01

Разделение угловой и энергетической релаксации неравновесных электронов в твердом теле

© Л.А. Бакалейников, Э.А. Тропп, Е.Ю. Флегонтова

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: bakal.ammp@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 8 февраля 2015 г.)

Показано, что интеграл столкновений кинетического уравнения при взаимодействии горячих электронов с фононами может быть разбит на части, соответствующие упругим и неупругим столкновениям, причем величины этих частей могут существенно отличаться. Это справедливо, в частности, для электронов с энергиями порядка 1 eV, распространяющихся в полупроводниках. Различие характерных времен релаксации по импульсу и энергии позволяет разделить процессы угловой и энергетической релаксации. Если дифференциальное сечение упругого рассеяния зависит не от угла рассеяния, а от направлений падающего и рассеянного электронов, что реализуется, например, при взаимодействии электрона с пьезоэлектрическими колебаниями решетки в соединениях $A^{III}B^{V}$, то лапласиан в уравнении, описывающем пространственное и энергетическое распределения электронов, заменяется эллиптическим оператором, т. е. диффузия электронов оказывается анизотропной.

Введение

Информация о распределении неравновесных электронов в зоне проводимости полупроводников оказывается важной для решения многих практических задач. Электронное распределение определяется взаимодействием с дефектами, примесями и фононами. Для электронов с энергиями, меньшими ширины запрещенной зоны, основным механизмом перераспределения по углам и энергиям является взаимодействие с фононами. Распределение электронов по пространству, углам и энергиям описывается кинетическим уравнением (КУ), которое представляет собой интегродифференциальное уравнение для функции распределения (ФР), зависящей в общем случае от шести переменных. Решение КУ вызывает значительные трудности, поэтому разработка методов его упрощения является актуальной задачей.

В работах [1–5] нами был предложен метод сокращения размерности кинетического уравнения для электронов средних энергий, основанный на разделении процессов угловой и энергетической релаксации. Возможность такого разделения базировалась на существенном различии характерной длины перераспределения электронов по углам и характерной длины потери энергии в тяжелых мишенях. Это позволило выделить малый параметр в кинетическом уравнении и, пользуясь асимптотическим подходом, существенно упростить описание процесса релаксации. Почти во всей области релаксация описывалась как диффузия изотропно распределенных электронов в координатном пространстве, а в узких пограничных слоях распределение электронов можно было считать не зависящим от энергии.

Подобный подход может быть использован и для упрощения описания релаксации электронов вблизи дна зоны проводимости. Если основным механизмом релаксации электронов является взаимодействие с фононами, то, как и в случае быстрых электронов, интеграл столкновений может быть разбит на части, соответствующие упругим и неупругим столкновениям. Для ряда полупроводников отношение времени релаксации по импульсу к времени релаксации по энергии для электронов с энергиями порядка 1 eV (выше дна зоны проводимости) оказывается малым. Эта ситуация имеет место, например, для GaAs, в котором основными механизмами релаксации электронов с такими энергиями являются междолинное рассеяние и рассеяние на полярных оптических фононах. Использование асимптотического разложения по выделенному параметру малости позволяет упростить описание процесса релаксации электронов в зоне и свести его к диффузии изотропно распределенных по скоростям электронов, сопровождающейся перераспределением по энергии в основном объеме и угловому перераспределению электронов с постоянной энергией в пограничных слоях. Отметим, что в том случае, когда вероятность рассеяния зависит не от угла рассеяния, а от направлений падающего и рассеянного электронов, оператор Лапласа в уравнении диффузии заменяется на эллиптический дифференциальный оператор, т. е. диффузия оказывается анизотропной. Подобная ситуация возникает, например, при взаимодействии электронов с пьезоэлектрическими колебаниями решетки в соединениях $A^{III}B^{V}$.

Анализ интеграла столкновений кинетического уравнения в случае электрон-фононного взаимодействия

Для оценки возможности разделения процессов угловой и энергетической релаксации электронов в зоне проводимости необходимо определить характерные времена этих процессов. В связи с этим покажем прежде всего, что интеграл столкновений может быть представлен в виде суммы частей, описывающих упругие и неупругие столкновения.

Кинетическое уравнение для электронов в стационарном случае имеет вид

$$\mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{p},\mathbf{r}) + \mathbf{F}\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p},\mathbf{r}) = I_{\text{col}}(f). \tag{1}$$

Здесь $f(\mathbf{p},\mathbf{r})$ — функция распределения электронов, зависящая от координаты $\mathbf{r}$ и квазиимпульса $\mathbf{p}$, $\mathbf{F}$ — сила, действующая на электрон, $\mathbf{v}$ — скорость электрона, $I_{\text{col}}(f)$ — интеграл столкновений. При малой концентрации электронов, когда электрон-электронным рассеянием можно пренебречь, интеграл столкновений имеет вид [6]

$$I_{\text{col}}(f) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbf{p}'\{W(\mathbf{p}',\mathbf{p})f(\mathbf{p}',\mathbf{r})[1-f(\mathbf{p},\mathbf{r})] - W(\mathbf{p},\mathbf{p}')f(\mathbf{p},\mathbf{r})[1-f(\mathbf{p}',\mathbf{r})]\}. \tag{2}$$

Здесь V — основной объем, $W(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ — отнесенная к единице времени вероятность перехода электрона из состояния с квазиимпульсом $\mathbf{p}$ в состояние с квазиимпульсом $\mathbf{p}'$. Если рассеяние электронов определяется в основном взаимодействием с фононами, то в первом приближении теории возмущений величина $W(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ задается соотношением

$$\begin{aligned} W(\mathbf{p},\mathbf{p}') &= W_a(\mathbf{p},\mathbf{p}') + W_r(\mathbf{p},\mathbf{p}') \\ &= \sum_j \frac{2\pi}{\hbar}\left|H'\big((\mathbf{p}'-\mathbf{p})/\hbar, j\big)\right|^2 \\ &\times N_{(\mathbf{p}'-\mathbf{p})/\hbar, j}\,\delta\big(E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p}) - \hbar\omega\big((\mathbf{p}'-\mathbf{p})/\hbar\big)\big) \\ &+ \sum_j \frac{2\pi}{\hbar}\left|H'\big((\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar, j\big)\right|^2 \\ &\times \big(N_{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar, j}+1\big)\delta\big(E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p}) + \hbar\omega\big((\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar\big)\big). \end{aligned} \tag{3}$$

Здесь $W_a(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ соответствует рассеянию с поглощением, а $W_r(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ — с испусканием фонона, $N_{q,j}$, $\hbar\omega(\mathbf{q}, j)$ — число и энергия фононов ветви j с квазиволновым вектором $\mathbf{q}$, $E(\mathbf{p})$ — энергия электрона с квазиимпульсом $\mathbf{p}$. Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия $H'(\mathbf{q}, j)$ задается выражением (см. [6])

$$H'(\mathbf{q}, j) = \left[\frac{\hbar}{2MG\omega(\mathbf{q}, j)}\right]^{1/2} B(\mathbf{q}, j), \tag{4}$$

где M — масса элементарной ячейки, G — общее число элементарных ячеек в основном объеме, коэффициенты $B(\mathbf{q}, j)$ определяются конкретным механизмом рассеяния и приведены в [6].

Преобразуем интеграл столкновений (2) с сечением рассеяния (3), разделяя его на упругую и неупругую части. Вследствие малости концентрации электронов в дальнейшем будем рассматривать линеаризованный интеграл столкновений. Запишем приходную часть интеграла столкновений, обусловленную испусканием фононов, в виде

$$\begin{aligned} I^{r,+}_{\text{col}}(f) &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int W_r(\mathbf{p},\mathbf{p}')f(\mathbf{p}',\mathbf{r})d\mathbf{p}' \\ &= \sum_j \iint \big(N_{(\mathbf{p}'-\mathbf{p})/\hbar, j}+1\big)S^r_j(\mathbf{p}',\mathbf{p})f(\mathbf{p}',\mathbf{r}) \\ &\times \delta\big(E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}') + \hbar\omega\big((\mathbf{p}'-\mathbf{p})/\hbar, j\big)\big)\mathbf{p}'^2 d\mathbf{p}' d\Omega', \end{aligned} \tag{5}$$

где

$$S^r_j(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\frac{2\pi}{\hbar}\left|H'\big((\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar, j\big)\right|^2,$$

$\mathbf{\Omega}'$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{p}'$. При фиксированном $\mathbf{\Omega}'$ перейдем от p' к переменной $E' = E(p'\mathbf{\Omega}')$. Учитывая, что

$$p' = p'(E',\mathbf{\Omega}'), \quad dp' = \frac{\partial p'}{\partial E'}dE',$$

$$\mathbf{q}_+ = \big(p'(E',\mathbf{\Omega}')\mathbf{\Omega}' - \mathbf{p}\big)/\hbar,$$

выражение (5) можно переписать

$$\begin{aligned} I^{r,+}_{\text{col}}(f) = \sum_j \iint &\big(N_{\mathbf{q}_+, j}+1\big)S^r_j\big(p'(E',\mathbf{\Omega}')\mathbf{\Omega}',\mathbf{p}\big) \\ &\times f\big(p'(E',\mathbf{\Omega}')\mathbf{\Omega}'\big)\delta\big(E(\mathbf{p}) - E' + \hbar\omega_{\mathbf{q}_+, j}\big) \\ &\times \big(p'(E',\mathbf{\Omega}')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}dE'd\Omega', \end{aligned} \tag{6}$$

где $\hbar\omega_{\mathbf{q}_+, j} = \hbar\omega(\mathbf{q}_+, j)$.

