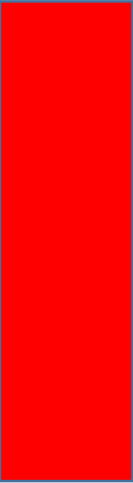


Materiały i przyrządy półprzewodnikowe



Wykład 6: Transport ładunku – równanie Boltzmann

Paweł Wójcik



Plan wykładu:

1. Równanie Boltzmannna
2. Przybliżenie liniowe
3. Wyraz związany z rozpraszaniem
4. Wyznaczanie czasu relaksacji

Funkcja rozkładu $f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t)$

Zauważmy, że przepływ prądu **nie jest stanem równowagowym** (do tej pory rozpatrywaliśmy procesy kwazi-równowagowe), a zatem w ogólnym przypadku, jeśli płynie prąd, rozkład nośników ładunku nie może być dany rozkładem Fermiego-Diraca, bo ten dotyczy cząstek w stanie równowagi termodynamicznej.

Zdefiniujmy więc funkcję rozkładu cząstek w przestrzeni fazowej $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ czy $f(\mathbf{r}, \mathbf{V})$.

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{V}$$

Z definicji jest to liczba cząstek znajdujących się w przestrzeni $(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r})$ o prędkościach $(\mathbf{V}, \mathbf{V} + d\mathbf{V})$ w czasie t . Przykładem takiego rozkładu jest rozkład Maxwella określający funkcje rozkładu prędkości cząstek w jednorodnym gazie doskonałym.

A zatem

$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{V} = N \quad \leftarrow \text{Całkowita liczba cząstek}$$

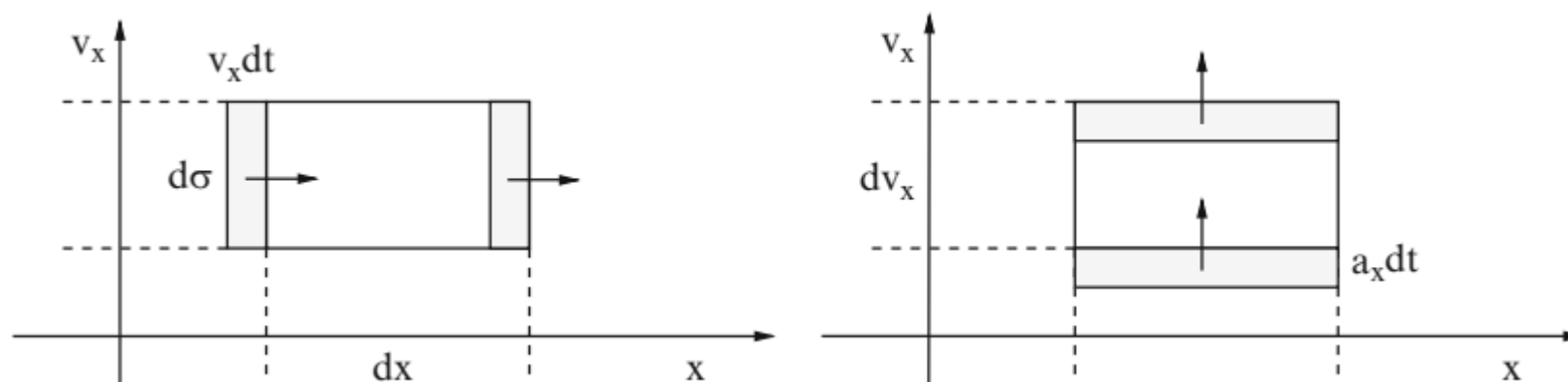
$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t) d\mathbf{V} = n(\mathbf{r}, t) \quad \leftarrow \text{Gęstość cząstek}$$

Wartość oczekiwana dowolnej wielkości A która zależy od $\mathbf{r}$ i $\mathbf{V}$

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{V} A f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t)}{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{V} f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t)}$$

Równanie Boltzmanna

Spróbujmy wyprowadzić równanie opisujące dynamikę funkcji rozkładu $f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t)$. W tym celu ograniczmy się jedynie do jednej z osi, przykładowo x , i rozpatrzmy zmianę funkcji rozkładu w elemencie objętości $(x, x + dx) \times (V_x, V_x + dV_x)$



