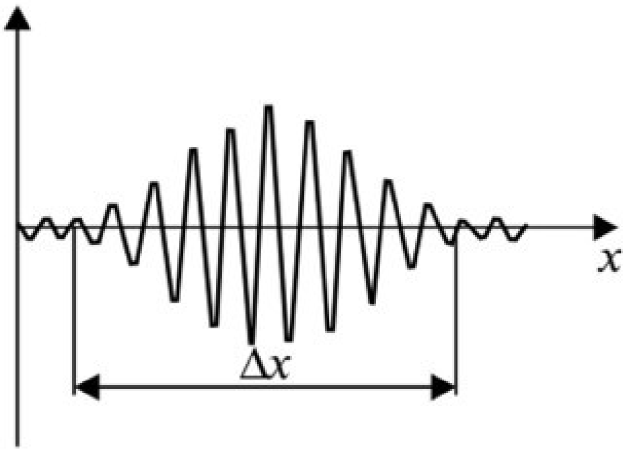
Квазиклассическое описание явлений переноса в кристаллах.

Если электроны и дырки в кристалле находятся в состоянии близком к стационарному, то они проходят свободно расстояние намного больше длины волны и могут при движении рассматриваться как классические частицы с определённой координатой и импульсом — волновые пакеты.

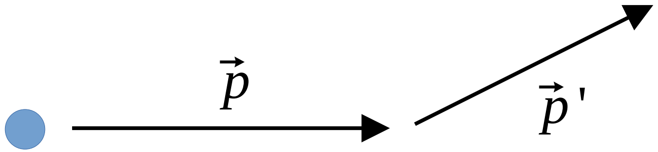


$$\vec{\upsilon}_e = \nabla_{\vec{p}} E_c(\vec{p}) \qquad \frac{1}{m_{eij}} = \frac{\partial^2 E_c(\vec{p})}{\partial p_i \partial p_j}$$

Волновой пакет движется со средней скоростью определяемой из закона дисперсии и обладает инертными свойствами определяемыми тензором обратных эффективных масс (эффективной массой)

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



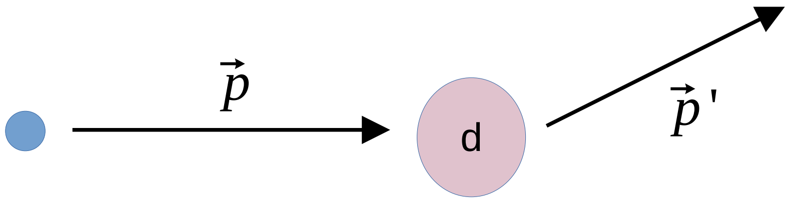
Вероятность перехода из состояния l в состояние l’ в единицу времени:

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

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

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

Рассеяние носителей заряда на статических дефектах.



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

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

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

N — *концентарция заряженных дефектов*

$\varepsilon_0, \varepsilon$ — *электрическая постоянная, диэлектрическая проницаемость*