Для выполнения интегрирования по E' в (6) необходимо найти корни аргумента δ-функции, т. е. значения E', удовлетворяющие уравнению

$$E(\mathbf{p}) - E' + \hbar\omega_{\mathbf{q}_+, j} = 0. \tag{7}$$

В случае параболической зоны для акустических фононов условие равенства нулю аргумента дельта-функции (7) принимает вид

$$E(\mathbf{p}) - E' + \upsilon_j\sqrt{2m_0^*E + 2m_0^*E' - 4m_0^*\cos\theta\sqrt{EE'}} = 0,$$

где m_0^* — эффективная масса электрона в зоне проводимости, θ — угол рассеяния. Здесь учтено, что

$$\begin{aligned} q = |\mathbf{q}_+| &= |p'(E', d\mathbf{\Omega}')d\mathbf{\Omega}' - \mathbf{p}|/\hbar \\ &= \sqrt{p'^2 + p^2 - 2p'p\cos\theta}/\hbar \end{aligned}$$

и для акустических фононов $\omega_{q,j} = \upsilon_j q$. Для оптических фононов с законом дисперсии $\omega_{q,j} = \omega_{0,j} - \alpha_j q^2$ уравнение (7) запишется в форме

$$E(\mathbf{p}) - E' + \hbar\omega_{0,j} - \frac{\alpha_j}{\hbar}\Big(2m_0^*E + 2m_0^*E' - 4m_0^*\cos\theta\sqrt{EE'}\Big) = 0.$$

Обозначая через $E_{+,j}$ корень уравнения (7), для $I^{r,+}_{\text{col}}(f)$ найдем

$$I^{r,+}_{\text{col}}(f)=\sum_j\int\big(N_{q_{+},j}+1\big)S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$
$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E_{+,j}}d\Omega'. \quad (8)$$

Отметим, что для параболической зоны

$$\big(p'(E',\Omega')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}=2^{1/2}(m_0^*)^{3/2}E'^{1/2}.$$

Преобразуем (8), выделяя из $I^{r,+}_{\text{col}}(f)$ член, описывающий рассеяние без потери энергии,

$$I^{r,+}_{\text{col}}(f)=\sum_j\int\big(N_{\mathbf{q}_{+},j}+1\big)S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$
$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E}d\Omega'$$
$$+\bigg\{\sum_j\int\big(N_{\mathbf{q}_{+},j}+1\big)S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$
$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E_{+,j}}d\Omega'$$
$$-\sum_j\int\big(N_{\mathbf{q}_{+},j}+1\big)S_r\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$
$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E}d\Omega'\bigg\}. \quad (9)$$

Первый член в (9) описывает упругое рассеяние, второй — рассеяние с потерей энергии. Если $\hbar\omega_{\mathbf{q}_{+,j}}\ll E(\mathbf{p})$, то $E_{+,j}=E(\mathbf{p})\Big(1+O\big(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}_{+,j}}}{E}\big)\Big)$. Член в фигурных скобках можно оценить, раскладывая интеграл (8) по малому параметру. Действительно, пусть E_0, $\hbar\bar{\omega}_q$ — характерные масштабы энергии электрона и фонона, и отношение этих масштабов $\varepsilon=\frac{\hbar\bar{\omega}_q}{E_0}\ll 1$. Уравнение (7) тогда запишется в виде

$$E_{+,j}/E_0=E/E_0+\varepsilon g_{+,j}(E_{+,j}/E_0,E/E_0,\Omega',\Omega),$$

где

$$g_{+,j}(\xi,\eta,\Omega',\Omega)=\hbar\omega\big(\big(p'(E_0\xi,\Omega')\Omega'$$
$$-p(E_0\eta,\Omega)\Omega\big)/\hbar,j\big)/\hbar\bar{\omega}_q.$$

Первые члены разложения решения этого уравнения по степеням малого параметра ε имеют вид

$$E_{+,j}/E_0=E/E_0+\varepsilon h_{+,j}(E/E_0,\Omega',\Omega)+O(\varepsilon^2),$$
$$h_{+,j}(E/E_0,\Omega',\Omega)=g_{+,j}(E/E_0,E/E_0,\Omega',\Omega). \quad (10)$$

Раскладывая по ε выражение в фигурных скобках в (9), для приходной части интеграла столкновений имеем

$$I^{r,+}_{\text{col}}(f)=\sum_j\bigg\{\int\big(N_{\mathbf{q}_{+},j}+1\big)S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$
$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E}d\Omega'$$
$$+\varepsilon E_0\int\frac{\partial}{\partial E'}\bigg(\big(N_{\mathbf{q}_{+},j}+1\big)S_r\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$
$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg)\bigg|_{E'=E}$$
$$\times h_{+,j}(E/E_0,\Omega',\Omega)d\Omega'\bigg\}+O(\varepsilon^2). \quad (11)$$

В случае параболической зоны для акустических фононов легко показать, что

$$h_{+,j}(E/E_0,\Omega',\Omega)=2\,\frac{v_j\sqrt{2m_0^*E_0}}{\hbar\bar{\omega}_q}\sqrt{E/E_0}\sin(\theta/2) \quad (12)$$

и $p'(E,\Omega')=p$. Для оптических фононов в этом случае имеем

$$h_{+,j}(E/E_0,\Omega',\Omega)=\frac{\hbar\omega_{0,j}-\frac{\alpha_j}{\hbar}4m_0^*E_0(1-\cos\theta)\frac{E}{E_0}}{\hbar\bar{\omega}_q}.$$

Исследуем теперь уходную часть ИС для процесса рассеяния с испусканием фонона

$$I^{r,-}_{\text{col}}(f)=\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int W_r(\mathbf{p},\mathbf{p}')f(\mathbf{p},\mathbf{r})d\mathbf{p}'$$
$$=\sum_j\iint\big(N_{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar,j}+1\big)S^r_j(\mathbf{p},\mathbf{p}')f(\mathbf{p},\mathbf{r})$$
$$\times\delta\big(E(\mathbf{p}')-E(\mathbf{p})+\hbar\omega\big((\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar,j\big)\big)p'^2dp'd\Omega'. \quad (13)$$

Переходя, как и раньше, от p' к переменной $E'=E(p'\Omega')$ и выполняя по ней интегрирование, найдем

$$I^{r,-}_{\text{col}}(f)=\sum_j\int\big(N_{\mathbf{q}_{-},j}+1\big)S^r_j\big(\mathbf{p},p'(E',\Omega')\Omega'\big)$$
$$\times f(\mathbf{p})\big(p'(E',\Omega')\big)^2\frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E_{-,j}}d\Omega'. \quad (14)$$

Здесь $\mathbf{q}_{-}=\big(\mathbf{p}-p'(E',\Omega')\Omega'\big)/\hbar$, а $E_{-,j}$ является корнем уравнения

$$E'-E(\mathbf{p})+\hbar\omega_{\mathbf{q}_{-},j}=0, \quad (15)$$

где $\hbar\omega_{\mathbf{q}_{-},j}=\hbar\omega(\mathbf{q}_{-},j)$. Пользуясь изложенным выше подходом, можно разделить $I^{r,-}_{\text{col}}(f)$ на упругую и неупругую части, а при малом значении ε разложить выражение для неупругой части по степеням малого параметра.

Интеграл столкновений, таким образом, преобразуется к виду

$$I^r_{\text{col}}(f) = I^r_{el}(f) + I^r_{in}(f) = \sum_j \int \big((N_{\mathbf{q}_+,j} + 1)$$

$$\times S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big) f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big) - \big(N_{\mathbf{q}_-,j} + 1\big)$$

$$\times S^r_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) f(\mathbf{p})\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} d\Omega'$$

$$+ \sum_j \bigg\{ \int (N_{\mathbf{q}_+,j} + 1) S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$

$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E=E_{+,j}} d\Omega'$$

$$- \int (N_{\mathbf{q}_-,j} + 1) S^r_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big)$$

$$\times f(\mathbf{p})\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E=E_{-,j}} d\Omega'$$

$$- \int \big((N_{\mathbf{q}_+,j} + 1) S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$

$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big) - \big(N_{\mathbf{q}_-,j} + 1\big)$$

$$\times S^r_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) f(\mathbf{p})\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} d\Omega' \bigg\}. \tag{16}$$

С учетом малости ε это дает

$$I^r_{\text{col}}(f) = \sum_j \bigg\{ \int \big((N_{\mathbf{q}_+,j} + 1) S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$

$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big) - \big(N_{\mathbf{q}_-,j} + 1\big)$$

$$\times S^r_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) f(\mathbf{p})\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} d\Omega'$$

$$+ \varepsilon E_0 \int \frac{\partial}{\partial E'} \Big(\big((N_{\mathbf{q}_+,j} + 1) S^r_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$

$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big) + \big(N_{\mathbf{q}_-,j} + 1\big)$$

$$\times S^r_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) f(\mathbf{p})\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\Big)\bigg|_{E'=E}$$

$$\times h_j(E/E_0,\Omega',\Omega)\, d\Omega' \bigg\} + O(\varepsilon^2). \tag{17}$$

Здесь опущены индексы $\pm$ в выражениях $h_{+,j}(E/E_0,\Omega',\Omega)$ и $h_{-,j}(E/E_0,\Omega',\Omega)$, поскольку четность зависимости энергии фонона от квазиволнового вектора приводит к равенству этих величин.