Liczba cząstek które wpływają do elementu objętości dx z lewej strony, w czasie dt

$$f(x, V_x) V_x dt d\sigma$$

Liczba cząstek które wypływają z elementu objętości dx z prawej strony, w czasie dt

$$f(x + dx, V_x) V_x dt d\sigma$$

A zatem całkowita zmiana liczby cząstek w elemencie objętości dx

$$(\delta N)_x = f(x, V_x) V_x dt d\sigma - f(x + dx, V_x) V_x dt d\sigma$$

Równanie Boltzmanna

Przekształcając algebraicznie i korzystając z definicji funkcji rozkładu

$$(\delta f(x, V_x) dx d\sigma)_x = -V_x \frac{f(x + dx, V_x) - f(x, V_x)}{dx} dx dt d\sigma$$

A zatem

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_x = -V_x \frac{\partial f}{\partial x}$$

Postępując analogicznie z kierunkiem V_x z tą różnicą, że wielkością zmieniającą prędkość jest przyspieszenie, otrzymujemy

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{V_x} = -a_x \frac{\partial f}{\partial V_x}$$

Stąd ostatecznie dodając oba wyrazy i przechodząc do przestrzeni 3D

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{V}} f + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$$

Dodatkowy wyraz związany ze zmianą liczby cząstek w elemencie objętości przestrzeni fazowej, spowodowanej rozpraszaniem (kolizjami).

Równanie Boltzmanna

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{V}} f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$$

Równanie Boltzmanna dla gazu elektronów

Równanie Boltzmanna zapisane w przestrzeni $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$$

w półprzewodnikach (ciele stałym) kwazi-pęd związany jest w wektorem falowym

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$$

A zatem

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rightarrow f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \quad \text{gdzie} \quad f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{k} \left\{ \begin{array}{l} \text{liczba cząstek znajdujących się w przestrzeni} \\ (\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}) \text{ mających wektor falowy w przedziale} \\ (\mathbf{k}, \mathbf{k} + d\mathbf{k}), \text{ w czasie } t \end{array} \right.$$

z normalizacją

$$\frac{2}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{k} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = N \qquad \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = n(\mathbf{r})$$

Stąd

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$$

**Równanie Boltzmanna
dla gazu elektronowego**

Ruchliwość i przewodnictwo – przybliżenie liniowe

Równanie Boltzmanna dla gazu elektronowego

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$$

Dla układu jednorodnego w stanie ustalonym (przepływ prąd), mamy

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad \text{oraz} \quad \nabla_{\mathbf{r}} f = 0$$

A zatem otrzymujemy

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} \longrightarrow \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$$

Ale pochodna po wektorze falowym

$$\frac{\partial f}{\partial k_x} = \frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}}} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} = \hbar \frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}}} V_{g,x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}}} \mathbf{F} \cdot \mathbf{V}_g = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$$

Ruchliwość i przewodnictwo – przybliżenie liniowe

Zastosujmy przybliżenie czasu relaksacji zgodnie z którym wyraz związany z rozpraszaniem

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = - \frac{f - f_0}{\tau}$$

rozkład równowagowy – w przypadku gazu elektronowego **rozkład Fermiego -Diraca**

Jeżeli założymy, że do układu przyłożono pole elektryczne

$$\mathbf{F} = q\mathcal{E}$$

Otrzymujemy

$$\frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}}} q\mathcal{E} \cdot \mathbf{V}_g = - \frac{f - f_0}{\tau} \quad \longrightarrow \quad f = f_0 - q\tau \frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}}} \mathcal{E} \cdot \mathbf{V}_g$$

W ramach przybliżenia liniowego zakładamy, że

$$f \approx f_0 - q\tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \mathcal{E} \cdot \mathbf{V}_g$$

Założenie transportu linowego

Zauważmy, że w ogólnym przypadku rozwiązanie różniczkowo-całkowego równania Boltzmanna jest niezmiernie skomplikowane. Aby tego dokonać posługujemy się komputerami i odpowiednimi metodami numerycznymi. W tym zadaniu bardzo dobrze sprawdzają się metody Monte Carlo.

