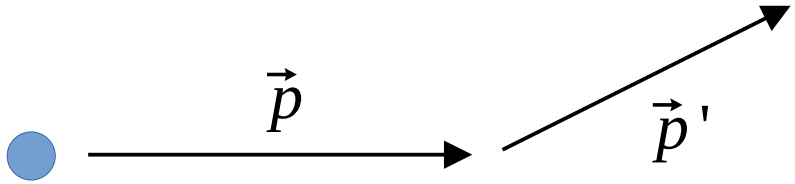
Рассеяние носителей заряда. Вероятность рассеяния в квантовой механике.

Рассеяние – случайное изменение квазиимпульса носителя заряда. Причина рассеяния – случайное отклонения потенциальной энергии от периодической функции координат, которой она является в идельном кристалле



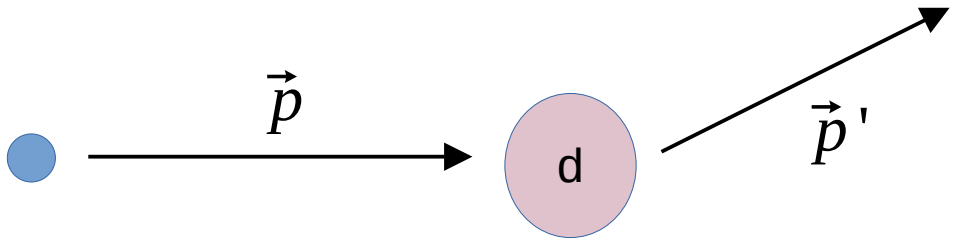
Вероятность перехода из состояния l в состояние l’ в единицу времени:

$$W(l,l') = \frac{2\pi}{\hbar}\left|H'_{ll'}\right|^2 \delta\left(E_l - E_{L'}\right)$$

$$\hat{H}' = \hat{H} - \hat{H}_0 \qquad l = (\vec{p},\ldots) \qquad l' = (\vec{p}\,',\ldots)$$

$\hat{H}_0$ – оператор Гамильтона для носителя заряда в идеальном кристалле

Рассеяние носителей заряда на статических дефектах.



$$\hat{H}' = U_d(\vec{r}) - \textit{потенциальная энергия, обусловленная дефектом}$$

Пример: заряженные примеси и дефекты с зарядом *Ze*:

$$W(\vec{p},\vec{p}') = \frac{2\pi}{\hbar^4} N \left(\frac{Z e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon}\right)^2 \frac{\delta\left(E(\vec{p}) - E(\vec{p}')\right)}{\left[(\vec{p}-\vec{p}')^2 + r_s^{-2}\right]^2}$$

N – концентрация заряженных дефектов

$\varepsilon_0, \varepsilon$ – электрическая постоянная, диэлектрическая проницаемость

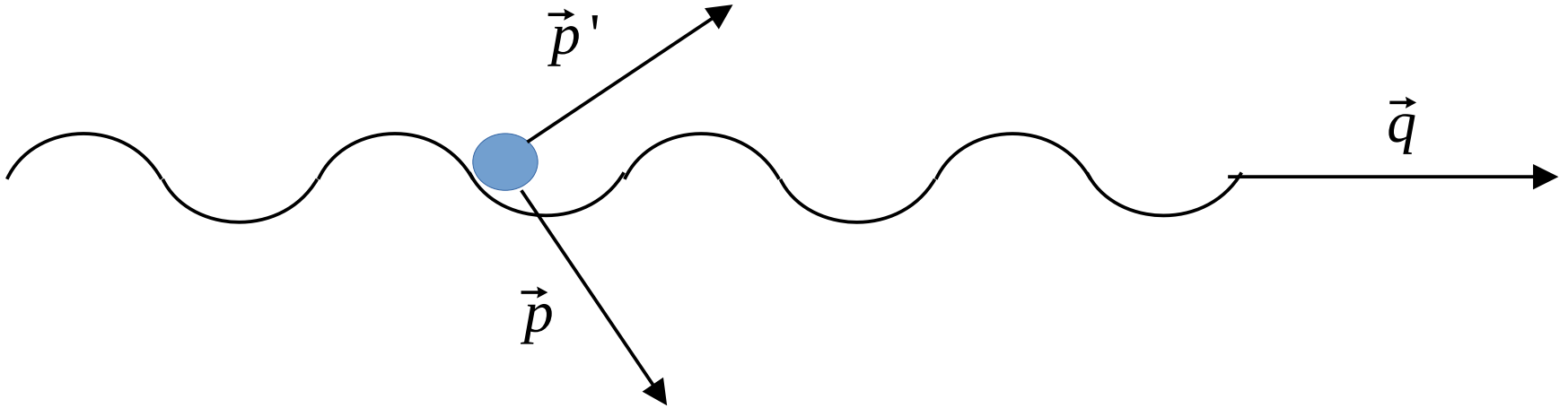
r_s – длина экранирования

$$\varphi = \frac{Z e}{4\pi\,\varepsilon_0 \varepsilon\, r} \exp\left(-\frac{r}{r_s}\right)$$

Рассеяние носителей заряда на фононах.

Фононы – кванты (квазичастицы) коллективных (нормальных) колебаний атомов в кристаллической решётке.

