$ наведено в табл. 1 і 2.

Таблиця 1

Значення коефіцієнтів $\frac{\tilde{B}_{jk}(0)}{\tilde{B}_{11}(0)}$ при яких j і k

j	k			
	1	3	5	7
1	1	3.44	6.74	10.7
3	3.44	28.2	59.2	96.0
5	6.74	59.2	169	287
7	10.7	96.0	287	576

Таблиця 2

Значення коефіцієнтів $\frac{\tilde{B}_{jk}(1)}{\tilde{B}_{11}(1)}$ при яких j і k

j	k		
	1	3	5
1	1	1.40	1.74
3	1.40	4.70	6.24
5	1.74	6.24	11.4

Для більших значень γ^2 і $\frac{m_1}{m_3}$, коли анізотропія менша, ряд (29), природно, сходиться ще

краще. Якщо скористатися формулою для оцінки, в яку підставимо $\frac{m_1}{m_3} = 0.052$ для *Ge* і $\frac{m_1}{m_3} = 0.196$ для *Si*, то другий член в (29) буде дорівнювати відповідно 0.38 і 0.15, а третій член $\cong 10^{-3}$ в обох випадках.

Аналогічно для X_{11} у граничному випадку малих, але скінчених γ^2 і m_1/m_3 , одержимо

$$X_{11} = \frac{D_1}{\tilde{B}_{11}(1)} (1 + 0.72 + 0.015 + \dots). \quad (37)$$

Для *Ge* і *Si* другий доданок у (37) буде дорівнювати 0.50 і 0.18 відповідно. Тому як у випадку X_{10} , так і у випадку X_{11} можна обмежитися двома членами ряду.

Обмежившись у (29) другим членом, матимемо

$$X_{1m} = D_m \chi_m, \quad (38)$$

де

$$\chi_m = \frac{1}{B_{11}(m)} \left[1 + \frac{B_{13}^2(m)}{B_{11}(m) B_{33}(m) - B_{13}^2(m)} \right], \quad (39)$$

причому $\chi_1 = \chi_{-1}$. Враховуючи (21) і (38), одержимо наступні вирази для компонент тензора часу релаксації:

$$\left. \begin{aligned} \tau_{\parallel} = \tau_{33} = \chi_0 &= \frac{1}{B_{11}(0)} (1 + g_0) \\ \tau_{\perp} = \tau_{11} = \chi_1 &= \frac{1}{B_{11}(1)} (1 + g_1) \end{aligned} \right\}, \quad (40)$$

де

$$g_m = \frac{B_{13}^2(m)}{B_{11}(m) B_{33}(m) - B_{13}^2(m)}. \quad (41)$$

В ізотропному випадку ($\frac{m_1}{m_3} = 1$) всі $B_{jk}(m) = 0$ за $j \neq k$ і формули (40) дають нам час релаксації, одержаний Бруксом і Херрінгом [12] і Дінглем [13]:

$$\tau^{-1} = \frac{\pi e_0^4 N}{\zeta^2 \sqrt{2 m^* \varepsilon^3}} \left(\ln \frac{1 + \gamma^2}{\gamma^2} - \frac{1}{1 + \gamma^2} \right). \quad (42)$$

Відмітимо, що всі коефіцієнти $B_{jk}(m)$ можуть бути обчислені точно і являють собою досить складні і громіздкі вирази. Однак, як виявилось, при обчисленні $B_{jk}(m)$ для *Ge* і *Si* можна виконати розклад за параметром $\alpha^2 = \gamma^2 \frac{m_3}{m_1}$ і опустити всі члени порядку α^2 і вище, оскільки в найбільш важливій для практики області $\gamma^2 \leq 10^{-2}$. Знайдені коефіцієнти $B_{jk}(m)$ можуть бути використані для обчислення поправки g_m за формулою (39) у випадках, коли розсіяння на домішкових іонах переважає над іншими механізмами розсіяння (сильно компенсовані зразки, низькі температури та ін.)