Аналогичное представление можно получить и для рассеяния электрона с поглощением фонона. В этом случае

$$I^a_{\text{col}}(f) = I^a_{el}(f) + I^a_{in}(f) = \sum_j \int \big(N_{\mathbf{q}_-,j}$$

$$\times S^a_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big) f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)$$

$$- N_{\mathbf{q}_+,j} S^a_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega\big) f(\mathbf{p})\big)$$

$$\times \big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} d\Omega'$$

$$+ \sum_j \bigg\{ \int N_{\mathbf{q}_-,j} S^a_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$

$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E_{-,j}} d\Omega'$$

$$- \int N_{\mathbf{q}_+,j} S^a_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big)$$

$$\times f(\mathbf{p})\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E_{+,j}} d\Omega'$$

$$- \int \big(N_{\mathbf{q}_-,j} S^a_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$

$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big) - N_{\mathbf{q}_+,j} S^a_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) f(\mathbf{p})\big)$$

$$\times \big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} d\Omega' \bigg\}. \tag{18}$$

Для малых ε неупругую часть интеграла столкновений можно разложить и найти

$$I^a_{\text{col}}(f) = I^a_{el}(f) + I^a_{in}(f) = \sum_j \bigg\{ \int \big(N_{\mathbf{q}_-,j}$$

$$\times S^a_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big) f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big)$$

$$- N_{\mathbf{q}_+,j} S^a_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) f(\mathbf{p})\big)$$

$$\times \big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} d\Omega'$$

$$- \varepsilon E_0 \int \frac{\partial}{\partial E'} \Big(\big(N_{\mathbf{q}_-,j} S^a_j\big(p'(E',\Omega')\Omega',\mathbf{p}\big)$$

$$\times f\big(p'(E',\Omega')\Omega'\big) - N_{\mathbf{q}_+,j} S^a_j\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big)$$

$$\times f(\mathbf{p})\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\Big)\bigg|_{E'=E}$$

$$\times h_j(E/E_0,\Omega',\Omega)\, d\Omega' \bigg\} + O(\varepsilon^2). \tag{19}$$

Таким образом, интегралы столкновений для электрон-фононного взаимодействия в процессах с испусканием и поглощением фононов допускают представление в виде суммы упругой и неупругой частей.

Проанализируем теперь соотношение этих частей. Величины упругой и неупругой частей интеграла столкновений обратно пропорциональны характерным временам релаксации по импульсу и по энергии соответственно. Оценкой для времени релаксации по импульсу может служить время потери направленной составляющей скорости (см., например, [7,8])

$$\tau_p^{-1} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \iint W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')(1-\cos\theta)p'^2 dp' d\Omega'. \quad (20)$$

Время релаксации энергии можно оценить через скорость потери энергии в столкновении

$$\tau_E^{-1} = \frac{1}{E_0}\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \iint W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\big(E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}')\big)p'^2 dp' d\Omega'. \quad (21)$$

Для рассеяния с испусканием фононов обратное время релаксации по импульсу

$$\tau_{p,r,j}^{-1} = \iint \big(N_{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar,j} + 1\big)S_j^r(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\delta\big(E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p}) + \hbar\omega\big((\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar, j\big)\big)(1-\cos\theta)p'^2 dp' d\Omega'. \quad (22)$$

Обратное время релаксации энергии в этом случае будет

$$\tau_{E,r,j}^{-1} = \frac{1}{E_0}\iint \big(N_{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar,j} + 1\big)S_j^r(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\delta\big(E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p}) + \hbar\omega\big((\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar, j\big)\big)\big(E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}')\big)p'^2 dp' d\Omega'. \quad (23)$$

Переходя к интегрированию по E' и используя малость ε, найдем

$$\tau_{p,r,j}^{-1} = \int \big(N_{(\mathbf{p}-p'(E',\Omega')\Omega')/\hbar,j} + 1\big) \times S_j^r\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} \times(1-\cos\theta)d\Omega'$$
$$-\varepsilon E_0 \int \frac{\partial}{\partial E'}\bigg(\big(N_{(\mathbf{p}-p'(E',\Omega')\Omega')/\hbar,j} + 1\big) \times S_j^r\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg)\bigg|_{E'=E} \times h_j(E/E_0, \Omega', \Omega)(1-\cos\theta)d\Omega' + O(\varepsilon^2). \quad (24)$$

Второй член в этом выражении имеет порядок $O(\varepsilon)$, и, следовательно, основную роль в перераспределении по углам играет упругая часть интеграла столкновений. Такой же расчет для скорости потери энергии дает

$$\tau_{E,r,j}^{-1} = \frac{1}{E_0}\iint \big(N_{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar,j} + 1\big)S_j^r(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\delta\big(E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p}) + \hbar\omega\big((\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar, j\big)\big)\big(E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p}')\big) \times p'^2 \frac{dp'}{dE'}d\Omega' = \frac{1}{E_0}\int \big(N_{\mathbf{q}_-,j} + 1\big)S_j^r\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) \times \hbar\omega_{\mathbf{q}_-,j}\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E_{-,j}} d\Omega' =$$
$$\varepsilon \int \big(N_{\mathbf{q}_-,j} + 1\big)S_j^r\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) \times\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} h_j(E/E_0, \Omega', \Omega)d\Omega' + O(\varepsilon^2). \quad (25)$$

Обратные времена релаксации по импульсу и энергии для рассеяния с поглощением фононов задаются формулами

$$\tau_{p,a,j}^{-1} = \int N_{(p'(E',\Omega')\Omega'-\mathbf{p})/\hbar,j}S_j^a\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) \times\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E}(1-\cos\theta)d\Omega' + \varepsilon E_0 \times \int \frac{\partial}{\partial E'}\bigg(N_{(p'(E',\Omega')\Omega'-\mathbf{p})/\hbar,j}S_j^a\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big) \times\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg)\bigg|_{E'=E} h_j(E/E_0, \Omega', \Omega) \times(1-\cos\theta)d\Omega' + O(\varepsilon^2), \quad (26)$$

$$\tau_{E,a,j}^{-1} = \varepsilon \int N_{(p'(E',\Omega')\Omega'-\mathbf{p})/\hbar,j} \times S_j^a\big(\mathbf{p}, p'(E',\Omega')\Omega'\big)\big(p'(E',\Omega')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} \times h_j(E/E_0, \Omega', \Omega)d\Omega' + O(\varepsilon^2). \quad (27)$$

В случае параболической зоны для акустических фононов выражения (24)–(27) дают

$$\tau_{p,r,j}^{-1} \approx \sqrt{2}\big(m_0^*\big)^{3/2}E^{1/2}\int (N_{q,j} + 1) \times S_j^r(p, \cos\theta)(1-\cos\theta)d\Omega', \quad (28)$$

$$\tau_{E,r,j}^{-1} \approx \varepsilon\big(2m_0^*\big)^2 \frac{\upsilon_j}{\hbar\bar{\omega}_g}E\int (N_{\bar{q}_i,j} + 1) \times S_j^r(p, \cos\theta)\sin(\theta/2)d\Omega', \quad (29)$$

$$\tau_{p,a,j}^{-1} \approx \sqrt{2}\big(m_0^*\big)^{3/2}E^{1/2} \times \int N_{q,j}S_j^a(p, \cos\theta)(1-\cos\theta)d\Omega', \quad (30)$$

$$\tau_{E,a,j}^{-1} \approx \varepsilon\left(2m_0^*\right)^2 \frac{\upsilon_j}{\hbar\bar{\omega}_q} E$$

$$\times \int N_{q,j} S_j^a(p, \cos\theta) \sin(\theta/2) d\Omega'. \qquad (31)$$

Число фононов в состоянии с импульсом $\mathbf{q}$ определяется распределением Бозе–Эйнштейна

$$N_q = \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_q}{k_B T}\right) - 1\right)^{-1}. \qquad (32)$$

Отметим, что энергия оптических фононов $\hbar\omega_{\mathbf{q},j}$ может составлять несколько сотых eV, и для равновесных электронов даже при комнатной температуре условие малости ε может не выполняться. Однако если мы рассматриваем электроны с энергией $0.5\,\mathrm{eV} < E < 1\,\mathrm{eV}$, то ε мало.

Если основным механизмом рассеяния электронов является рассеяние на акустических фононах, а зона проводимости описывается параболическим законом дисперсии, то величины упругой и неупругой частей можно оценить с помощью формул (29)–(32). В том случае, когда рассеяние электронов прямо вперед не является преобладающим, интегралы в выражениях (28)–(31) имеют одинаковый порядок. Времена релаксации по импульсу и энергии пропорциональны величинам $\tau_{p,j} = 1/(\tau_{p,r,j}^{-1} + \tau_{p,a,j}^{-1})$ и $\tau_{E,j} = 1/(\tau_{E,r,j}^{-1} + \tau_{E,a,j}^{-1})$ соответственно и в этом случае за счет малости ε будет выполняться неравенство

$$\tau_{p,j} \ll \tau_{E,j} \qquad (33)$$

для каждого j. Следовательно, будет справедливо соотношение $\tau_p \ll \tau_E$, где

$$\frac{1}{\tau_p} = \sum_j \frac{1}{\tau_{p,j}}, \quad \frac{1}{\tau_E} = \sum_j \frac{1}{\tau_{E,j}}.$$

Оценим соотношение между временами релаксации по импульсу и энергии для электронов с энергиями $0.5\,\mathrm{eV} < E < 1\,\mathrm{eV}$ в GaAs. Как показано в [9], основными механизмами рассеяния для электронов таких энергий (если оценивать вклад различных механизмов по полным сечениям) являются междолинное рассеяние и рассеяние на полярных оптических фононах.

Рассеяние на полярных оптических фононах для кубического кристалла с двумя атомами в элементарной ячейке рассмотрено в [6]. Сечение рассеяния в этом случае есть

$$S_j^r(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} 16\pi^3 \left(Ze^2\right)^2 \frac{(M_1 + M_2)}{V_0 M_1 M_2 q^2 \omega(\mathbf{q}, j)}. \qquad (34)$$

Здесь M_1, M_2 — массы атомов, Ze — эффективные заряды атомов ячейки, V_0 — объем элементарной ячейки. Если для оценки $\tau_{p,r,j}^{-1}$, $\tau_{E,r,j}^{-1}$ использовать разложения (24), (25) по малому параметру ε и ограничиться параболическим законом дисперсии, то $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$ и (34) переходит в

$$S_j^r(p, \cos\theta) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi^3\hbar^2 \left(Ze^2\right)^2$$

$$\times \frac{(M_1 + M_2)}{V_0 M_1 M_2 m_0^*(\mathbf{q}, j) E (1 - \cos\theta)}.$$

При этом полное сечение, очевидно, логарифмически расходится, однако среднеквадратичный угол рассеяния можно оценить. Для оценки скорости потери энергии необходимо использовать формулу (25) без разложения по ε с сечением рассеяния (34). Полученное значение будет содержать множитель $\varepsilon \ln(\varepsilon)$, вследствие чего выполняется неравенство $\tau_{p,r,j} \ll \tau_{E,r,j}$. Аналогичные оценки можно получить и для рассеяния с поглощением полярного оптического фонона.

