Деформационное и поляризационное рассеяния. В выражение (1) входит матричный элемент M возмущения δV на блоховских ф-циях ψ (см. *Блоховские электроны*), обычно δV и ψ неизвестны, поэтому M можно найти только численными расчётами. Однако если рассеяние происходит на ДВ-фононах, эту трудность можно обойти. Для этого следует усреднить δV по объёму с размерами, бóльшими постоянной решётки a_0 и меньшими длины волны фонона $\lambda = 2\pi/q$. В результате усреднения появляется электрич. макрополе $e\varphi$. Для δV, созданного акустич. фононом, $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ ($\boldsymbol{r}$ — координата точки, в окрестности к-рой произведено усреднение) представляет собой электрич. поле, сопровождающее волну деформации (пьезополе). В случае оптич. фонона $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ — поле, возникающее из-за относит. смещения разноимённо заряженных подрешёток (см. *Динамика кристаллической решётки*). Рассеяние, обусловленное электрич. макрополем, наз. поляризационным. Матричные элементы $\bar{M}$ для рассеяния, обусловленного макрополем, можно вычислять, представляя волновые ф-ции электрона в виде плоских волн.

Др. источником рассеяния является микрополе $\delta\tilde{V} = \delta V - e\varphi$, выпавшее при усреднении. В области усреднения, где $e\varphi$ почти постоянно, δV — почти периодич. ф-ция r. В этой области электрон движется в периодич. поле $V_0 + \delta\tilde{V}$ и его закон дисперсии $\mathcal{E}'(\boldsymbol{p})$ отличается от закона дисперсии $\mathcal{E}(\boldsymbol{p})$ в идеальной решётке. В др. области усреднения будут другие $\delta\tilde{V}'$ и другие $\mathcal{E}'(\boldsymbol{p})$. Т. к. частóты фононов меньше электронных, то закон дисперсии $\mathcal{E}(\boldsymbol{p})$ «следит» за колебаниями решётки, Т. о., в кристалле, в к-ром возбуждены ДВ-фононы, закон дисперсии медленно меняется в пространстве и времени; он описывается ф-цией $\mathcal{E}(\boldsymbol{p}; \boldsymbol{r}, t)$, характерные масштабы изменения к-рой такие же, как у $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$. Двигаясь в среде с перем. законом дисперсии, электрон рассеивается (как свет в мутной среде), даже если макрополе отсутствует. Такое рассеяние наз. деформационным.

Матричные элементы $\tilde{M}$ деформац. рассеяния тоже можно вычислять, заменяя блоховские ф-ции на плоские волны, если в качестве возмущения брать не $\delta\tilde{V}$, а т. н. деформац. потенциал $w(\boldsymbol{r}, t)$. В полупроводнике с невырожденной зоной $w(\boldsymbol{r}, t)$ имеет смысл сдвига дна или потолка зоны в точке $\boldsymbol{r}$ в момент t, т. е. $w(\boldsymbol{r}, t) = \mathcal{E}(\boldsymbol{p}; \boldsymbol{r}, t) - \mathcal{E}(p_0)$, где p_0 соответствует экстремуму зоны (или центру долины); в *многодолинном полупроводнике* деформац. потенциал различен для электронов разных долин). В металле $w(\boldsymbol{r}, t)$ — сдвиг поверхности Ферми, так что w зависит дополнительно от положения p на поверхности Ферми.

Матричные элементы в случае поляризационного $\bar{M}$ и деформационного $\tilde{M}$ рассеяний, вычисленные через $e\varphi$ и w, всегда сдвинуты по фазе на $\pi/2$. Это означает, что поляризац. и деформац. рассеяния, обусловленные одной и той же фононной модой, не интерферируют. Поэтому говорят о четырёх механизмах рассеяния: DA, DO, PA, PO, где первая буква указывает на характер рассеяния (деформационный или поляризационный), вторая — на ветвь фононов (акустическая или оптическая).

Для вычисления $\bar{M}$ и $\tilde{M}$ необходимо выразить $e\varphi$ и w через смещения атомов решётки. Связь φ со смещениями атомов находят из *Пуассона уравнения* $\nabla^2\varphi = 4\pi\operatorname{div}\boldsymbol{P}$, где $\boldsymbol{P}$ — дипольный момент единицы объёма, возникший при однородной статич. деформации решётки из-за смещений ядер и связанного с этим смещения электронов. Для деформации, созданной акустич. фононами $P_j = \beta_{jkl}\, u_{kl}$, где u_{kl} — тензор деформации, а β_{jkl} выражаются через пьезомодули. При деформации, созданной оптич. фононами $P_j = \gamma_{jk}\,\xi_k$, где ξ — вектор относит. смещения подрешёток, а γ_{jk} выражаются через статич. и динамич. диэлектрич. проницаемости (см. ниже).