2.4. Розсіяння на акустичних фононах

На основі теорії потенціалу деформації [6] і результатів роботи [14] імовірність розсіяння для *Ge* і *Si* має вигляд

$$W(\vartheta) = \frac{2\pi k T C_1^2}{C_{11} \hbar} \left\{ 1 + \frac{2C_2 m_3 \cos^2 \vartheta}{C_1 (m_1 \sin^2 \vartheta + m_3 \cos^2 \vartheta)} + \frac{C_2^2 m_3^2 \cos^4 \vartheta}{C_1^2 (m_1 \sin^2 \vartheta + m_3 \cos^2 \vartheta)^2} + \frac{C_2^2 C_{11}' m_1 m_3 \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta}{C_1^2 C_{44}' (m_1 \sin^2 \vartheta + m_3 \cos^2 \vartheta)^2} \right\}, \quad (43)$$

де C_1 і C_2 – константи потенціалу деформації, C_{11}' і C_{44}' – усереднені пружні сталі, визначені в [14].

Як видно із (43), W не залежить від кута θ , а, отже, і від кута розсіяння. Коефіцієнти $B_{jk}(m)$ обчислюються за формулою

$$B_{jk}(m) = \frac{4m_1 \sqrt{2m_3 \varepsilon}}{(2\pi \hbar)^3} \sum_{s_{\text{напр}}} L_{jk}^s R_{jk}^s(m), \quad (44)$$

де

$$\left. \begin{aligned} L_{jk}^s &= 2 \sqrt{\frac{(j-s)!(k-s)!}{(j+s)!(k+s)!}} \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta P_j^{*s}(\cos \theta) P_k^s(\cos \theta) \\ R_{jk}^s(m) &= \int d\Omega \bar{P}_{sm}^j(\cos \vartheta) \bar{P}_{sm}^{*k}(\cos \vartheta) \end{aligned} \right\}, \quad (45)$$

$\bar{P}_{sm}^j(\cos \vartheta)$ – функції, нормовані на одиницю.

Матриця коефіцієнтів $B_{jk}(m)$ у цьому випадку дуже близька до діагональної, тому в ряду (29) для X_{1m} другий член уже можна опустити, оскільки він на два порядки менший від першого для Ge і Si.

Відповідні значення $B_{11}(m)$, згідно з (44) і (45), будуть мати вигляд

$$B_{11}(m) = \frac{1}{\tau_0} S_m, \quad (46)$$

де "ізотропний" час релаксації τ_0 :

$$\tau_0 = \frac{\pi C_{11}' \hbar^4}{k T C_1^2 \sqrt{2 m_1^2 m_3 \varepsilon}}, \quad (47)$$

$$\begin{aligned} S_0 &= 1 + \frac{2 C_2 m_3}{C_1 m_1 \beta^2} \left(1 - \frac{3}{\beta^2} + \frac{3}{\beta^3} b \right) + \frac{m_3 C_2^2}{m_1 C_1^2 \beta^4} \times \\ &\times \left\{ \frac{m_3}{m_1} \left(1 - \frac{6}{\beta^2} - \frac{3 m_1}{2 \beta^2 m_3} + \frac{15}{2 \beta^3} b \right) + \frac{C_{11}'}{C_{44}'} \left[2 + \frac{15}{2 \beta^2} - \frac{3 b}{2 \beta^3} (5 + 3 \beta^2) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (48)$$

$$\begin{aligned} S_1 &= 1 + \frac{C_2 m_3}{C_1 m_1 \beta^2} \left(2 - \frac{3}{\beta^2} + \frac{3 b m_3}{m_1 \beta^3} \right) + \frac{m_3 C_2^2}{m_1 C_1^2 \beta^4} \times \\ &\times \left\{ \frac{m_3}{m_1} \left(1 + \frac{15}{4 \beta^2} - \frac{3 b}{4 \beta^3} (5 + 3 \beta^2) \right) - \frac{C_{11}'}{4 C_{44}'} \left[13 + \frac{15}{\beta^2} - \frac{3}{\beta^3} (5 + 6 \beta^2 + \beta^4) b \right] \right\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Тут $\beta^2 = \frac{m_3 - m_1}{m_1}$, $b = \arctg \beta$.