Для междолинного рассеяния волновой вектор фонона в процессе рассеяния меняется мало, поэтому вероятность перехода можно считать не зависящей от $\mathbf{q}$ [8]. Следовательно, и в этом случае интегралы в $\tau_{p,r,j}^{-1}$, $\tau_{E,r,j}^{-1}$ имеют одинаковый порядок, и выполняется соотношение (33). Поэтому для электронов с энергиями $0.5\,\mathrm{eV} < E < 1\,\mathrm{eV}$ в GaAs время релаксации по импульсам оказывается много меньше времени релаксации по энергии.

Разделение процессов угловой и энергетической релаксации

Как было показано в предыдущем разделе, задача кинетики горячих электронов, распространяющихся в зоне проводимости, может оказаться многомасштабной. Временами, характеризующими процесс релаксации в целом, являются время релаксации по импульсам τ_p и время релаксации по энергии τ_E, зависящие от энергии электрона E. Эти величины могут значительно превосходить время между столкновениями. В том случае, когда $\tau_p(E) \ll \tau_E(E)$, возможно существенное упрощение задачи. Процесс релаксации электронов почти на всей глубине, кроме узкого приповерхностного слоя, может быть описан как диффузия в координатном пространстве, сопровождающаяся перераспределением электронов по энергии, а в приповерхностном слое можно воспользоваться приближением, в котором энергия считается почти постоянной, т. е. в этом случае возможно разделение процессов угловой и энергетической релаксации.

При переходе к безразмерным переменным с использованием в качестве масштаба времени величины $\sqrt{\tau_p(E)\tau_E(E)}$ в кинетическом уравнении при производных по пространственным переменным появляется малый параметр, что позволяет отнести задачу переноса электронов к классу сингулярно возмущенных задач. Для корректного перехода от полной модели к сокращенному описанию с помощью уравнений меньшей размерности необходимо воспользоваться общей схемой асимптотического расщепления многомасштабных задач, изложенной в [10]. Согласно этой схеме, процесс отыскания асимптотического разложения решения многомасштабных задач может быть разбит на два итерационных процесса — основной итерационный процесс и нахождение погранслойных функций. В ходе основного итерационного процесса формулируются уравнения меньшей размерности, являющиеся условием разрешимости задач для коэффициентов асимптотического разложения решения по параметру малости задачи. Отыскание решений уравнений меньшей размерности позволяет найти и коэффициенты асимптотического разложения. Полученное в результате проведения основного итерационного процесса решение, вообще говоря, не удовлетворяет граничным условиям. В связи с этим оно должно быть дополнено погранслойными функциями, которые находятся во втором итерационном процессе. Сращивание внешнего и внутреннего разложений определяет граничные условия, необходимые для решения уравнений меньшей размерности. В этом разделе проводится разделение процессов угловой и энергетической релаксации по указанной схеме с использованием лишь первых членов разложения.

Процесс распространения электронов в веществе в отсутствие внутренних источников описывается кинетическим уравнением (1). Для отыскания распределения электронов в области D уравнение (1) должно быть дополнено граничным условием

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p})\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_\Gamma} = f_\Gamma(\mathbf{r}_\Gamma,\mathbf{p}); \quad \mathbf{p}\cdot\mathbf{n}_\Gamma < 0, \tag{35}$$

задающим распределение падающих извне электронов. Здесь $\mathbf{r}_\Gamma$ — радиус-вектор точки поверхности, ограничивающей область D, $\mathbf{n}_\Gamma$ — направление внешней нормали к границе в точке $\mathbf{r}_\Gamma$.

Как показано в предыдущем разделе, интеграл столкновений может быть разбит на части, описывающие упругие и неупругие столкновения, $\widehat{I}_{el}(f)$ и $\widehat{I}_{in}(f)$.

Будем рассматривать кинетическое уравнение в случае слабых полей. Выберем в качестве масштаба скоростей и координат величины $v_0 = \frac{E_0}{p(E_0)}$ и $v_0\sqrt{\tau_p(E_0)\cdot\tau_E(E_0)}$ соответственно, где E_0 — характерная энергия электронов, $p(E_0)$ — средняя величина импульса на изоэнергетической поверхности с энергией E_0. Умножая уравнение (1) на $\tau_p(E_0)$, найдем, что в безразмерных переменных $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$, для которых мы оставим прежние обозначения, кинетическое уравнение принимает вид

$$\delta\cdot v\boldsymbol{\Omega}\cdot\nabla_r f + \delta\cdot\boldsymbol{\Phi}\nabla_{\mathbf{p}} f = \tau_p(E_0)\,\widehat{I}_{el}(f) + \delta^2\tau_E(E_0)\,\widehat{I}_{in}(f). \tag{36}$$

Здесь $\delta\boldsymbol{\Phi} = \tau_p(E_0)\mathbf{F}/p(E_0)$, а $\delta = \sqrt{\tau_p(E_0)/\tau_E(E_0)}$ — малый параметр. Наличие малого параметра в безразмерной силе отражает сделанное предположение о малости внешних полей (работа силы на характерной длине угловой релаксации, равной произведению времени релаксации по импульсу на характерную скорость, много меньше энергии электрона). Безразмерные интегралы столкновений $\tau_p(E_0)\,\widehat{I}_{el}(f)$, $\tau_E(E_0)\,\widehat{I}_{in}(f)$ являются величинами порядка единицы. Функцию распределения удобно рассматривать как функцию направления импульса $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{p}/p$ и энергии $E = E(p,\boldsymbol{\Omega})$, т.е.

$$f(\mathbf{r},\boldsymbol{\Omega},E) = f\big(\mathbf{r},\boldsymbol{\Omega}p(E,\boldsymbol{\Omega})\big).$$

Решение ищем в виде ряда

$$f = \sum_{k=0}^{\infty} f_e(\mathbf{r},\boldsymbol{\Omega},E)\cdot\delta^k. \tag{37}$$

Подставляя ряд (37) в уравнение (36), получим цепочку уравнений для коэффициентов разложения $f_k(\mathbf{r},\boldsymbol{\Omega},E)$:

$$\tau_p(E_0)\,\widehat{I}_{el}(f_0) = 0,$$

$$\tau_p(E_0)\,\widehat{I}_{el}(f_1) = v\boldsymbol{\Omega}\nabla_{\mathbf{r}} f_0 + \boldsymbol{\Phi}\nabla_{\mathbf{p}} f_0,$$

$$\tau_p(E_0)\,\widehat{I}_{el}(f_2) = v\boldsymbol{\Omega}\nabla_{\mathbf{r}} f_1 + \boldsymbol{\Phi}\nabla_{\mathbf{p}} f_1 - \tau_E(E_0)\,\widehat{I}_{in}(f_0), \tag{38}$$

....

Здесь

$$\widehat{I}_{el}(f) = \int_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E,\boldsymbol{\Omega}',\boldsymbol{\Omega})}{d\Omega} f(\boldsymbol{\Omega}',E)d\boldsymbol{\Omega}' - \Sigma_{el}(E,\boldsymbol{\Omega})f(\boldsymbol{\Omega},E),$$

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{el}(E,\boldsymbol{\Omega}',\boldsymbol{\Omega})}{d\Omega} = \sum_j \Big((N_{\mathbf{q},j}+1) &\times S_j^r\big(p(E',\boldsymbol{\Omega}')\boldsymbol{\Omega}', p(E,\boldsymbol{\Omega})\boldsymbol{\Omega}\big)\\ &+ N_{q,j}S_j^a\big(p(E',\boldsymbol{\Omega}')\boldsymbol{\Omega}', p(E,\boldsymbol{\Omega})\boldsymbol{\Omega}\big)\Big)\\ &\times \big(p'(E',\boldsymbol{\Omega}')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E},\end{aligned} \tag{39}$$

$$\begin{aligned}\Sigma_{el}(E,\boldsymbol{\Omega}) = \int \sum_j \Big((N_{\mathbf{q},j}+1) &\times S_j^r\big(p(E,\boldsymbol{\Omega})\boldsymbol{\Omega}, p(E',\boldsymbol{\Omega}')\boldsymbol{\Omega}'\big)\\ &+ N_{q,j}S_j^a\big(p(E,\boldsymbol{\Omega})\boldsymbol{\Omega}, p(E',\boldsymbol{\Omega}')\boldsymbol{\Omega}'\big)\Big)\\ &\times \big(p'(E',\boldsymbol{\Omega}')\big)^2 \frac{\partial p'}{\partial E'}\bigg|_{E'=E} d\boldsymbol{\Omega}'.\end{aligned}$$

В силу принципа детального равновесия выполняются равенства

$$S_j^r\big(p(E,\boldsymbol{\Omega}')\boldsymbol{\Omega}', p(E,\boldsymbol{\Omega})\boldsymbol{\Omega}\big) = S_j^r\big(p(E,\boldsymbol{\Omega})\boldsymbol{\Omega}, p(E,\boldsymbol{\Omega}')\boldsymbol{\Omega}'\big),$$

$$S_j^a\big(p(E,\Omega')\Omega',\, p(E,\Omega)\Omega\big) = S_j^a\big(p(E,\Omega)\Omega,\, p(E,\Omega')\Omega'\big). \tag{40}$$

Интеграл неупругих столкновений задается выражениями в фигурных скобках в формулах (16), (18). Из равенств (40) следует соотношение

$$\int\limits_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E,\Omega',\Omega)}{d\Omega}\, d\Omega' - \Sigma_{el}(E,\Omega) = 0, \tag{41}$$

т.е. закон сохранения числа частиц в упругом рассеянии выполняется.