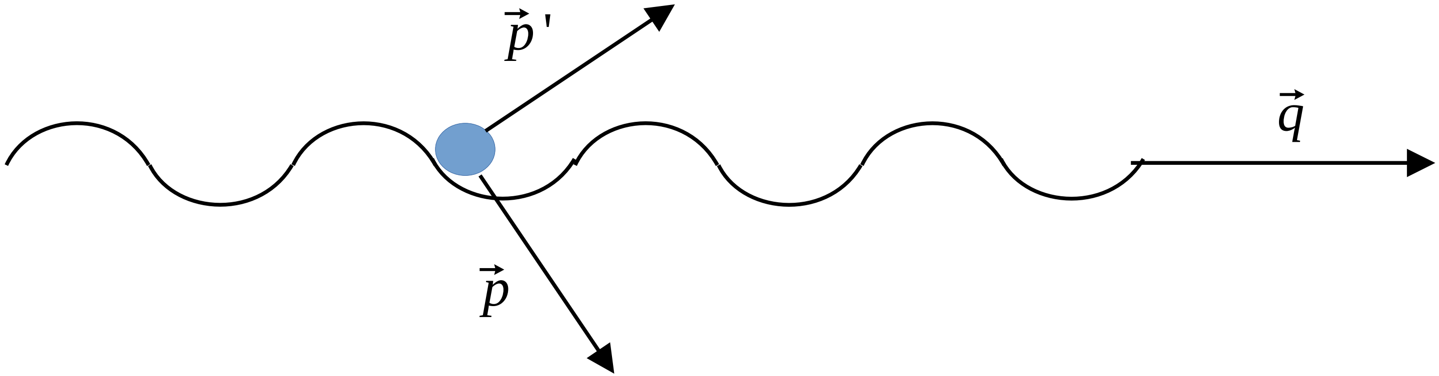
r_s — *длина экранирования*

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

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::

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

Неравновесная функция распределения в приближении времени релаксации.

В ряде важных случаев уравнение Больцмана может быть записано 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 Больцмана 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 расстояние которое носитель заряда движется без рассеяния

Вычисление электропроводности с помощью неравновесной функции распределения.

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

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

По определению электропроводности:

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

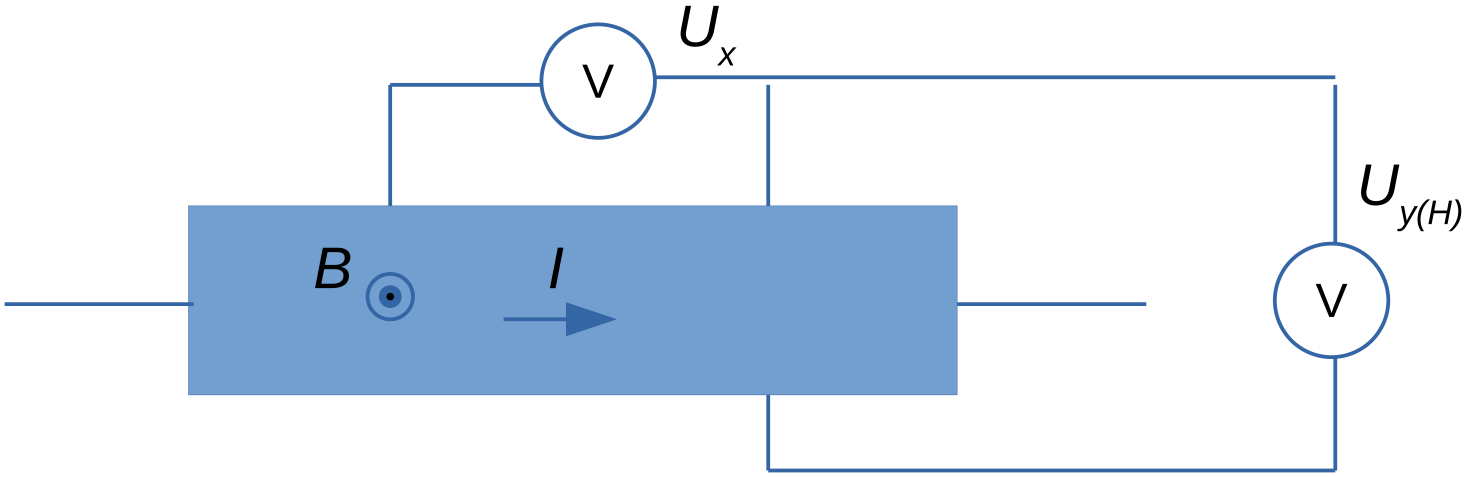
В случае когда можно ввести время релаксации квазиимпульса:

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

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

Эффект Холла

Вид “сверху” двумерной образца в магнитном поле *B*. *I* – сила тока. U_x, $U_{y(H)}$ – продольное и поперечное (холловское) напряжение.