Пример: акустические фононы в длинноволновом приближении – кванты упругих волн в кристалле. При движении такой волны изменяется периодически изменяется энергия электронов (дырок) в результате у электрона (дырки) изменяется квазиимпульс.



Для рассеяния должнв быть простанственная синхронность между волной электрона до и после рассеяния и волной фонона, из этого следует закон сохранения квазиимпульса при пассеянии:

$$\vec{p}\,' = \vec{p} \pm \hbar\,\vec{q} + \hbar\,\vec{g}$$

Кроме этого дельта-функция в вероятности перехода приводит к закону сохранения энергии::

$$E\left(\vec{p}\,'\right) = E\left(\vec{p}\right) \pm \hbar\,\omega\left(\vec{q}\right)$$

Неравновесная функция распределения в приближении времени релаксации.

В ряде важных случаев уравнение Больцмана может быть записан в виде::

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\left(\nabla_p f\left(-e\vec{E}-e[\vec{\upsilon}\,\vec{B}]\right)\right)+\nabla f\,\vec{\upsilon}=-\frac{f-f_0}{\tau}=-\frac{f_1}{\tau}$$

$\tau-$*время релаксации квазиимпульса*

В этом случае решение уравнения Больмана в стационарном случае методом последовательных приближений, в первом приближении:

$$f=f_0+e\vec{E}\tau\nabla_{\vec{p}}f_0+\tau\nabla f_0\vec{\upsilon}\qquad\nabla_{\vec{p}}f_0=\frac{\partial f_0}{\partial E}\vec{\upsilon}$$

Магнитное поле появляется в следующем приближении

$$f=f_0+e\vec{E}\tau\nabla_{\vec{p}}f_0+\frac{e^2E\tau^2}{m}\frac{\partial f_0}{\partial E}[\vec{\upsilon}\,\vec{B}]+\tau\nabla f_0\vec{\upsilon}$$

Подвижность носителей заряда. Длина свободного пробега.

В постоянном электрическом поле за время релаксации квазиимпульса квазиимпульс и средняя скорость носителя заряда приобретают стационарное значение. По определению дрейфовой подвижности:

$$\vec{\upsilon}_d \equiv \mu_d \vec{E}$$

При возможности ввести время релаксации квазиимпульса:

$$\mu_d = \frac{e\tau}{m}$$

Дли свободного пробега – среднее расстояние, которое проходит носитель заряда за время релаксации квазиимпульса:

$$l = \upsilon\tau$$

При эффективном рассеянии длина свободного пробега – среднее рассояние которое носитель заряда движется без рассеяния

Вычисление электропроводности с помощью неравновесной функции распределения.

Если неравновесная функция распределения известна, то можно вычислить плотность тока:

$$\vec{j} = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int_{BZ} f \vec{v} \, d^3 p$$

По определению электропроводности:

$$\vec{j} \equiv \sigma \vec{E}$$

В случае когда можно ввести время релаксации квазиимпульса:

$$\vec{j} = -\vec{E} \frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_{BZ} \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \upsilon^2 d^3 p$$

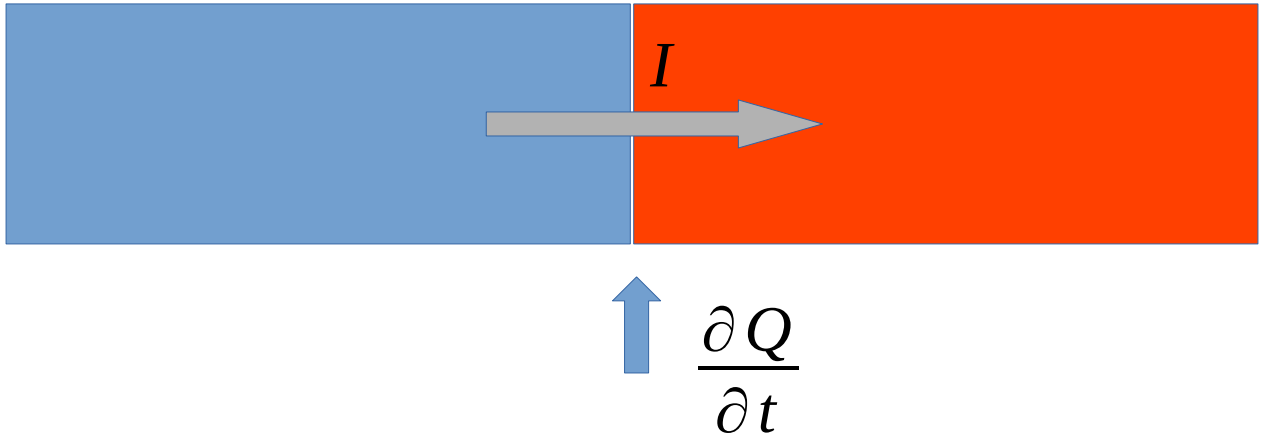
$$\sigma = -\frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_{BZ} \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \upsilon^2 d^3 p$$

Перенос энергии носителями заряда. Термоэлектрические явления

Эффект Зеебека: Между точкками с разной температурой в проводнике возникает разность потенциалов или протекает ток, если цепь замкнута.