Ruchliwość i przewodnictwo – przybliżenie liniowe

Z definicji, prąd

$$\mathbf{j} = n_q q \langle \mathbf{V}_g \rangle$$

← prędkość dryftu

Średnia prędkość grupowa

$$\langle \mathbf{V}_g \rangle = \frac{\int \mathbf{V}_g f d\mathbf{k}}{\int f d\mathbf{k}}$$

gdzie f w ramach przybliżenia linowego

$$f \approx f_0 - q\tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{V}_g$$

Mianownik występujący przy obliczaniu wartości średniej

funkcja nieparzysta względem $\mathbf{k}$ bo $E_{\mathbf{k}}$ parzyste względem $\mathbf{k}$

$$\int f d\mathbf{k} = \int \left[f_0 - q\tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{V}_g \right] d^3k = \int \left[f_0 - q\tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \frac{1}{\hbar} \overbrace{\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}} \right] d^3k = \int f_0 d^3k$$

Poza tym

funkcja parzysta względem $\mathbf{k}$, ponieważ obie wielkości τ i f_0 zależą tylko od $E_{\mathbf{k}}$

$$\frac{2}{(2\pi)^3} \int f_0 d^3k = n_q$$

Ruchliwość i przewodnictwo – przybliżenie liniowe

Licznik występujący przy obliczaniu wartości średniej

$$\int \mathbf{V}_g f d^3 k = \int \left[f_0 - q\tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{V}_g \right] \mathbf{V}_g d^3 k = -q \int \left[\tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{V}_g \right] \mathbf{V}_g d^3 k$$

Iloczyn jest funkcją nieparzystą względem $\mathbf{k}$

Stąd średnia prędkość grupowa (prędkość dryftu)

$$\langle \mathbf{V}_g \rangle = -\frac{q}{4\pi^3 n_q} \int \left[\tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{V}_g \right] \mathbf{V}_g d^3 k$$

Jeśli założymy, że pole elektryczne przyłożone jest w kierunku x

$$\boldsymbol{\mathcal{E}} = (\mathcal{E}_x, 0, 0)$$

mamy

$$\langle V_{gx} \rangle = -\frac{q}{4\pi^3 n_q} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} V_{g,x}^2 \mathcal{E}_x d^3 k$$

Ruchliwość i przewodnictwo – przybliżenie liniowe

Korzystając z definicji na ruchliwość

$$\langle V_{gx} \rangle = \mu \mathcal{E}_x$$

$$\mu = -\frac{q}{4\pi^3 n_q} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} V_{g,x}^2 d^3 k$$

Ponieważ f_0 to rozkład Fermiego-Diraca

$$f_0 = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - E_F)} + 1} \longrightarrow \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} = -\frac{\beta e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - E_F)}}{[e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - E_F)} + 1]^2} = -\beta f_0(1 - f_0)$$

Otrzymujemy

$$\mu = \frac{q\beta}{4\pi^3 n_q \hbar^2} \int \tau(E_{\mathbf{k}}) f_0(1 - f_0) (\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}})_x^2 d^3 k$$

Wzór ogólny na ruchliwość

Zauważmy, że czas relaksacji również zależy od energii (wektora falowego) !!!

Ruchliwość i przewodnictwo – przybliżenie liniowe

Dla parabolicznej relacji dyspersji

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_q^*} \longrightarrow (\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}})_x = \frac{\hbar^2}{m_q^*} k_x$$

Ponieważ f_0 to rozkład Fermiego-Diraca

$$\mu = \frac{q\hbar^2 \beta}{4\pi^3 n_q m_q^{*2}} \int \tau(E_{\mathbf{k}}) f_0(1 - f_0) k_x^2 d^3 k$$

Ponieważ założona relacja dyspersji jest izotropowa, podobne równania można napisać dla kierunku y, z, a następnie dodając je do siebie otrzymujemy (zważmy, że w przypadku anizotropowej relacji dyspersji należy posługiwać się tensorem masy efektywnej, a zatem ruchliwość również będzie miała formę tensora)

$$\mu = \frac{q\hbar^2 \beta}{12\pi^3 n_q m_q^{*2}} \int \tau(E_{\mathbf{k}}) f_0(1 - f_0) k^2 d^3 k$$

Przechodząc do współrzędnych sferycznych, całkując po kącie oraz przechodząc do zmiennej jako energii, mamy

$$\mu = \frac{q\beta}{3\pi^2 n_q m_q^*} \left(\frac{2m_q^*}{\hbar^2} \right)^{(3/2)} \int \tau(E) f_0 E^{3/2} dE$$

Ruchliwość i przewodnictwo – przybliżenie liniowe

Jeżeli zdefiniujemy sobie

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int \tau(E) f_0 E^{3/2} dE}{\int f_0 E^{3/2} dE}$$