Прежде всего рассмотрим случай, когда закон дисперсии не зависит от направления импульса, т.е. $p = p(E)$, а вероятности рассеяния $S_j^r(p\Omega', p\Omega)$, $S_j^a(p\Omega', p\Omega)$ зависят лишь от угла рассеяния:

$$S_j^r(p\Omega', p\Omega) = S_j^r\big(E, (\Omega\cdot\Omega')\big),$$

$$S_j^a(p\Omega', p\Omega) = S_j^a\big(E, (\Omega\cdot\Omega')\big). \tag{42}$$

При этом и дифференциальное сечение рассеяния $\frac{d\sigma_{el}(E,\Omega',\Omega)}{d\Omega}$ зависит лишь от угла рассеяния. Изотропность закона дисперсии приводит к соотношению

$$\Sigma_{el}(E,\Omega) = \int\limits_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E,\Omega,\Omega')}{d\Omega}\, d\Omega',$$

и в силу равенств (40) сечение рассеяния оказывается симметричным

$$\frac{d\sigma_{el}(E,\Omega',\Omega)}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{el}(E,\Omega,\Omega')}{d\Omega}. \tag{43}$$

Вследствие (42) и независимости p от Ω дифференциальное сечение рассеяния $\frac{d\sigma_{el}(E,\Omega',\Omega)}{d\Omega}$ зависит лишь от угла рассеяния и $\Sigma_{el}(E,\Omega) = \Sigma_{el}(E)$. В этом случае собственными функциями упругой части интеграла столкновений являются сферические гармоники. Этот результат легко получить, раскладывая $\frac{d\sigma_{el}(E,\Omega',\Omega)}{d\Omega}$ по полиномам Лежандра и применяя теорему сложения полиномов Лежандра (см., например, [11]). Из закона сохранения числа частиц (41) следует, что собственной функцией, соответствующей нулевому собственному числу оператора $\tau_p(E_0)\,\widehat{I}_{el}$, иными словами, решением первого уравнения цепочки (38) является изотропная функция $U_0(\mathbf{r}, E)$.

Условием разрешимости второго и последующих уравнений цепочки является ортогональность правой части решению сопряженного им однородного уравнения. В силу (43) оператор $\tau_p(E_0)\,\widehat{I}_{el}$ — самосопряженный, поэтому правая часть должна быть ортогональна решению первого уравнения цепочки, т.е. изотропной функции. Найдем правую часть второго уравнения. Поскольку f_0 не зависит от Ω, то

$$\frac{\partial f_0\big(E(p)\big)}{\partial p_i} = \frac{\partial f}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial p_i} = \Omega_i \frac{\partial E}{\partial p}\frac{\partial f}{\partial E},$$

и правая часть второго уравнения есть скалярное произведение Ω и не зависящего от Ω вектора. Проекции вектора Ω на оси выражаются через сферические гармоники $Y_{1,m}(\Omega)$,

$$\Omega_x = \mathrm{Re}\,\big(Y_{1,1}(\Omega)\big), \quad \Omega_y = \mathrm{Im}\,\big(Y_{1,1}(\Omega)\big),$$

$$\Omega_z = Y_{1,0}(\Omega), \tag{44}$$

поэтому правая часть второго уравнения цепочки является их линейной комбинацией, которая, естественно, ортогональна изотропной функции. Следовательно, второе уравнение цепочки всегда разрешимо.

Для отыскания решения второго уравнения заметим, что сферические гармоники $Y_{1,m}(\Omega)$ являются собственными функциями оператора $\tau_p(E_0)\,\widehat{I}_{el}$, относящимися к одному собственному числу $\lambda_1(E)$. Поэтому решением второго уравнения будет линейная комбинация сферических гармоник $Y_{1,m}(\Omega)$, представляющая собой правую часть, деленная на $\lambda_1(E)$. Это решение определено с точностью до изотропной функции $U_1(\mathbf{r}, E)$ и имеет вид

$$f_1(\mathbf{r},\Omega,E) = \Omega\bigg(\frac{v}{\lambda_1(E)}\,\nabla_{\mathbf{r}}U_0(\mathbf{r},E) + \frac{\mathbf{\Phi}}{\lambda_1(E)}\,\frac{\partial E}{\partial p}\,\frac{\partial U_0(\mathbf{r},E)}{\partial E}\bigg) + U_1(\mathbf{r},E). \tag{45}$$

Для последующих $k = 2, 3, \ldots$ решение f_k каждого уравнения цепочки также определено с точностью до изотропной функции $U_k(\mathbf{r}, E)$ и существует при выполнении условия разрешимости

$$\int\limits_{4\pi} \big(v\Omega\nabla_{\mathbf{r}} f_{k-1} + \mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{p}} f_{k-1} - \tau_E(E_0)\,\widehat{I}_{in}\,(f_{k-2})\big)d\Omega = 0. \tag{46}$$

Уравнения для $U_k(\mathbf{r}, E)$ следуют из условия разрешимости задач для f_{k+2}. В частности, условие разрешимости третьего уравнения цепочки дает

$$\frac{v^2}{3\lambda_1(E)}\,\Delta U_0 + \frac{v^2}{3\lambda_1(E)}\,\frac{\partial U_0}{\partial E}\,(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}) + \frac{2v^2}{3\lambda_1(E)}\,\frac{\partial}{\partial E}\,(\mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{r}}U_0) + \frac{pv}{3}\mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{r}}U_0\,\frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{v}{p\lambda_1(E)}\right) + \frac{v}{p\lambda_1(E)}\,(\mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{r}}U_0) + \Phi^2\,\frac{pv}{3}\,\frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{v}{p\lambda_1(E)}\,\frac{\partial U_0}{\partial E}\right) + \frac{v\Phi^2}{p\lambda_1(E)}\,\frac{\partial U_0}{\partial E} - \tau_E(E_0)\,\frac{1}{4\pi}\int \widehat{I}_{in}\,(U_0)d\Omega = 0. \tag{47}$$

Здесь учтено, что $v = \partial E/\partial p$. Умножая (47) на p^2 и интегрируя по p, можно получить уравнение неразрывности для электронов. В самом деле, интеграл от неупругой части интеграла столкновений обращается в ноль вследствие закона сохранения числа частиц, а интегрирование по импульсу члена $\mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{p}} f_1$ дает ноль. Это приводит к соотношению

$$\operatorname{div}\mathbf{J} = 0, \ \ \mathbf{J} = \int\limits_{4\pi} v\mathbf{\Omega} f_1 d^3p = \nabla_{\mathbf{r}} \int\limits_0^{\infty} \frac{4\pi v^2}{3\lambda_1(E)} U_0 p^2 dp$$
$$+ \mathbf{\Phi} \int\limits_0^{\infty} \frac{4\pi v^2}{3\lambda_1(E)} \frac{\partial U_0}{\partial E} p^2 dp. \qquad (48)$$

Это и есть уравнение неразрывности, в котором ток задается суммой диффузионной и дрейфовой компонент. Если считать зону параболической, а распределение электронов равновесным (т.е. положить, что количество электронов с энергией E в dE, равное $4\pi U_0(\mathbf{r}, E)p^2(E)\frac{dp}{dE}dE$, есть $n(\mathbf{r})e^{-E/kT}E^{1/2}dE/ / \int\limits_0^{\infty} e^{-E/kT}E^{1/2}dE)$, то выражение для тока принимает вид

$$\mathbf{J} = \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}) \frac{\int\limits_0^{\infty} \frac{v^2 e^{-E/kT}}{3\lambda_1(E)} dE}{\int\limits_0^{\infty} e^{-E/kT} E^{1/2} dE} - \Phi n(\mathbf{r}) \frac{1}{kT} \frac{\int\limits_0^{\infty} \frac{v^2 e^{-E/kT}}{3\lambda_1(E)} dE}{\int\limits_0^{\infty} e^{-E/kT} E^{1/2} dE}, \qquad (49)$$

и соотношение Эйнштейна между коэффициентом диффузии и подвижностью выполняется.

Если зависимость от $\mathbf{\Omega}'$, $\mathbf{\Omega}$ в ядрах неупругой части интеграла столкновений сводится лишь к зависимости от скалярного произведения $(\mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega})$, то можно показать, что решение k-го уравнения цепочки имеет вид

$$f_k(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = U_k + \frac{v}{\lambda_1(E)} \mathbf{\Omega}\bigg(\nabla_{\mathbf{r}} U_{k-1}(\mathbf{r}, E)$$
$$+ \mathbf{\Phi} \frac{\partial U_{k-1}(\mathbf{r}, E)}{\partial E}\bigg) + \sum_{l=2}^{k} \sum_{m=0}^{l} Y_{l,m}(\mathbf{\Omega}) F_{l,m}^k(U_0, \ldots, U_{k-2}), \qquad (50)$$

где $F_{l,m}^k(U_0, \ldots, U_{k-2})$ — коэффициенты, являющиеся известными функциями $U_0, \ldots, U_{k-2}$, а условие разрешимости задачи для f_{k+2} приводит к уравнению

$$\frac{v^2}{3\lambda_1(E)} \Delta U_k + \frac{v^2}{3\lambda_1(E)} \frac{\partial U_k}{\partial E} (\operatorname{div}\mathbf{\Phi}) + \frac{2v^2}{3\lambda_1(E)}$$
$$\times \frac{\partial}{\partial E} (\mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{r}} U_k) + \frac{pv}{3} \mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{r}} U_k \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{v}{p\lambda_1(E)}\right)$$
$$+ \frac{v}{p\lambda_1(E)} (\mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{r}} U_k) + \Phi^2 \frac{pv}{3} \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{v}{p\lambda_1(E)} \frac{\partial U_k}{\partial E}\right)$$
$$+ \frac{v\Phi^2}{p\lambda_1(E)} \frac{\partial U_k}{\partial E} - \tau_E(E_0) \frac{1}{4\pi} \int \widehat{I}_{in}(U_k) d\Omega = 0. \qquad (51)$$

Таким образом, задача определения функции $f_k(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ с помощью представления (50) сводится к задаче для $U_k(\mathbf{r}, E)$, зависящих лишь от пространственных переменных и энергии. Функции $U_k(\mathbf{r}, E)$ могут определяться последовательно из уравнений (51), следующих из условий разрешимости задач для $f_{k+2}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$. Найденные функции $f_k(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ не удовлетворяют краевым условиям на границе области, и для компенсации возникающей невязки необходимо добавить к $f_k(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ функции типа пограничного слоя.