$$\alpha = \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{T_1 - T_2}$$

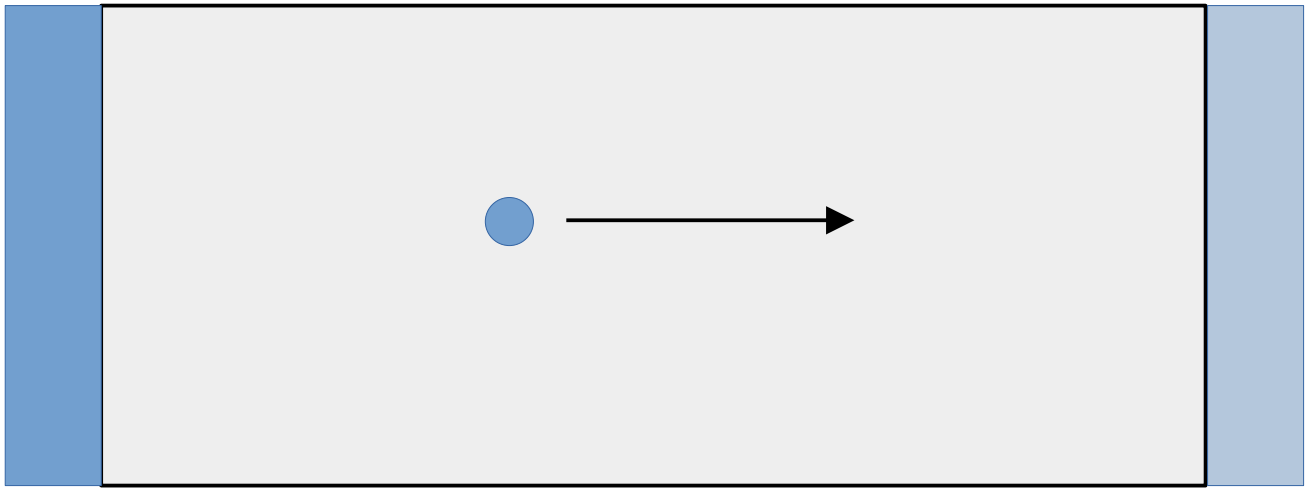
Эффект Пельтье: Носители заряда переносят энергию. Поэтому при протекании стационарного тока через контакт двух материалов поглощается или выделяется тепло



$$\frac{\partial Q}{\partial t} = (\Pi_1 - \Pi_2) I$$

Перенос заряда в баллистическом режиме.

Носитель заряда пролетает проводник без рассеяния



f_{01} f_{02}

$$I = I_+ - I_- = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} S \int_{BZ} f_{01} \upsilon_x d^3 p - \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} S \int_{BZ} f_{02} \upsilon_x d^3 p$$

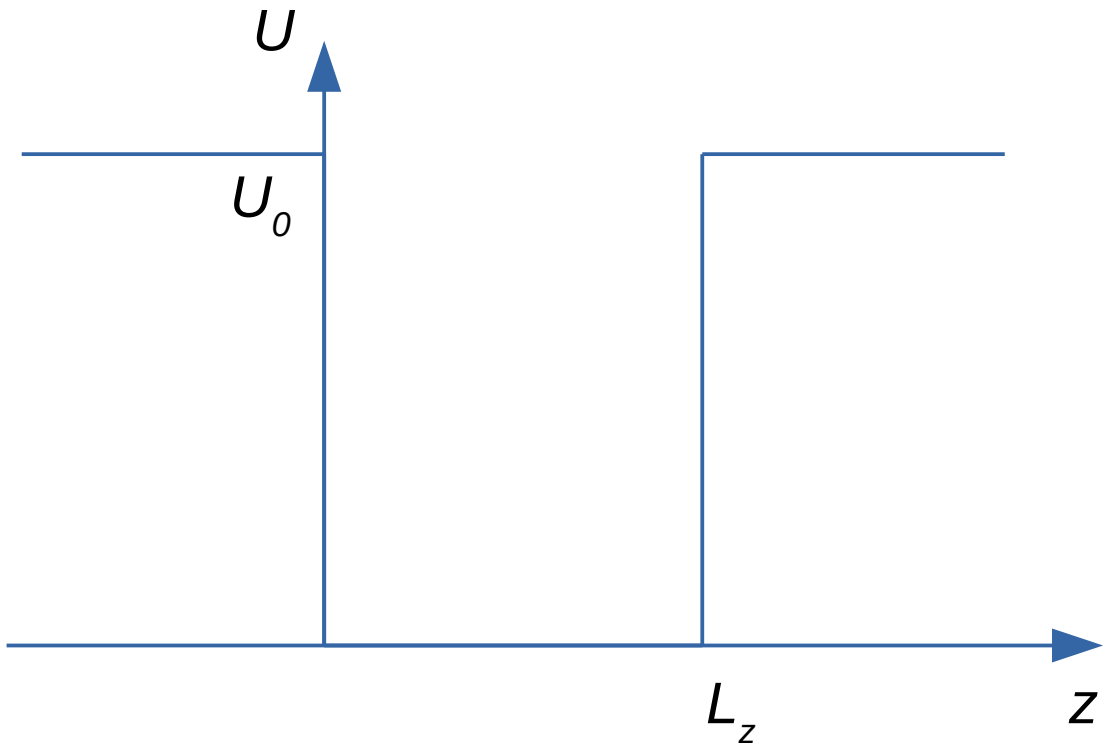
Размерное квантование. Модель потенциального ящика с бесконечными стенками.