Wówczas

$$\mu = \frac{q\beta}{3\pi^2 n_q m} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \langle \tau \rangle \int f_0 E^{3/2} dE$$

Jeśli założymy, że rozkład f_0 może być przybliżony rozkładem Boltzmannia $f_0 = K e^{-\beta(E-E_F)}$

$$\int f_0 E^{3/2} dE = \frac{3\sqrt{\pi}}{4\beta^{5/2}} K e^{\beta E_F}$$

$$n_q = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_q^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int f_0 E^{1/2} dE = \frac{1}{4(\pi\beta)^{3/2}} \left(\frac{2m_q^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} K e^{\beta E_F}$$

Stąd po wstawieniu

$$\mu = \frac{e\langle \tau \rangle}{m_q^*}$$

Jest to **uogólnienie modelu Drudego**, w którym zakłada się stały czas relaksacji, który nie zależy od energii. Jak widzimy w ogólnym przypadku musimy policzyć wartość średnią czasu relaksacji po energii.

Rozpraszanie i czas relaksacji

Zauważmy, że w półprzewodnikach średni czas pomiędzy procesami rozpraszania τ zależy od energii i powinien być wyznaczony dla danego procesu rozpraszania, tj. rozpraszanie na zjonizowanej domieszce czy drganiach sieci krystalicznej.

Elektrony w materiale półprzewodnikowym opisane są przez stany Blocha $|n, \mathbf{k}\rangle$. A zatem w wyniku rozpraszania dochodzi do przeskoku elektronu ze stanu $|n, \mathbf{k}\rangle$ do stanu $|n', \mathbf{k}'\rangle$. Dla ułatwienia założymy, że mamy rozpraszanie wewnątrzpasmowe tzn. $n = n'$, a wielkość $W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$ określa częstość procesów rozpraszania pomiędzy stanami $|n, \mathbf{k}\rangle$ i $|n, \mathbf{k}'\rangle$. Wówczas wyraz związany z rozpraszaniem

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = - \int \{ W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') f(\mathbf{k})(1 - f(\mathbf{k}')) - W(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}) \underbrace{f(\mathbf{k}')(1 - f(\mathbf{k}))}_{\text{wyraz uwzględniający zakaz Pauliego}} \} d^3 k'$$

wyraz uwzględniający zakaz Pauliego

W stanie równowagi rozkład $f(k)$ nie zmienia się a zatem

$$W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') f_0(\mathbf{k})(1 - f_0(\mathbf{k}')) - W(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}) f_0(\mathbf{k}')(1 - f_0(\mathbf{k})) = 0 \quad (*)$$

Stąd

$$\frac{W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')}{W(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k})} = \frac{f_0(\mathbf{k}')(1 - f_0(\mathbf{k}))}{f_0(\mathbf{k})(1 - f_0(\mathbf{k}'))}$$

Rozpraszanie i czas relaksacji

Wyraz związany z rozpraszaniem możemy uprościć, jeżeli założymy przybliżenie linowe stosowane wcześniej

$$f = f_0 - q\tau \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{V}_g \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} = f_0 - \phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} \quad \text{gdzie} \quad \phi(\mathbf{k}) = q\tau \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{V}_g$$

Wówczas podstawiając i korzystając z warunku (*)

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = & \int \left\{ W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') \left[\phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial E_{\mathbf{k}}} [1 - f_0(\mathbf{k}')] - \phi(\mathbf{k}') \frac{\partial f_0(\mathbf{k}')}{\partial E_{\mathbf{k}'}} f_0(\mathbf{k}) \right] \right. \\ & \left. + W(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}) \left[\phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial E_{\mathbf{k}}} f_0(\mathbf{k}') - \phi(\mathbf{k}') \frac{\partial f_0(\mathbf{k}')}{\partial E_{\mathbf{k}'}} [1 - f_0(\mathbf{k})] \right] \right\} d^3 k' \end{aligned}$$

Wykorzystując wzór na pochodna rozkładu Fermeigo-Diraca i ponownie korzystając z warunku (*)

$$\frac{\partial f_0}{\partial E_{\mathbf{k}}} = -\beta f_0(1 - f_0)$$

otrzymujemy

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = -\beta \int W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') [\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}')] f_0(\mathbf{k}) [1 - f_0(\mathbf{k}')] d^3 k'$$