Рассмотрим построение погранслойных функций для областей с неплоскими гладкими граничными поверхностями, радиус кривизны которых велик по сравнению с длиной изотропизации $v_0\tau_p(E_0)$, и граничных условий, медленно меняющихся вдоль границы. Введем в окрестности границы систему криволинейных координат. Две координаты, t_1 и t_2, выберем на поверхности Γ, ограничивающей изучаемую область, и через каждую точку $\mathbf{r}_0$ на поверхности проведем нормаль. Для любой точки $\mathbf{r}$ в достаточно малой окрестности границы найдется точка $\mathbf{r}_0$ такая, что $\mathbf{r}$ будет лежать на нормали, проведенной из $\mathbf{r}_0$. Тогда в качестве координат точки $\mathbf{r}$ могут быть выбраны координаты t_1, t_2 точки $\mathbf{r}_0$ и расстояние z по нормали от $\mathbf{r}_0$ до $\mathbf{r}$. Декартовы координаты точки $\mathbf{r}$ тогда можно записать следующим образом:

$$x_j = x_{0j}(t_1, t_2) + zn_j, \quad j = 1, 2, 3. \qquad (52)$$

Здесь n_j — декартовы координаты единичного вектора нормали $\mathbf{n}$ к поверхности Γ в точке $\mathbf{r}_0$, x_{0j} — декартовы координаты точки $\mathbf{r}_0$. Соотношения (52) могут быть переписаны в виде

$$x_j = x_j(t_1, t_2, z), \quad j = 1, 2, 3. \qquad (53)$$

Используя, как и раньше, величину $v_0\sqrt{\tau_p(E_0)\tau_E(E_0)}$ в качестве масштаба координат и вводя погранслойную переменную $\xi = z/\delta$, запишем уравнение (1) в переменных ξ, t_1, t_2:

$$v\mathbf{\Omega}\cdot\mathbf{n} \frac{\partial f}{\partial \xi} = \tau_p(E_0)\, \widehat{I}_{el}(f) - \delta\left(\sum_{k=1}^{2}\sum_{i=1}^{3} \Omega_{x_i} \frac{\partial t_k}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial t_k}\right)$$
$$- \delta\mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{p}} f + \delta^2 \tau_E(E_0)\, \widehat{I}_{in}(f), \qquad (54)$$

где Ω_{x_i} — проекции направления импульса $\mathbf{\Omega}$ на оси декартовой системы координат. Граничное условие (35) приобретает вид

$$f(\xi, t_1, t_2, \mathbf{\Omega}, E)\Big|_{\substack{\xi=0 \\ \mathbf{n}\cdot\mathbf{\Omega}>0}} = f_{\Gamma}(t_1, t_2, \mathbf{\Omega}, E). \qquad (55)$$

Таким образом, задача оказывается одномерной, а граничное условие и само решение параметрически зависят от криволинейных координат границы. Решение задачи (54), (55) будем искать в виде ряда по степеням малого параметра δ:

$$f(\xi, t_1, t_2, \mu_\Omega, \varphi_\Omega, E) = \sum_{k=0}^{\infty} \delta^k u_k(\xi, t_1, t_2, \mu_\Omega, \varphi_\Omega, E). \qquad (56)$$

Здесь $\mu_\Omega = \cos\theta_\Omega$, а углы θ_Ω, φ_Ω — угловые координаты вектора $\mathbf{\Omega}$ в полярной системе координат, ось которой совпадает с нормалью к границе.

Подставляя (56) в (54), получим цепочку уравнений для коэффициентов разложения u_k:

$$\mu_\Omega \frac{\partial u_0(\xi, t_1, t_2, \mu_\Omega, \varphi_\Omega, E)}{\partial \xi} = \tau_p(E_0)\, \widehat{I}_{el}\, (u_0),$$

$$\mu_\Omega \frac{\partial u_1(\xi, t_1, t_2, \mu_\Omega, \varphi_\Omega, E)}{\partial \xi} = \tau_p(E_0)\, \widehat{I}_{el}\, (u_1)$$

$$- \sum_{k=1}^{2} \sum_{i=1}^{3} \Omega_{x_i} \frac{\partial t_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_0}{\partial t_k} - \mathbf{\Phi} \nabla_{\mathbf{p}} u_0,$$

$$\mu_\Omega \frac{\partial u_2(\xi, t_1, t_2, \mu_\Omega, \varphi_\Omega, E)}{\partial \xi} = \tau_p(E_0)\, \widehat{I}_{el}\, (u_2)$$

$$- \sum_{k=1}^{2} \sum_{i=1}^{3} \Omega_{x_i} \frac{\partial t_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_1}{\partial t_k} - \mathbf{\Phi} \nabla_{\mathbf{p}} u_1 + \tau_E(E_0)\, \widehat{I}_{in}\, (u_0),$$

. . . .

$$\mu_\Omega \frac{\partial u_k(\xi, t_1, t_2, \mu_\Omega, \varphi_\Omega, E)}{\partial \xi} = \tau_p(E_0)\, \widehat{I}_{el}\, (u_k)$$

$$- \sum_{k=1}^{2} \sum_{i=1}^{3} \Omega_{x_i} \frac{\partial t_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_{k-1}}{\partial t_k} - \mathbf{\Phi} \nabla_{\mathbf{p}} u_{k-1} + \tau_E(E_0)\, \widehat{I}_{in}\, (u_{k-2}), \tag{57}$$

. . . .

Граничные условия для функций u_k следуют из (55):

$$u_k(\xi, \mu_\Omega, \varphi_\Omega, E)\big|_{\substack{\mu>0\\ \xi=0}} = \delta_{k,0} f_\Gamma(t_1, t_2, \mu_\Omega, \varphi_\Omega, E),$$

$$k = 0, 1, \ldots, \tag{58}$$

где $\delta_{k,0}$ — символ Кронекера.

Погранслойная функция наряду с граничным условием (58) должна удовлетворять еще одному требованию. Это требование заключается в согласовании внутреннего и внешнего разложений в некоторой области перекрытия, в которой пригодны оба разложения. С математической точки зрения такое согласование (принцип сращивания) сводится к совпадению разложений в промежуточном пределе. Использование этого принципа позволяет последовательно определять граничные условия для функций $U_k(\mathbf{r}, E)$, удовлетворяющих уравнениям (51), и условия на бесконечности для u_k.

Отметим, что полученная форма уравнений (47), (51) справедлива только в том случае, когда вероятности рассеяния $S_j^r(p\mathbf{\Omega}', p\mathbf{\Omega})$, $S_j^a(p\mathbf{\Omega}', p\mathbf{\Omega})$ зависят лишь от угла рассеяния. В то же время имеются механизмы рассеяния, при которых

$$\frac{d\sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega})}{d\Omega}$$

зависит от направлений $\mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega}$, по отдельности. Такая зависимость возникает, например, при взаимодействии электронов с акустическими ветвями пьезоэлектрических колебаний решетки в соединениях $\mathrm{A^{III}B^{V}}$. Для кубических кристаллов этих соединений коэффициент $B(\mathbf{q}, j)$ в формуле (4) имеет вид (см. [6, табл. 14.1])

$$B(\mathbf{q}, j) = \frac{4\pi\beta e}{\varepsilon} f_j(\vartheta, \varphi), \tag{59}$$

$$f_j(\vartheta, \varphi) = 2\xi_{jx} Y_{10}(\vartheta, \varphi) \cdot \mathrm{Re}\,\big(Y_{11}(\vartheta, \varphi)\big)$$
$$+ 2\xi_{jy} Y_{10}(\vartheta, \varphi) \cdot \mathrm{Im}\,\big(Y_{11}(\vartheta, \varphi)\big)$$
$$+ 2\xi_{jz}\, \mathrm{Re}\,\big(Y_{11}(\vartheta, \varphi)\big) \cdot \mathrm{Im}\,\big(Y_{11}(\vartheta, \varphi)\big).$$

Здесь ϑ и φ — полярные углы вектора $\mathbf{q}$ относительно оси Z, β — пьезоэлектрический модуль кристалла, ε — диэлектрическая проницаемость, e — заряд электрона. Вектор $(\xi_{jx}, \xi_{jy}, \xi_{jz})$ задает направление колебаний j-й акустической ветви. Зависимость дифференциального сечения рассеяния электронов от направления вектора $\mathbf{q}$ в этом случае определяется функцией $\big(f_j(\vartheta, \varphi)\big)^2$. Раскладывая ее по сферическим гармоникам, найдем

$$\big(f_j(\vartheta, \varphi)\big)^2 = \sum_{LM} D_{j,LM} Y_{LM}(\vartheta, \varphi). \tag{60}$$

Поскольку $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$, то $Y_{LM}(\vartheta, \varphi)$ можно рассмотреть как функцию от векторов $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$. Согласно [12], разложение функций $Y_{LM}(\vartheta, \varphi)$ по биполярным гармоникам ранга L имеет вид

$$Y_{LM}(\vartheta, \varphi) = 4\pi \sum_{l_1, l_2 = 0}^{\infty} a^L_{l_1, l_2} \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)}}$$
$$\times C^{L0}_{l_1 0 l_2 0} \big\{Y_{l_1}(\mathbf{\Omega}) \otimes Y_{l_2}(\mathbf{\Omega}')\big\}_{LM}, \tag{61}$$

$$a^L_{l_1, l_2} = \Big(-1\Big)^{\frac{l_1 - l_2 - L}{2}} \frac{2^{l_1}}{(2l_1+1)!!} \frac{\Gamma\left(\frac{l_1+l_2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{L+3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{L}{2}\right) \Gamma\left(\frac{-l_1+l_2+3}{2}\right)}$$
$$\times F\left(\frac{l_1+l_2}{2}, \frac{l_1-l_2-1}{2}, l_1 + \frac{3}{2}, 1\right) = \Big(-1\Big)^{\frac{l_1-l_2-L}{2}}$$
$$\times \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{L+3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{L}{2}\right) \Gamma\left(\frac{-l_1+l_2+3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{l_1-l_2+3}{2}\right) \left(\frac{l_1+l_2}{2}+1\right) \left(\frac{l_1+l_2}{2}\right)}.$$

Здесь $\mathbf{\Omega}$, $\mathbf{\Omega}'$ — направления векторов $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ соответственно, $F(a, b, c; z)$ — гипергеометрическая функция. Суммирование в (61) проводится по всем целым положительным значениям l_1 и l_2, разрешенным правилом сложения моментов $(|l_1 - l_2| \le L \le l_1 + l_2)$ и законом сохранения четности ($l_1 + l_2 - L$ — четное число). Биполярные сферические гармоники выражаются через сферические функции разных аргументов формулой

$$\big\{Y_{l_1}(\mathbf{\Omega}) \otimes Y_{l_2}(\mathbf{\Omega}')\big\}_{LM} = \sum_{m_1, m_2} C^{LM}_{l_1 m_1 l_2 m_2} Y_{l_1 m_1}(\mathbf{\Omega}) Y_{l_2 m_2}(\mathbf{\Omega}'). \tag{62}$$

В выражениях (61), (62) через $C^{LM}_{l_1 m_1 l_2 m_2}$ обозначены коэффициенты Клебша–Гордана. Формулы (60)–(62) и определяют зависимость вероятности рассеяния электрона от направлений $\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}'$.