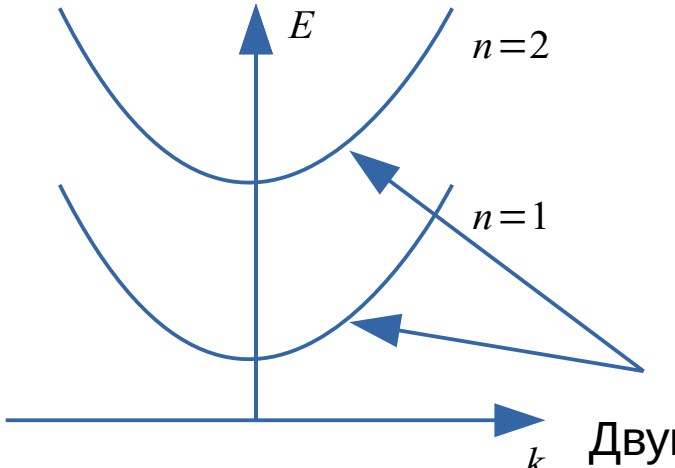
$$U(x,y,z)=\begin{cases} 0, & 0\le z\le L_z \\ U_{0,} & z<0, z>L_z \end{cases}$$

$$U_0 \to \infty$$

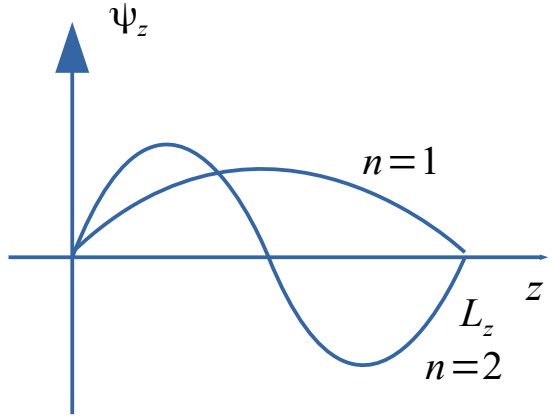
$$\psi_z=\begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L_z}}\sin\left(\frac{\pi n z}{L_z}\right), & 0\le z\le L_z \\ 0, & z<0, z>L_z \end{cases}$$

$$E=\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(k_x^2+k_y^2\right)+\frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m_e L_z^2},\ n=1,2,3\ldots$$