Rozpraszanie i czas relaksacji

Następnie korzystając z faktu, że

$$W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')[1 - f_0(\mathbf{k}')] = W(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k})[1 - f_0(\mathbf{k})] = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')[1 - f_0(\mathbf{k})]$$

otrzymujemy

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = -\beta \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')[\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}')]f_0(\mathbf{k})[1 - f_0(\mathbf{k})]d^3k'$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial E_{\mathbf{k}}} \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')[\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}')]d^3k'$$

Rozważmy dwa rodzaje procesów, dla których można zdefiniować czas relaksacji:

1. Rozpraszanie elastyczne lub nieelastyczne, dla którego $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ jest parzystą funkcją $\mathbf{k}'$
2. Rozpraszanie elastyczne z izotropową relacją dyspersji oraz funkcją $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, która zależy tylko od kąta pomiędzy $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$

Rozpraszanie i czas relaksacji

1. Rozpraszanie elastyczne lub nieelastyczne, dla którego $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ jest parzystą funkcją $\mathbf{k}'$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial E_{\mathbf{k}}} \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d^3 k' = -(f - f_0) \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d^3 k'$$

$$\frac{1}{\tau(E_{\mathbf{k}})} = \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d^3 k'$$

2. Rozpraszanie elastyczne z izotropową relacją dyspersji oraz funkcją $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, która zależy tylko od kąta pomiędzy $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$

$$\phi(\mathbf{k}) = q\tau(E_{\mathbf{k}})\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \frac{\hbar\mathbf{k}}{m_q^*} = \chi(\mathbf{k}) \cdot \frac{\hbar\mathbf{k}}{m_q^*}$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m_q^*} \cdot \chi(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial E_{\mathbf{k}}} \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - \cos \theta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}] d^3 k'$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = -(f - f_0) \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - \cos \theta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}] d^3 k' \longrightarrow \frac{1}{\tau(E_{\mathbf{k}})} = \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - \cos \theta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}] d^3 k'$$

Rozpraszanie i czas relaksacji

Prawdopodobieństwo przejść $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ obliczamy korzystając ze **złotej reguły Fermiego**

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | H_{int} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}) g(\mathbf{k}')$$

Hamiltonian zaburzenia, które powoduje rozpraszanie

W przypadku materiałów półprzewodnikowych istotne znaczenie odgrywają:

(dokładne wyprowadzenie w „Semiconductor Physics and Applications”, M. Balkanski and R.F. Wallis)

1. Rozpraszania na zjonizowanych domieszkach

$$\frac{1}{\tau(E_{\mathbf{k}})} = \frac{\pi n_I Z^2 e^4}{\sqrt{2m_q^*} (4\pi\epsilon_0\epsilon)^2 E_{\mathbf{k}}^{3/2}} \left[\log \left(1 + \frac{8m_q^* E_{\mathbf{k}}}{\hbar^2 q_I^2} \right) - \frac{1}{1 + (\hbar^2 q_I^2 / 8m_q^* E_{\mathbf{k}})} \right] \longrightarrow \mu \sim \frac{T^{3/2}}{n_I}$$

2. Rozpraszanie na drganiach sieci krystalicznej (fonony)

$$\frac{1}{\tau(E_{\mathbf{k}})} = \frac{C_1^2 k_B T (2m_q^*)^{3/2}}{4\pi \hbar^4 \rho c_l^2} E_{\mathbf{k}}^{1/2} \longrightarrow \mu \sim T^{-3/2}$$



Najważniejsze informacje z wykładu - podsumowanie

- Procesy transportu w ujęciu kwazi-klasycznym mogą być opisane równaniem Boltzmann dla gazu elektronów (dziur)
- Zastosowanie prostego przybliżenia liniowego w celu rozwiązania równania Boltzmann pozwala na uzyskanie analitycznych wzorów na przewodność oraz ruchliwość ładunków w materiałach półprzewodnikowych
- Ruchliwość nośników zależy od średniego czasu życia ładunku pomiędzy procesami rozpraszania (czas relaksacji)
- Czas relaksacji możemy wyznaczyć korzystając z wyprowadzeń kwantowo-mechanicznych dla różnych procesów rozpraszania
- W półprzewodnikach najbardziej istotne są rozpraszanie na zjonizowanych domieszkach oraz na drganiach sieci krystalicznej (fonony)
- Pełne rozwiązanie równania Boltzmann nie jest proste i wymaga zastosowania metod numerycznych m.in. metod Monte Carlo.