В том случае, когда вероятности рассеяния электрона $S_j^r(p\mathbf{\Omega}', p\mathbf{\Omega})$, $S_j^a(p\mathbf{\Omega}', p\mathbf{\Omega})$ зависят от направлений $\mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega}$, по отдельности, сферические гармоники $Y_{1,m}(\mathbf{\Omega})$ не обязательно являются собственными функциями $\tau_p(E_0)\,\widehat{I_{el}}$. Это связано как с тем, что сечение $\frac{d\sigma_{el}(E,\mathbf{\Omega}',\mathbf{\Omega})}{d\Omega}$ в этом случае не может быть разложено по полиномам Лежандра от скалярного произведения $\mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega}$, так и с тем, что $\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})$ зависит от $\mathbf{\Omega}$, и собственные функции интегральной части оператора $\tau_p(E_0)\,\widehat{I_{el}}$ уже не являются собственными функциями всего оператора $\tau_p(E_0)\,\widehat{I_{el}}$. Чтобы провести разделение угловой и энергетической релаксации и в этом случае, необходимо модифицировать рассмотренный выше алгоритм решения цепочки уравнений (38). При модификации алгоритма примем во внимание неизотропность закона дисперсии. Исследуем, как изменится в этом случае дифференциальный оператор второго порядка по пространственным переменным в уравнении (47). Для простоты дальнейших выкладок рассмотрим случай, когда внешняя сила, действующая на электроны, равна нулю.

Прежде всего заметим, что ядро (39) интегрального оператора, входящего в $\tau_p(E_0)\,\widehat{I_{el}}$, в рассматриваемом случае оказывается несимметричным. Чтобы симметризовать ядро и избавиться от зависимости полного сечения от $\mathbf{\Omega}$ в уходном члене оператора $\tau_p(E_0)\,\widehat{I_{el}}$, умножим все уравнения цепочки (38) на

$$\left(\big(p(E, \mathbf{\Omega})\big)^2 \frac{\partial p(E, \mathbf{\Omega})}{\partial E} \Big/ \Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})\right)^{1/2}$$

и перейдем к новым неизвестным функциям

$$\Lambda_k(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = f_k(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) \times \left(\big(p(E, \mathbf{\Omega})\big)^2 \frac{\partial p(E, \mathbf{\Omega})}{\partial E}\, \Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})\right)^{1/2}.$$

Для них можно записать цепочку уравнений

$$\tau_p(E_0)\hat{\tilde{I}}_{el}(\Lambda_0) = 0,$$

$$\tau_p(E_0)\hat{\tilde{I}}_{el}(\Lambda_1) = \frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})}\big(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}\big(\Lambda_0/g(E, \mathbf{\Omega})\big) + \mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{p}}\big(\Lambda_0/g(E, \mathbf{\Omega})\big)\big), \quad (63)$$

$$\tau_p(E_0)\hat{\tilde{I}}_{el}(\Lambda_2) = \frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})}\big(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}\big(\Lambda_1/g(E, \mathbf{\Omega})\big) + \mathbf{\Phi}\nabla_{\mathbf{p}}\big(\Lambda_1/g(E, \mathbf{\Omega})\big) - \tau_E(E_0)\,\widehat{I_{in}}\,\big(\Lambda_0/g(E, \mathbf{\Omega})\big)\big),$$

. . . .

Здесь

$$g(E, \mathbf{\Omega}) = \left(\big(p(E, \mathbf{\Omega})\big)^2 \frac{\partial p(E, \mathbf{\Omega})}{\partial E}\, \Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})\right)^{1/2},$$

$$\mathbf{v}(E, \mathbf{\Omega}) = \nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p})\big|_{\mathbf{p}=p(E,\mathbf{\Omega})\mathbf{\Omega}}.$$

Используя (39), легко показать, что ядро интегрального оператора в $\tau_p(E_0)\hat{\tilde{I}}_{el}$:

$$\left(\big(p(E, \mathbf{\Omega})\big)^2 \frac{\partial p(E, \mathbf{\Omega})}{\partial E} \Big/ \Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})\right)^{1/2} \frac{d\sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega})}{d\Omega} \times \frac{1}{\left(\big(p(E, \mathbf{\Omega}')\big)^2 \frac{\partial p(E,\mathbf{\Omega}')}{\partial E}\, \Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega}')\right)^{1/2}},$$

является симметричным, а уходный член превращается в константу.

Вследствие (41) решением первого уравнения цепочки (63) является функция

$$\Lambda_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = U_0(\mathbf{r}, E) g(E, \mathbf{\Omega}). \quad (64)$$

Условием разрешимости второго уравнения цепочки является ортогональность правой части функции (64). Для простоты дальнейших выкладок рассмотрим случай, когда внешняя сила, действующая на электроны, равна нулю. В этом случае правая часть второго уравнения приобретает вид

$$\frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})}\big(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} U_0\big),$$

и условие ортогональности сводится к

$$\int_{4\pi} \frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})}\big(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} U_0\big) g(E, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} = \int_{4\pi} \big(p(E, \mathbf{\Omega})\big)^2 \frac{\partial p(E, \mathbf{\Omega})}{\partial E} \times \nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p})\big|_{\mathbf{p}=p(E,\mathbf{\Omega})\mathbf{\Omega}} d\mathbf{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} U_0 = 0. \quad (65)$$

Будем предполагать, что изоэнергетическая поверхность такова, что $p(E, \mathbf{\Omega}) = p(E, -\mathbf{\Omega})$. Тогда интеграл в (65) обращается в ноль и второе уравнение цепочки разрешимо всегда.

Найдем теперь решение второго уравнения цепочки, правая часть которого имеет вид

$$\frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})}\big(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} U_0\big) = \frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})} \times \left(v_{x_1}(E, \mathbf{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_1} + v_{x_2}(E, \mathbf{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_2} + v_{x_3}(E, \mathbf{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_3}\right).$$

Здесь вместо x, y, z использованы обозначения x_1, x_2, x_3 соответственно. Обозначим решения уравнений

$$\tau_p(E_0)\hat{\tilde{I}}_{el}(\Lambda) = \frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})}\, v_{x_i}(E, \mathbf{\Omega}) = Z_i(E, \mathbf{\Omega}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (66)$$

через Ψ_i (эти уравнения разрешимы, так как их правые части ортогональны решению однородного уравнения). Тогда решение второго уравнения цепочки можно записать в виде

$$\Lambda_1 = \Psi_1 \frac{\partial U_0}{\partial x_1} + \Psi_2 \frac{\partial U_0}{\partial x_2} + \Psi_3 \frac{\partial U_0}{\partial x_3}. \quad (67)$$

Представим решение (64) в другом виде. Обозначим через $\varphi_\nu(E, \mathbf{\Omega})$ ортонормированные собственные функции, а через $\kappa_\nu(E)$ — собственные числа оператора $\tau_p(E_0)\hat{\hat{I}}_{el}$. Вследствие симметрии ядра собственные числа вещественны. Собственные функции также можно считать вещественными. Из (66) следует, что

$$\Psi_i(E, \mathbf{\Omega}) = \sum_\nu \frac{\big(Z_i(E, \mathbf{\Omega}), \varphi_\nu(E, \mathbf{\Omega})\big)}{\kappa_\nu(E)} \varphi_\nu(E, \mathbf{\Omega}). \quad (68)$$

Поэтому

$$\Lambda_1 = \sum_{i=1}^{3} \sum_\nu a_{\nu,j}(E)\varphi_\nu(E, \mathbf{\Omega}) \frac{\partial U_0}{\partial x_i}, \quad (69)$$

где

$$a_{\nu,j}(E) = \frac{\big(Z_i(E, \mathbf{\Omega}), \varphi_\nu(E, \mathbf{\Omega})\big)}{\kappa_\nu(E)}.$$

Правая часть третьего уравнения цепочки тогда будет

$$\frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})} \big(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \big(\Lambda_1 / g(E, \mathbf{\Omega})\big) - \tau_E(E_0)\, \widehat{I}_{in}\ (U_0)\big)$$
$$= \frac{1}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})} \sum_{i=1}^{3} v(E, \mathbf{\Omega})_{x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^{3} \sum_\nu a_{\nu,j}\varphi_\nu(\mathbf{\Omega}) \frac{\partial U_0}{\partial x_j} \right)$$
$$- \frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})} \tau_E(E_0)\, \widehat{I}_{in}\ (U_0). \quad (70)$$