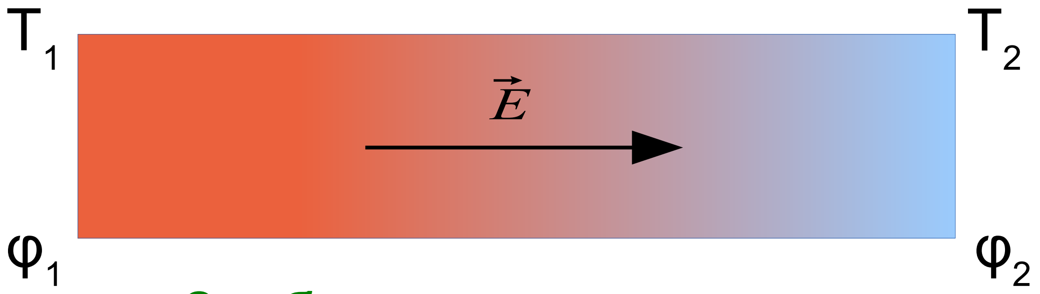
В направлении перпендикулярном току и магнитной индукции возникает э.д.с. Холла

Тензоры электропроводности σ и сопротивления ρ

$$\rho = \begin{Bmatrix} \rho_{xx} = U_x / I & \rho_{xy} = -U_{y(H)} / I \\ \rho_{yx} = U_{y(H)} / I & \rho_{xx} = U_x / I \end{Bmatrix} \qquad \sigma = \rho^{-1} = \begin{Bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{xx} \end{Bmatrix}$$

Термоэлектрические и термомагнитные явления. Эффект Зеебека

При наличии градиента температуры в незамкнутом полупроводнике (проводнике) возникает разность потенциалов. Это эффект Зеебека.



Коэффициент Зеебека определяется выражением:

$$\alpha = \frac{\phi_2 - \phi_1}{T_1 - T_2}$$

Или в локальной форме:

$$\vec{E} = \alpha \nabla T$$

Основные причины:

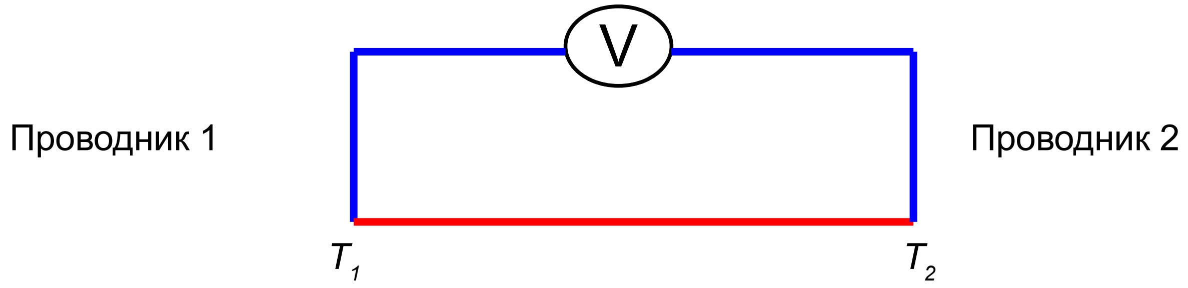
1) подвижные носители заряда перераспределяются в область более низкой температуры

2) подвижные носители заряда взаимодействуют с потоком фононов (эффект фононного увлечения)

Знак коэффициента Зеебека определяется знаком носителей заряда

Эффект Зеебека. Измерение.

Измерение в схеме двухспайной термопары (T_1 — температура одного спая, T_2 — температура другого спая).