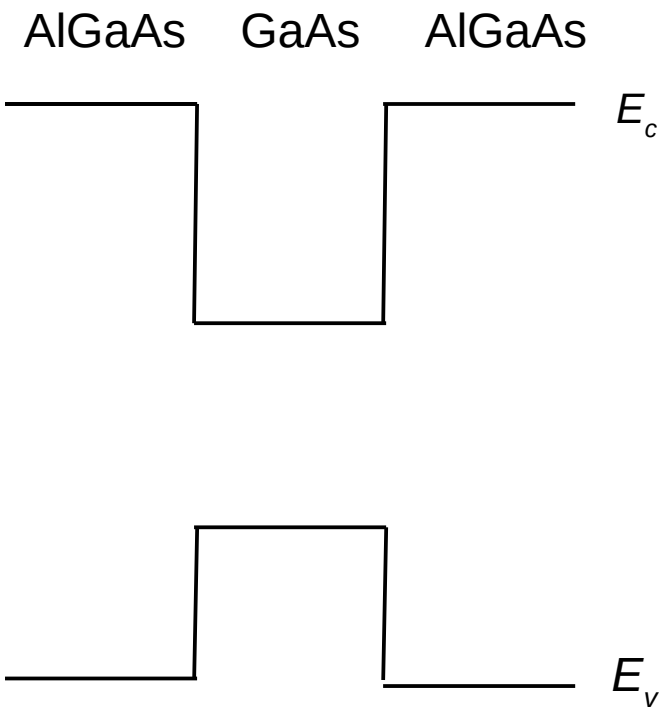


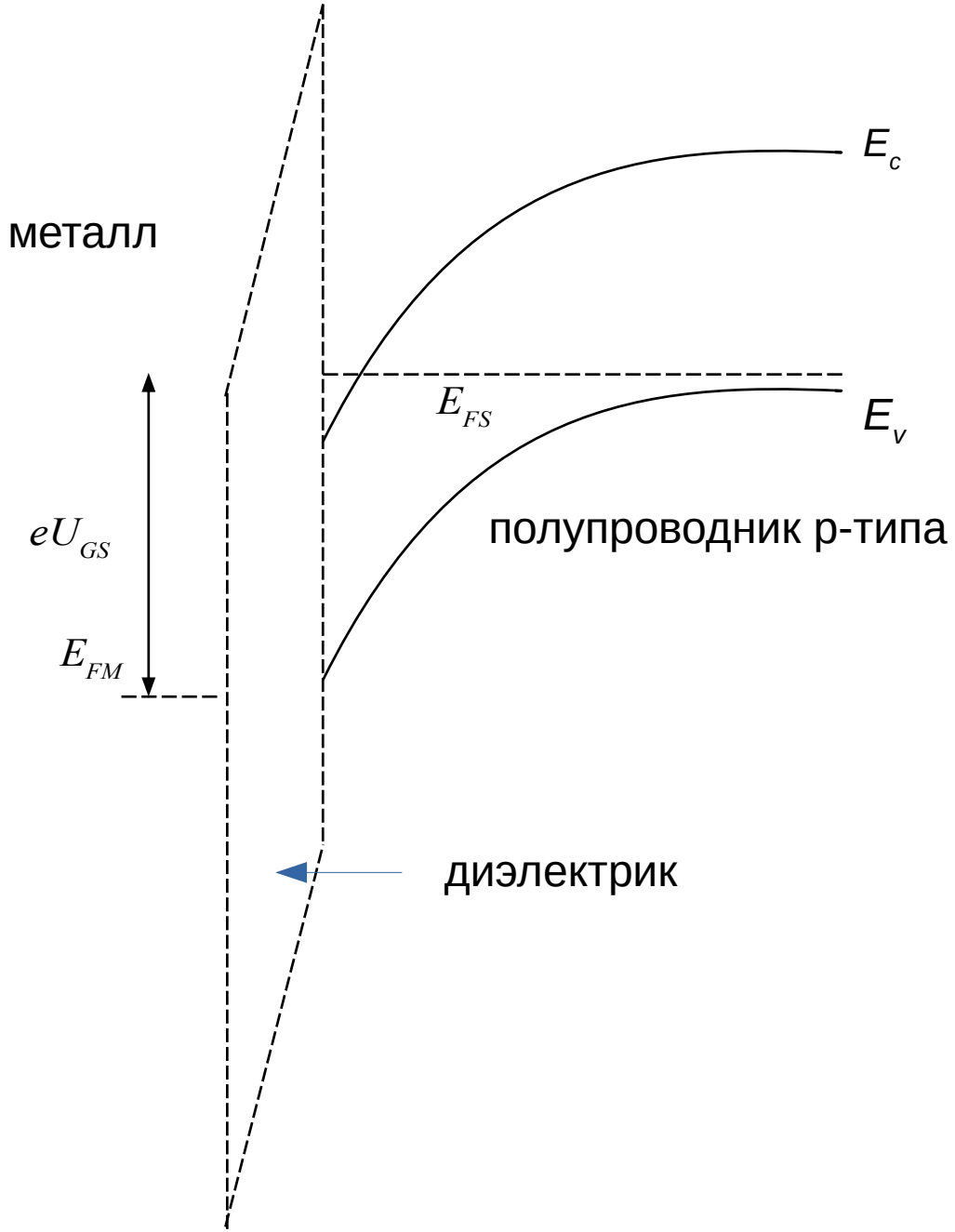
Двумерные подзоны



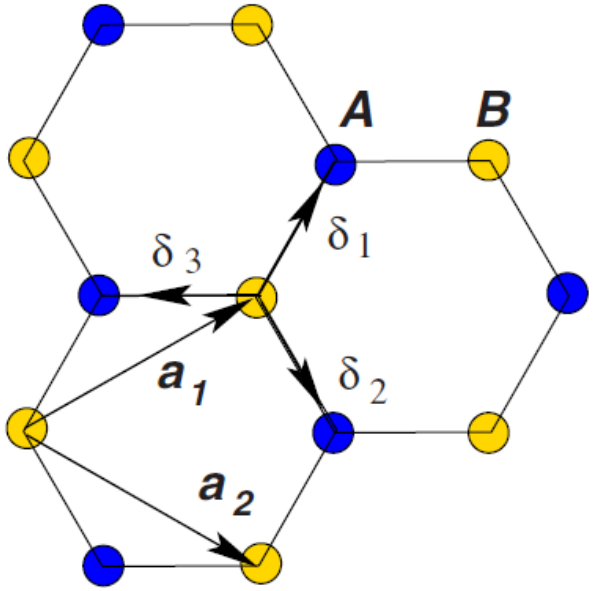
Целое число полуволн в структуре

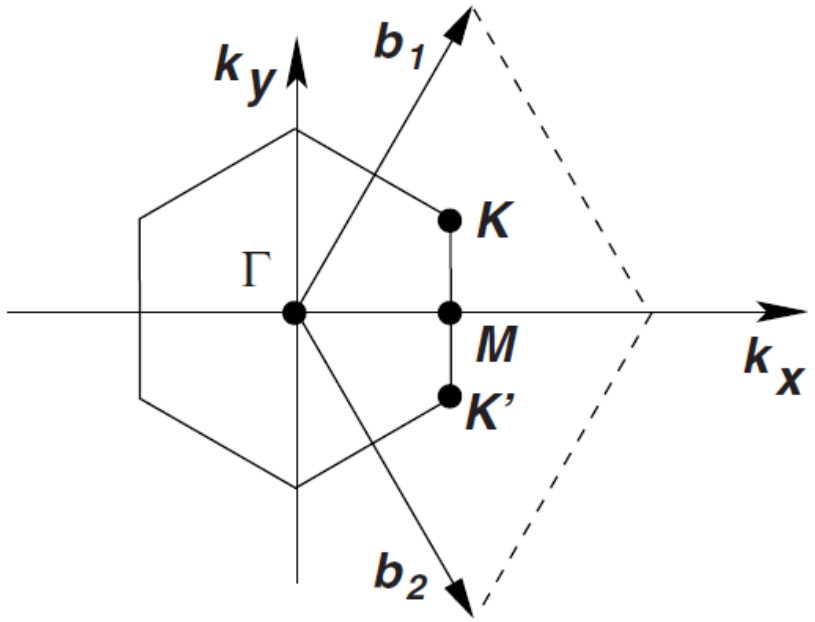
Двумерные структуры. Квантовые ямы. Структуры металл-диэлектрик- полупроводник.