Тензор часу релаксації має вигляд

$$\tau_{11} = \tau_{22} = \tau_{\perp} = \frac{1}{B_{11}(1)} = \frac{\tau_0}{S_1}; \quad \tau_{33} = \tau_{\parallel} = \frac{1}{B_{11}(0)} = \frac{\tau_0}{S_0}. \quad (50)$$

2.5. Змішане розсіяння

У випадку змішаного розсіяння коефіцієнти $B_{jk}(m)$ (внаслідок додавання ймовірностей переходу) будуть мати вигляд

$$B_{jk}(m) = B_{jk}^f(m) + B_{jk}^{ion}(m), \quad (51)$$

де $B_{jk}^f(m)$ і $B_{jk}^{ion}(m)$ – коефіцієнти, які відповідають розсіянню на одних фононах або іонах домішки. Другий член ряду (29) для X_{1m} (він був позначений як g_m) визначатиметься співвідношенням

$$g_m = \frac{(B_{13}^f(m) + B_{13}^{ion}(m))^2}{(B_{11}^f(m) + B_{11}^{ion}(m))(B_{33}^f(m) + B_{33}^{ion}(m)) - (B_{13}^f(m) + B_{13}^{ion}(m))^2}. \quad (52)$$

Оскільки матриця коефіцієнтів $\|B_{jk}^\Phi\|$ (як уже згадувалося вище) майже діагональна, то із (52) видно, що поправка g_m в цьому випадку набагато менша, ніж у випадку суто іонного розсіяння. Аналіз показує, що g_m за змішаного розсіяння порядку кількох відсотків для *Ge* і *Si* у всьому практично важливому інтервалі температур і концентрацій домішок. Тому у випадку змішаного розсіяння (а цей вид розсіяння практично трапляється дуже часто) досить в ряді (29) для X_{Im} обмежитися першим членом (лінійне наближення).

3. Використання ТАР для дослідження термоелектричних і термомагнітних явищ в анізотропних напівпровідниках

Оскільки теорія термоелектричних і термомагнітних явищ в рамках використаних тут припущень була опублікована в повному об'ємі окремим виданням [3], тут ми обмежимося декількома зауваженнями загального характеру, пов'язаних з її практичним використанням (при зіставленні її висновків з експериментом).

У рамках прийнятих у зонній теорії і ТАР припущень у цитованому виданні побудована загальна теорія Гальвані- і термомагнітних явищ для довільних за величиною (але не квантуючих) магнітних полів. При цьому кінетика електронних процесів у багатодолинних напівпровідниках розглядалася як за наявності, так і за відсутності ефектів захоплення електронів фононами.

Якісний і кількісний аналіз всієї сукупності розглянутих ефектів, як виявилось, вдається проводити до кінця, обмежуючись введенням всього лише двох, добре вимірюваних на досліді параметрів: параметра анізотропії рухливості $K = \mu_i / \mu_{||}$ і параметра анізотропії термоЕРС захоплення $M = \alpha_{||}^\Phi / \alpha_i^\Phi$, що характеризують окремо взятий ізоенергетичний еліпсоїд.

Використання одновісної пружної деформації (з накладанням на кристал і зміною деформуємого механічного напруження X у досить широких межах) забезпечує проведення аналізу досліджуваних явищ за різної кількості ефективно проявляючих себе ізоенергетичних еліпсоїдів: від одного (*n-Ge*, деформований у напрямку $\langle 111 \rangle$) до шести (*n-Si* – у недеформованому кристалі).