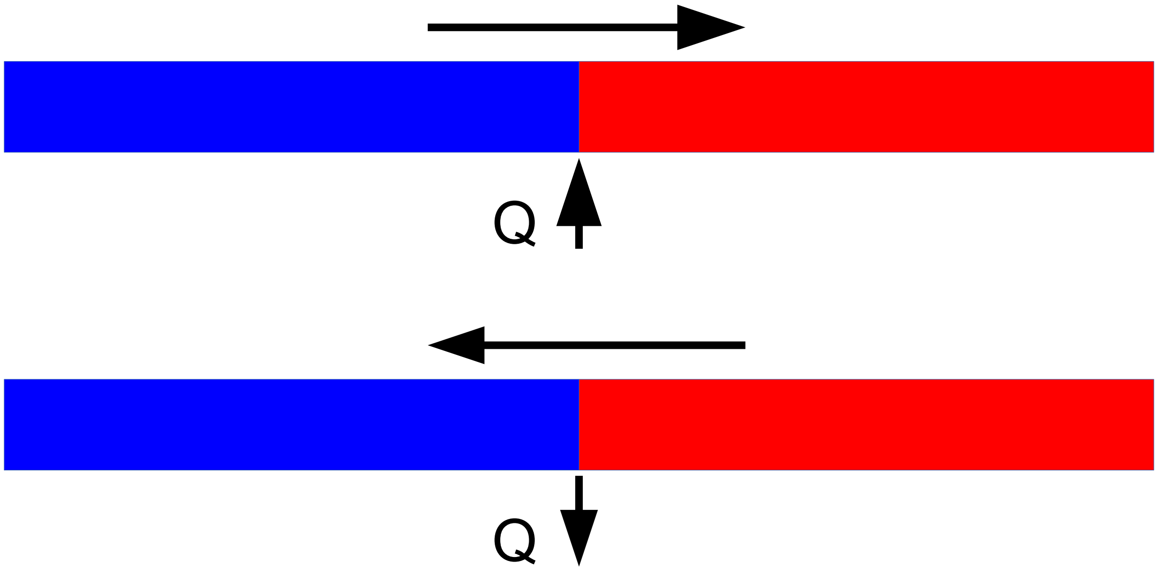


$$\alpha_{12} = \frac{U}{T_2 - T_1} = \alpha_1 - \alpha_2$$

Непосредственно можно измерить только относительный коэффициент Зеебека, т.е. разность коэффициентов Зеебека двух последовательно включённых полупроводников (проводников). Исключение, если один из проводников находится в сверхпроводящем состоянии, для которого коэффициент Зеебека равен 0.

Эффект Пельтье.

При протекании тока через контакт двух полупроводников (проводников) в контакте в зависимости от направления тока выделяется (поглощается тепло)



Коэффициент Пельтье

$$\Pi_{12} = \frac{dQ}{dT} \frac{1}{I}$$

Эффект Пельтье

Физическая причина: носители заряда переносят не только заряд, но и энергию. Соотношение между количеством переносимой энергии и заряда в разных материалов разное. Поэтому при пересечении границы раздела носителями заряда разность энергии выделяется или поглощается в виде тепла

Локальное определение коэффициента Пельтье для данного материала:

$$\vec{j}_q = \Pi \vec{j}$$

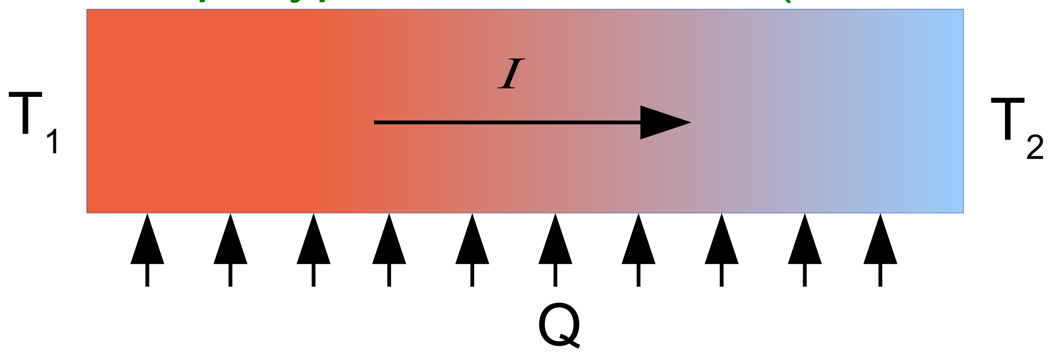
$\boldsymbol{j_q}$ **—** плотность потока тепла

Относительный коэффициент Пельтье определяется:

$$\Pi_{12} = \Pi_1 - \Pi_2$$

Эффект Томсона

При протекании тока через полупроводник (проводник), в котором имеется градиент температуры в нём в зависимости от направления тока и градиента температуры поглощается (выделяется) тепло:



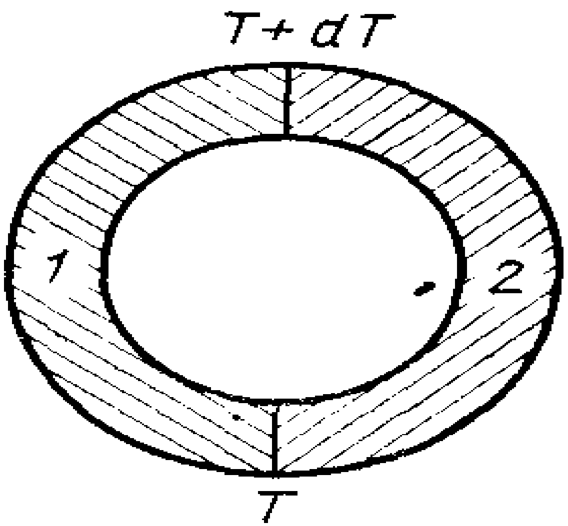
Коэффициент Томсона τ_T:

$$\frac{d}{dV}\left(\frac{dQ}{dt}\right)=\tau_T(\vec{j}\,\nabla T)$$

Физическая причина: энергия переносимая носителем заряда зависит от температуры. При переходе из менее нагретой области в более нагретую происходит поглощение тепла для уравновешивания изменения энергии, переносимой носителем заряда

Связь между термоэлеткрическими коэффициентами

Рассмотрим замкнутую цепь из двух полупроводников (проводников) как показано на рисунке



При протекании тока силой I за время t в цепи выделяется (поглощается) тепло за счёт эффекта Пельтье:

$$dQ_{\Pi}=(\Pi_{12}(T+dT)-\Pi_{12}(T))It=\frac{d\Pi}{dT}IdTt$$

И за счёт эффекта Томсона:

$$dQ_{T}=(\tau_{T1}-\tau_{T2})IdTt$$

Электрическое поле, возникающее за счёт эффекта Зеебека совершает работу:

$$A=\alpha_{12}dTIt$$

Закон сохранения энергии (пренебрегаем необратимыми процессами):

$$\alpha_{12}dTIt=\frac{d\Pi_{12}}{dT}dTIt-(\tau_{T2}-\tau_{T2})dTIt$$

Отсюда получаем:

$$\alpha_{12}=\frac{d\Pi_{12}}{dT}-(\tau_{T2}-\tau_{T2})$$

Связь между термоэлектрическими коэффициентами

Закон сохранения энтропии:

$$\frac{\Pi_{12}(T+dT)It}{T+dT}-\frac{\Pi_{12}(T)It}{T}-\int_{T}^{T+dT}\frac{\tau_{T2}-\tau_{T1}}{T}dT=0$$

Отсюда получаем:

$$\frac{d}{dT}\left(\frac{\Pi_{12}}{T}\right)-\frac{\tau_{T2}-\tau_{T1}}{T}=0 \qquad \frac{d\Pi_{12}}{dT}-\frac{\Pi_{12}}{T}-(\tau_{T2}-\tau_{T1})=0$$

Сравнивая с соотношением из закона сохранения энергии получаем:

$$\alpha_{12}=\frac{\Pi_{12}}{T} \qquad \boxed{\Pi=\alpha T}$$

Дифференцируем это соотношение:

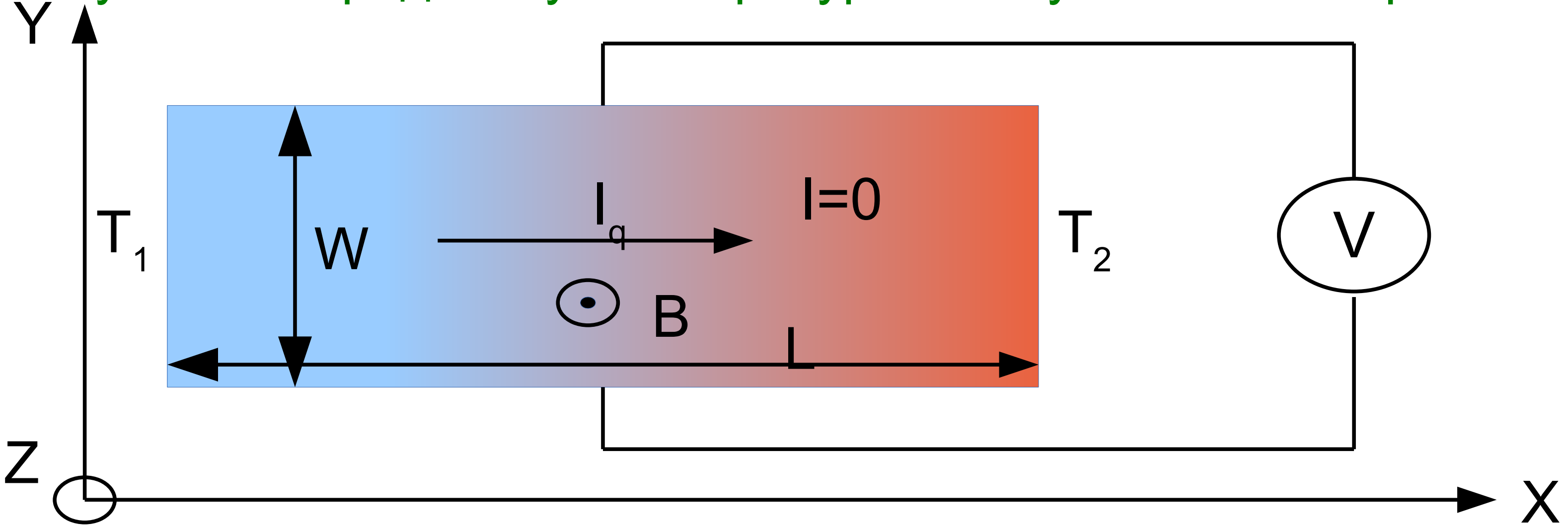
$$\frac{d\alpha_{12}}{dT}=\frac{d}{dT}\left(\frac{\Pi_{12}}{T}\right)$$

Сравниваем с соотношением из закона сохранения энтропии находим:

$$\frac{d\alpha_{12}}{dT}=\frac{d}{dT}\left(\frac{\Pi_{12}}{T}\right)=\frac{\tau_{T1}-\tau_{T2}}{T} \qquad \boxed{\tau_T=T\frac{d\alpha}{dT}}$$

Эффект Нернста-Эттинсгаузена

Эффект Нернста-Эттинсгаузена — возникновение электрического поля в полупроводнике (проводнике) при наличии градиента температуры и перпендикулярного ему магнитного поля в направлении перпендикулярном магнитному полю и градиенту температуры в отсутствии электрического тока



Физическая причина: Несмотря на то, что электрический ток равен нулю, поток тепла, переносимый электронами проводимости не равен нулю. Не равна нулю и средний импульс, приобретаемых носителями заряда, в направлении, перпендикулярном магнитному полю под действием силы Лоренца. Это связано с зависимостью времени релаксации от энергии

Эффект Нернста-Эттингсгаузена.

Средний импульс приобретаемый электроном под действием силы Лоренца. Средний поток энергии не равен нулю. Поэтому и средний приобретённый импульс не равен нулю в общем случае

$$\Delta p_y = -e B_z \upsilon_x \tau(E)$$

Можно ввести коэффициент Нернста-Эттинсгаузена:

$$q_{ne} = \frac{U L}{(T_2 - T_1) W B_z}$$

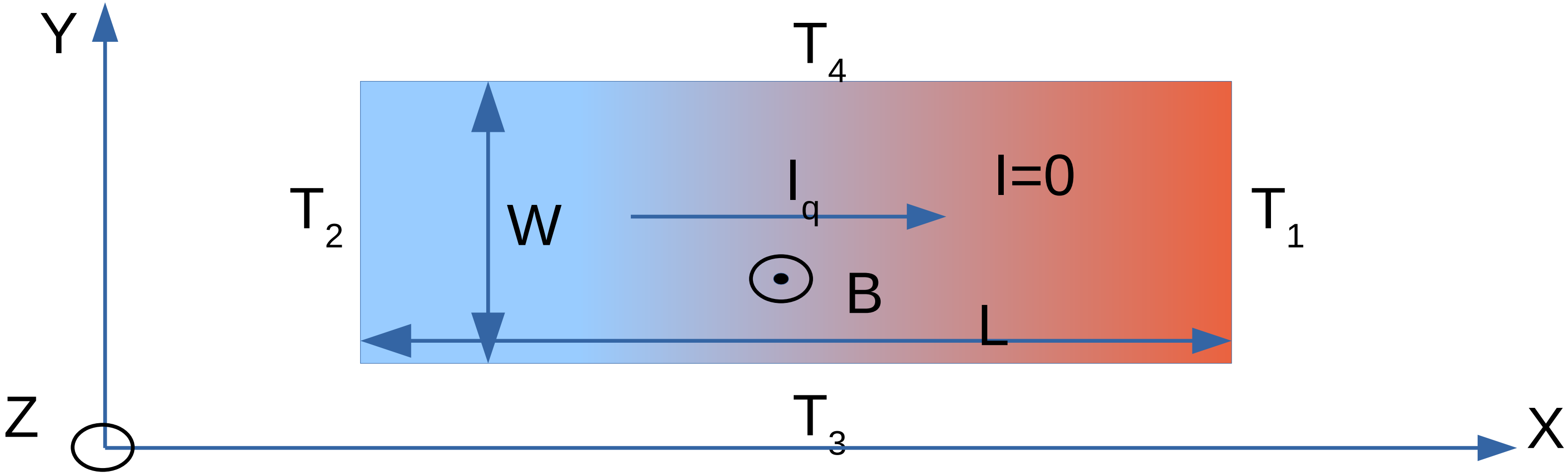
Или в локальной форме:

$$E_y = q_{ne} \frac{\partial T}{\partial x} B_z$$

Знак коэффициента Зеебека не привязан к знаку носителей заряда, а определяется в основном энергетической зависимостью времени релаксации импульса

Эффект Риги-Ледюка

Эффект Риги-Ледюка — возникновение градиента температуры при наличии магнитного поля и градиента температуры в направлении перпендикулярном магнитному полю и исходному градиенту температуры.



Физическая причина: При наличии градиента температуры носители заряда переносят энергию вдоль оси X. При этом полный ток вдоль оси X не течёт. В магнитном поле носители заряда отклоняются вдоль оси Y. Полный ток вдоль оси X равен 0, но больше отклоняются носители с большим временем релаксации импульса.

Эффект Риги-Ледюка

Коэффициент Риги-Ледюка:

$$q_{rl}=\frac{(T_4-T_3)L}{(T_2-T_1)W B_z}$$

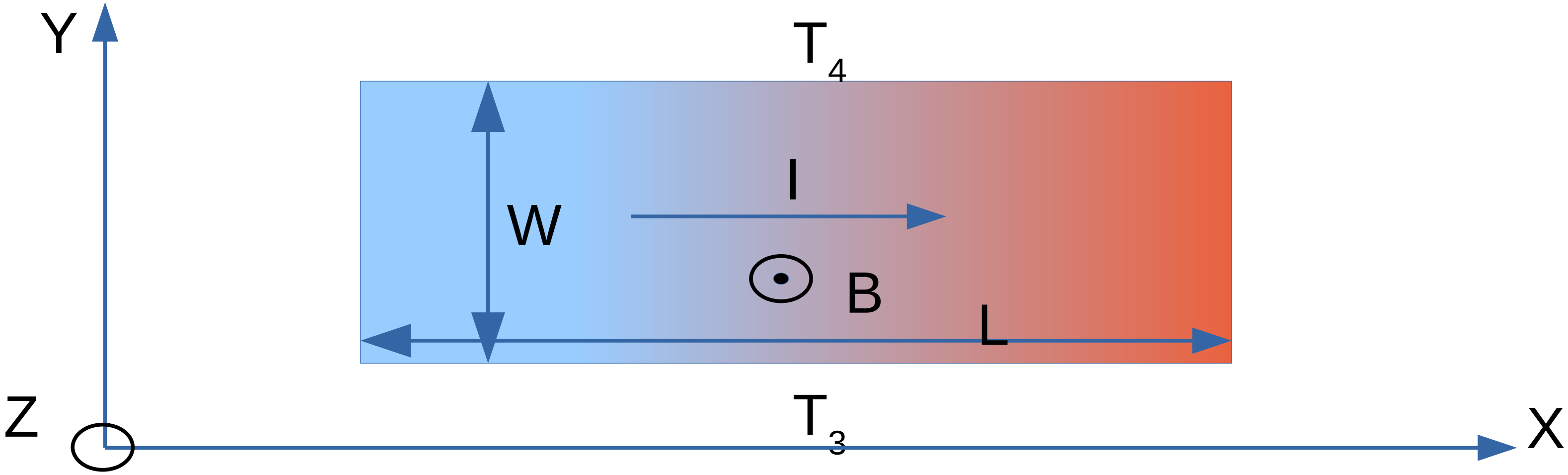
Локальное определение коэффициента:

$$\frac{\partial T}{\partial y}=q_{rl}\frac{\partial T}{\partial x}B_z$$

Направление отклонения носителя заряда в магнитном поле задано его знаком. Поэтому знак эффекта определяется знаком носителей заряда.

Эффект Эттинсгаузена

Эффект Эттинсгаузена — возникновение градиента температуры в направлении перпендикулярном магнитному полю при протекании тока через образец, помещённый в магнитное поле, перпендикулярное току:



Физическая причина: В магнитном поле носители заряда с разной энергией отклоняются по разному. Ток в перпендикулярном направлении Y равен нулю из-за компенсации силы Лоренца холловским напряжением. Но поток энергии Холловское напряжение не компенсирует. Поэтому возникает градиент температуры.

Эффект Эттинсгаузена

Коэффициент Эттинсгаузена:

$$q_e = \frac{(T_4 - T_3)}{I\, B_z}$$

Локальное определение:

$$\frac{\partial T}{\partial y} = q_e\, j_x\, B_z$$

В эффекте Холла электроны и дырки отклоняются в одну сторону. Поэтому знак эффекта не определяется знаком носителей заряда, а зависит в первую очередь от энергетической зависимости времени релаксации импульса.

Эффект Эттинсгаузена можно назвать обратным эффекту Нернста-Эттинсгаузена. Поэтому коэффициенты связаны:

$$q_e = \frac{q_{ne}\, T}{\kappa}$$

Продольные термомагнитные эффекты

Продольный эффект Нернста-Эттинсгаузена — изменение (как правило уменьшение) коэффициента Зеебека в магнитном поле

$$\alpha=\alpha(B)$$

Магнитное поле искривляет траектории носителей заряда в магнитном поле и они медленнее движутся под действием градиента температуры

Продольный эффект Риги-Ледюка — изменение (как правило уменьшение) электронной теплопроводности магнитном поле

$$\kappa_e=\kappa_e(B)$$

Магнитное поле искривляет траектории носителей заряда в магнитном поле и они медленнее движутся под действием градиента температуры и переносят меньше тепла

Электронная теплопроводность

В эффекте Зеебека возникающее электрическое поле обеспечивает равенство нулю электрического тока вдоль направления градиента температуры, Но поток энергии (тепла) при этом не равен нулю. Соответствующий вклад в теплопроводность называют электронной теплопроводностью

$$\vec{j}_q = -\kappa_e \nabla T$$

Коэффициент теплопроводности пропорционален удельной электропроводности по закону Видемана-Франца:

$$k_e = L T \sigma$$

Для невырожденной статистики число Лоренца зависит от энергетической зависимости времени релаксации импульса:

$$L = \left(r + \frac{5}{2}\right)\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 \qquad \tau \sim E^r$$

Для вырожденной статистики число Лоренца:

$$L = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2$$