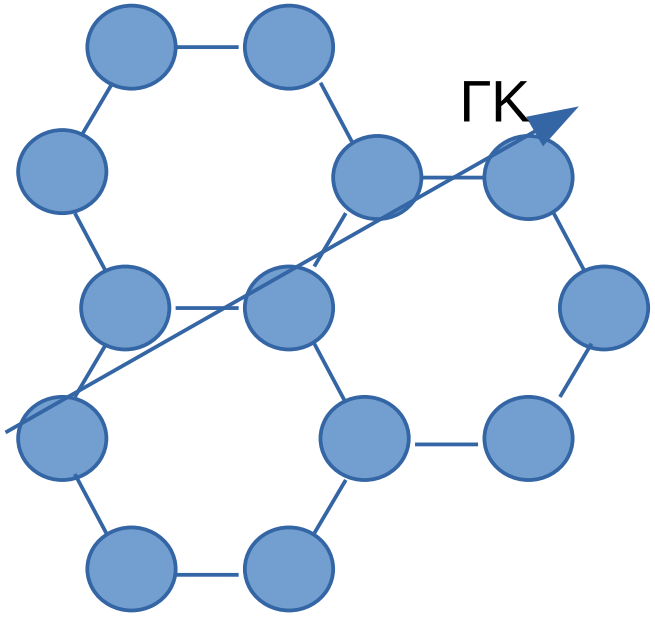


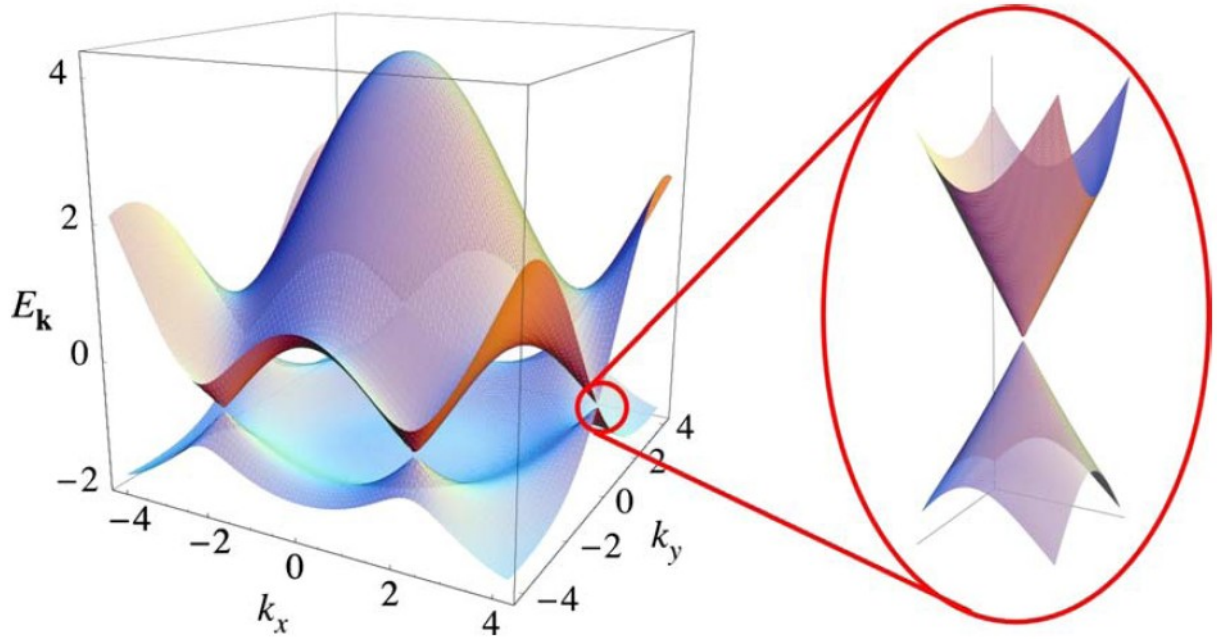


Графен. Электроны и дырки с нулевой массой покоя.