Для разрешимости третьего уравнения необходимо, чтобы скалярное произведение (67) на решение (64) обращалось в ноль. С учетом определения коэффициентов $a_{\nu,j}$ это дает

$$A_{11} \frac{\partial^2 U_0}{\partial x_1^2} + A_{22} \frac{\partial^2 U_0}{\partial x_2^2} + A_{33} \frac{\partial^2 U_0}{\partial x_3^2} + (A_{12} + A_{21}) \frac{\partial^2 U_0}{\partial x_1 \partial x_2}$$
$$+ (A_{13} + A_{31}) \frac{\partial^2 U_0}{\partial x_1 \partial x_3} + (A_{23} + A_{32}) \frac{\partial^2 U_0}{\partial x_2 \partial x_3}$$
$$- \tau_E(E_0) \int \frac{g^2(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})}\ \widehat{I}_{in}\ (U_0) d\mathbf{\Omega} = 0, \quad (71)$$
$$A_{ij} = \sum_\nu \kappa_\nu(E) a_{\nu,i}(E) a_{\nu,j}(E).$$

Эти соотношения показывают, что коэффициенты A_{ii}, $i = 1, 2, 3$, вообще говоря, различны, а A_{ij}, $i = 1, 2, 3$, $j = 1, 2, 3$, $i \neq j$ отличны от нуля. Можно показать, что в общем случае квадратичная форма с коэффициентами A_{ij} является положительно определенной, и, следовательно, дифференциальный оператор в (71) — эллиптический. Приведем без вывода условие разрешимости для рассматриваемого случая при наличии внешней силы, действующей на электроны,

$$\sum_i \sum_j A_{ij}(E) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial U_0}{\partial x_i} + \Phi_{x_i} \frac{\partial U_0}{\partial E} \right)$$
$$+ \sum_i \sum_j A_{ij}(E) \Phi_{x_j} \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\partial U_0}{\partial x_i} + \Phi_{x_i} \frac{\partial U_0}{\partial E} \right)$$
$$+ \sum_i \sum_j B_{ij}(E) \Phi_{x_j} \left(\frac{\partial U_0}{\partial x_i} + \Phi_{x_i} \frac{\partial U_0}{\partial E} \right)$$
$$- \int_{4\pi} \frac{g^2(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})} \tau_E(E_0)\ \widehat{I}_{in}\ (U_0) d\mathbf{\Omega} = 0. \quad (72)$$

Здесь

$$B_{ij}(E) = \sum_\nu \bigg(a_{\nu,i}(E) \big(b_{\nu,j}(E) + c_{\nu,j}(E)\big)$$
$$+ \frac{\partial a_{\nu,i}(E)}{\partial E} a_{\nu,i}(E) \kappa_\nu(E) \bigg),$$

$$b_{\nu,j}(E) = \int_{4\pi} \frac{\partial \varphi_\nu(E, \mathbf{\Omega})}{\partial E} v_{x_j} \frac{g(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})} d\mathbf{\Omega},$$

$$c_{\nu,j} = \int_{4\pi} \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\frac{1}{g(E, \mathbf{\Omega})} \right) \frac{g^2(E, \mathbf{\Omega})}{\Sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega})} \varphi_\nu(E, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega}.$$

Таким образом, при существенном различии характерных времен релаксации по импульсу и энергии описание кинетики электронов можно значительно упростить. Вместо решения кинетического уравнения для функции распределения, зависящей от шести переменных, необходимо отыскивать решения обобщенного уравнения неразрывности (т. е. уравнения анизотропной диффузии), зависящие от пространственных переменных и энергии, и погранслойные функции, зависящие от одной пространственной переменной и углов, для которых энергия оказывается параметром. Условия сращивания позволяют сформулировать недостающие граничные условия для решения указанных задач. В том случае, когда дифференциальное сечение упругого рассеяния зависит лишь от угла рассеяния, а закон дисперсии является изотропным, дифференциальный оператор второго порядка по пространственным переменным в уравнении, описывающем основную область, оказывается лапласианом, что соответствует изотропной диффузии. В более общем случае зависимости дифференциального сечения от направлений падающего и рассеянного электронов при произвольном симметричном законе дисперсии лапласиан в этом уравнении заменяется эллиптическим дифференциальным оператором, который учитывает анизотропный характер диффузии.

Отметим, что разделение процессов угловой и энергетической релаксации электронов может быть осуществлено и при других механизмах рассеяния. Так, например, в том случае, когда определяющим является рассеяние электронов на примесях, время релаксации по энергии может существенно превосходить время релаксации по импульсу, поскольку в силу большой разницы масс рассеяние оказывается почти упругим. Это дает возможность использовать изложенный выше алгоритм.

Заключение

Мы проанализировали выражения для интеграла столкновений электронов в зоне проводимости с фононами. Показано, что интеграл столкновений может быть разбит на части, соответствующие упругим и неупругим столкновениям, для процессов рассеяния электрона как с испусканием, так и с поглощением фонона. Для электронов с энергиями E_0, много большими энергии фононов $\hbar\overline{\omega}_q$, можно упростить выражение для интеграла неупругих столкновений, раскладывая его по малому параметру $\varepsilon = \hbar\overline{\omega}_q/E_0$. Были получены оценки характерных величин интегралов упругих и неупругих столкновений на основе расчета времени релаксации по импульсу и энергии. Приведены выражения для этих величин в случае параболической зоны для акустических фононов. Если основным механизмом рассеяния электронов является рассеяние на акустических фононах и сечение рассеяния электронов гладко зависит от угла рассеяния, то время релаксации по импульсу оказывается существенно меньшим, чем время релаксации по энергии. Нами было исследовано соотношение между характерными временами угловой и энергетической релаксации в GaAs для электронов с энергиями $0.5\,\text{eV} < E < 1\,\text{eV}$. Основными механизмами рассеяния для электронов таких энергий являются междолинное рассеяние и рассеяние на полярных оптических фононах. Показано, что время релаксации по импульсу в этом случае много меньше времени релаксации по энергии.

Наличие существенно различных характерных времен позволяет отнести задачу релаксации горячих электронов к классу многомасштабных задач. Установленная многомасштабность процесса переноса электронов позволяет утверждать, что кинетическое уравнение, записанное в безразмерных переменных, содержит малый параметр. Естественным подходом к решению таких задач является метод возмущений. Для корректного перехода от полной модели к сокращенному описанию с помощью уравнений меньшей размерности необходимо воспользоваться общей схемой асимптотического расщепления многомасштабных задач. Согласно этой схеме, процесс отыскания асимптотического разложения решения многомасштабных задач может быть разбит на два итерационных процесса — основной итерационный процесс и нахождение погранслойных функций. В ходе основного итерационного процесса формулируются уравнения меньшей размерности, являющиеся условием разрешимости задач для коэффициентов асимптотического разложения решения по параметру малости задачи. Поскольку полученное в основном итерационном процессе решение не удовлетворяет граничным условиям, оно должно быть дополнено погранслойными функциями, которые находятся во втором итерационном процессе.

Построение сокращенного описания процесса релаксации горячих электронов аналогично построению асимптотического разложения решения кинетического уравнения для электронов средних энергий в тяжелых мишенях, подробно рассмотренному в [5]. В работе реализован алгоритм асимптотического расщепления многомасштабных задач и сокращения размерности кинетического уравнения не только в случае изотропного закона дисперсии и зависимости вероятности рассеяния от угла рассеяния, но и в общем случае для произвольного симметричного закона дисперсии, когда вероятность рассеяния зависит от направлений падающего и рассеянного электронов по отдельности. С физической точки зрения такое сокращение размерности сводит описание процесса релаксации к диффузии изотропно распределенных по скоростям электронов, сопровождающейся перераспределением по энергии, в основном объеме и угловому перераспределению электронов с постоянной энергией в пограничных слоях.

В том случае, когда вероятность рассеяния зависит только от угла рассеяния, а закон дисперсии изотропен, дифференциальный оператор по пространственным переменным в уравнении, описывающем кинетику в основной области, представляет собой лапласиан, и электроны диффундируют изотропно. Однако при взаимодействии горячих электронов с фононами возможна ситуация, когда вероятность рассеяния зависит от направлений падающего и рассеянного электронов по отдельности. В работе показано, что такая ситуация реализуется, например, при взаимодействии с пьезоэлектрическими колебаниями решетки в соединениях $A^{III}B^{V}$. В этом случае разделение процессов угловой и энергетической релаксации по-прежнему возможно, однако оператор Лапласа в уравнении в основной области заменяется на эллиптический дифференциальный оператор, что соответствует анизотропной диффузии.

Список литературы

[1] *Бакалейников Л.А., Тропп Э.А.* // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 1. С. 16–26.
[2] *Бакалейников Л.А., Тропп Э.А.* // В кн.: „Методы рентгеноспектрального анализа“, Новосибирск: Наука, 1986. С. 111–120.
[3] *Bakaleinikov L.A., Tropp E.A.* // X-Ray Spectrometry. 1994. Vol. 23. P. 125–129.
[4] *Бакалейников Л.А., Конников С.Г., Погребицкий К.Ю., Сайфидинов Д.Ж., Тропп Э.А., Юрьев Ю.Н.* // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 4. С. 9–16.

[5] *Бакалейников Л.А.* Автореф. дис. на соискание уч. степени докт. физ.-мат. наук. Санкт-Петербург, 2013.
[6] *Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г.* Физика полупроводников. М.: Наука, 1977. 672 с.
[7] *Воробьев Л.Е., Данилов С.Н., Ивченко Е.Л., Левинштейн М.Е., Фирсов Д.А., Шалыгин В.А.* Кинетические и оптические явления в сильных электрических полях в полупроводниках и наноструктурах. СПб.: Наука, 2000. 157 с.
[8] *Воробьев Л.Е.* Механизмы рассеяния носителей заряда в полупроводниках: Учебное пособие. Л.: ЛПИ, 1988. 99 с.
[9] *Vasileska D., Goodnick S.M.* // Materials Science and Engineering R. 2002. Vol. 38. P. 181–236.
[10] *Тропп Э.А.* Автореф. дис. на соискание уч. степени докт. физ.-мат. наук. Л., 1984.
[11] *Градштейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Изд. 4-е, перераб. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963.
[12] *Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.* Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.