Існує, однак, багато напівпровідників, у яких ізоенергетичні поверхні мають форму не еліпсоїдів обертання, а форму трьохосьових еліпсоїдів (і навіть більш складну). У монографії [3], проведено також необхідні узагальнення теорії, придатної для опису кінетичних явищ і в цих (далеко не простих) випадках, які можна використовувати для зіставлення дослідних даних з теорією.

Висновки

1. Сформульовано основні положення теорії анізотропного розсіяння (ТАР) і приведено найбільш важливі формули цієї теорії у вигляді, зручному для практичного використання при зіставленні з дослідними даними.
2. З'ясовано можливості практичного використання ТАР при дослідженні термоелектричних і термомагнітних явищ у багатодолинних напівпровідниках типу *n-Si* і *n-Ge*.
3. Відмічено характерну особливість ТАР, а саме: її придатність для опису кінетики електронних процесів не тільки в області пригранично малих чи гранично великих (неквантуючих) магнітних

полів H , але також і в області проміжних магнітних полів (тобто, за $\mu H/c \approx 1$), в якій використання інших теорій не є ефективним

Література

1. Томчук П.М. Анизотропное рассеяние носителей тока в полупроводниках / П.М. Томчук // УФЖ. – 1968. – Т. 13, № 8. – С. 1366 – 1377.
2. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках / П.И. Баранский, И.С. Буда, И.Д. Даховский [и др.]. – К.: Наук. Думка, 1977. – 270 с.
3. Баранский П.И. Теория термоэлектрических и термомагнитных явлений в анизотропных полупроводниках П.И. Баранский, И.С. Буда, И.В. Даховский. – К.: Наук. думка, 1987. – 272 с.
4. Баранский П.И. Термоэлектрические и термомагнитные явления в многодолинных полупроводниках / П.И. Баранский, И.С. Буда, В.В. Савяк. – К.: Наук. думка, 1992. – 268 с.
5. Термоэлектрические и термомагнитные методы превращения энергии. Конспект лекций профессора А.Г. Самойловича / Л.Н. Вихор, Е.А. Охрем, А.А. Снарский. – Черновцы: Рута, 2006. – 228 с.
6. Херринг К. Проблемы физики полупроводников / К. Херринг, Э. Фогт. – М.: ИЛ, 1957. – 567 с.
7. Самойлович А.Г. Анизотропное рассеяние электронов на ионизированных примесях / А.Г. Самойлович, И.Я. Коренблит, И.В. Даховский // ДАН СССР. – 1961. – Т. 139, № 2. – С. 355 – 358.
8. Решение кинетического уравнения при анизотропном рассеянии электронов / А.Г. Самойлович, И.Я. Коренблит, И.В. Даховский [и др.] // ФТТ. – 1961. – Т. 3, № 10. – С. 2939 – 2952.
9. Анизотропное рассеяние электронов на ионизированных примесях и акустических фонах / А.Г. Самойлович, И.Я. Коренблит, И.В. Даховский // ФТТ. – 1961. – Т. 3, № 11. – С. 3285 – 3298.
10. Даховский И.В. Анизотропное рассеяние электронов в германии и кремнии / И.В. Даховский // ФТТ. – 1963. – Т. 5, № 8. – С. 2332 – 2338.
11. Гельфанд И.М. Представления группы вращения и группы Лоренца / И.М. Гельфанд, Р.А. Минлос, З.Я. Шапиро – М.: Физматгиз, 1958. – 367 с.
12. Брукс Г. Проблемы современной физики: Сб. пер. Вып. 8 / Г. Брукс. – М.: Изд-во Иностран. лит., 1957. – 216 с.
13. Dingle R.B. Scattering of electrons and holes by charged donors and acceptors in semiconductors / R.B. Dingle // Phil. Mag. Ser. 7. – 1955. – 46 (379). – P. 831 – 840.
14. Самойлович А.Г. Влияние анизотропии кристалла на тепловые колебания атомов в Ge и Si / А.Г. Самойлович, В.Д. Искра // ФТТ. – 1960. – Т. 2, № 11. – С. 2827 – 2833.

Надійшла до редакції 22.10.2012