$$E_{c(V)} = \pm \upsilon_0 q$$

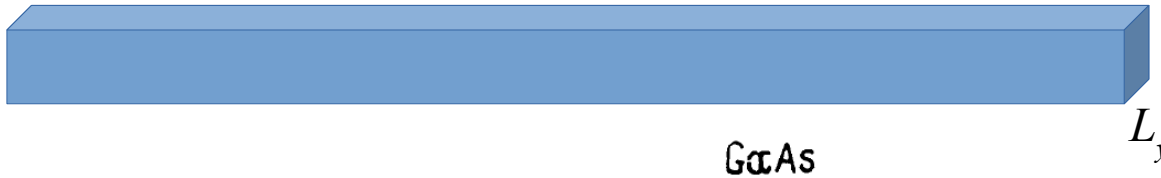
$$\vec{q} = \hbar(\vec{k} - \vec{\Gamma K})$$

$$\upsilon_0 = 10^6 \text{ м/с}$$

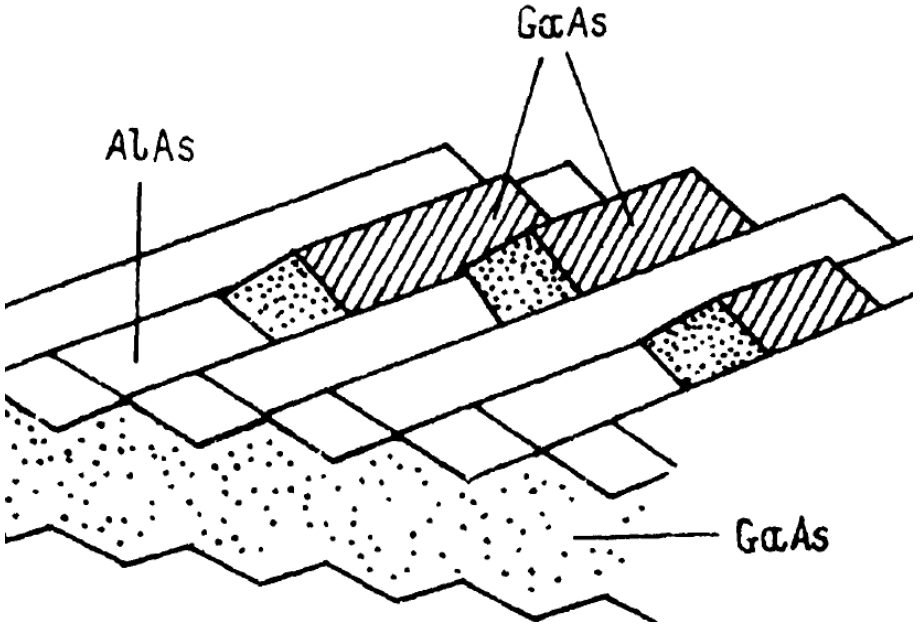
Одномерные структуры. Квантовые нити.

Квантовая нить – одномерная структура, размеры которой в двух направлениях сопоставимы с длиной волны (длиной свободного пробега) электронов. В квантовых нитях проявляется эффект размерного квантования.

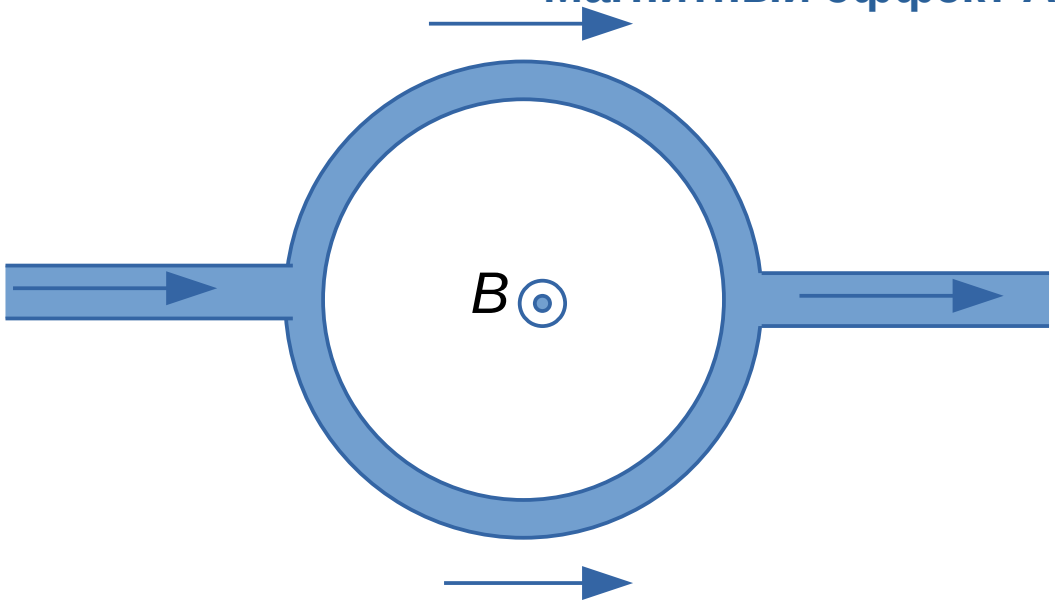
Нанонить – структура, размеры которой в двух направлениях менее нескольких сотен нанометров. В нанонитях размерное квантование может не проявляться

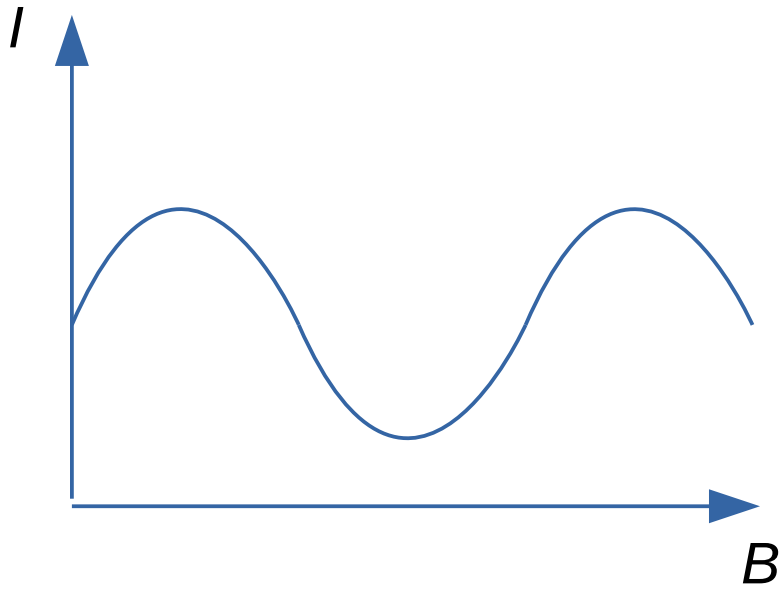


$L_y, L_z < \lambda\ (l)$



Магнитный эффект Ааронова-Бома.





Разность фаз при интерференции электронных волн движущихся по верхнему и нижнему полукольцу

$$\Delta\phi = \frac{e}{\hbar}\oint \vec{A}\,\vec{dl} = \frac{e}{\hbar}\iint \vec{B}\,\vec{dS} = 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}$$

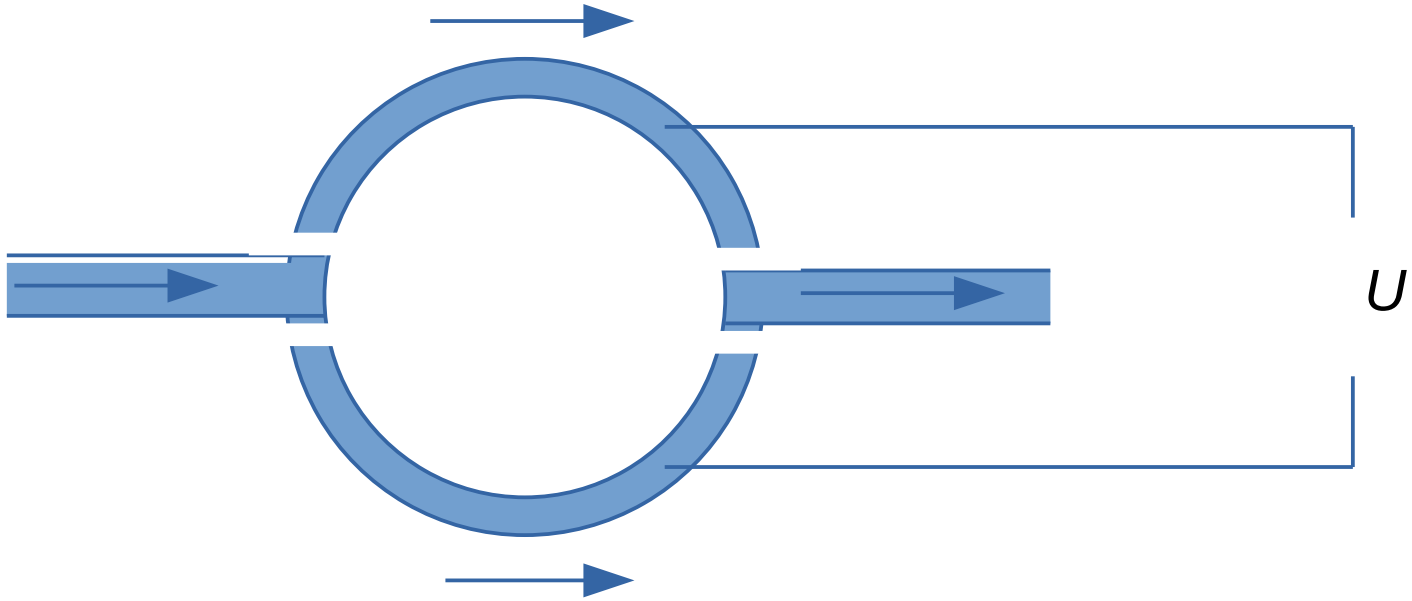
Ток в баллистическом режиме осциллирует в зависимости от магнитного поля с периодом

$$T_{AB} = \frac{\Phi_0}{S} = \frac{2\pi\hbar}{\pi e R^2}$$

Условие наблюдения:

$$R < l$$

Электрический эффект Аронова-Бома.



Разность фаз при интерференции электронных волн движущихся по верхнему и нижнему полукольцу

$$\Delta\phi = \frac{eUt}{\hbar} = \frac{eU\pi R}{\hbar \upsilon_F}$$

Ток в баллистическом режиме осциллирует в зависимости от напряжения с периодом

$$T_{AB} = \frac{2\hbar \upsilon_F}{eR}$$