Число независимых констант β и γ определяется *симметрией кристалла*. Так, в кубич. кристаллах с центром инверсии $\beta_{jkl} = \gamma_{jk} = 0$, так что поляризац. рассеяние невозможно. В кубич. кристалле с двумя атомами в элементарной ячейке (большинство полупроводников) возможно поляризац. рассеяние для акустич. и оптич. фононов.

Деформац. потенциал $w(\boldsymbol{r}, t)$ определяется смещениями атомов в точке $\boldsymbol{r}$ в момент t. Для акустич. фононов $w = \Xi_{ij}\, u_{ij}$, для оптич. фононов — $w = \Upsilon_i\ \xi_i$. Здесь Ξ, Υ — т. н. константы деформац. потенциала. Их число, кроме симметрии кристалла, зависит ещё от положения p_0 в полупроводниках или на поверхности Ферми в металлах. В кубич. полупроводнике с $p_0 = 0$ из симметрии следует, что $\Xi_{ij} = \Xi\delta_{ij}$ и $\Upsilon_i = 0$. Это значит, что $w = \Xi u$, где $u = u_{11} + u_{22} + u_{33}$ — относит. изменение объёма при деформации. Т. к. для поперечных акустич. фононов $u = 0$, то DA-рассеяние разрешено только для продольных фононов, DO-рассеяние запрещено для обеих ветвей. Если p_0 лежит не в центре зоны Бриллюэна, то возможны DA- и DO-рассеяния на поперечных акустич. фононах.

Времена релаксации τ_p и $\tau_{\mathcal{E}}$ можно найти, если вычислить, с какой скоростью электрон с импульсом $\boldsymbol{p}$ теряет энергию и направленный импульс при рассеянии, переходя во все др. состояния с импульсами $\boldsymbol{p}'$ (скорость релаксации). В изотропном случае

$$\frac{dp}{dt} = \frac{p}{\tau_p}; \quad \frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}^*}{\tau_{\mathcal{E}}},$$

где величина $\mathcal{E}^*$ имеет порядок тепловой энергии T, если электронный газ невырожден, и равно ферми-энергии $\mathcal{E}_F$, если газ сильно вырожден (здесь и ниже $k = 1$).

Для акустич. фононов в полупроводниках при индуциров. рассеянии ($\mathcal{E} \ll \bar{\mathcal{E}}$) скорость релаксации импульса пропорц. T:

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{\bar{\tau}}\ \frac{T}{\hbar\omega}\left(\frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega}\right)^{\pm 1/2}. \tag{3}$$

Здесь T и $\mathcal{E}$ выражены в долях энергии фонона; верх. знак относится к DA-рассеянию, нижний — к PA-рассеянию; $\bar{\tau}$ — характерное время, определяемое соотношениями

$$\bar{\tau}_{DA} = 2\pi\hbar\rho s^2/\Xi^2 p_0^3; \quad \bar{\tau}_{PA} = 2\pi\hbar\rho s^2/(e\beta)^2 p_0,$$

где ρ — плотность кристалла, p_0 — импульс электрона с энергией $\hbar\omega$. Типичные значения $\bar{\tau}_A \approx 1$—10 пс.

При $\mathcal{E} \gg \bar{\mathcal{E}}$ (спонтанное рассеяние) скорость релаксации импульса, т. е. τ_p, от T не зависит:

$$\left(\frac{1}{\tau_p}\right)_{DA} = \frac{1}{\tau_{DA}}\ \frac{4}{s}\,\delta_0^{1/2}\frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega}; \quad \left(\frac{1}{\tau_p}\right)_{PA} = \frac{1}{\tau_{PA}}\ \frac{2}{3}\,\delta_0^{1/2}. \tag{4}$$

Здесь $\delta_0 = 2ms^2/\hbar\omega$ ($\sim 10^{-4}$—10^{-2}) — степень упругости рассеяния, m — эфф. масса электрона.

Время релаксации энергии $\tau_{\mathcal{E}}$ не зависит от соотношения между $\mathcal{E}$ и $\bar{\mathcal{E}}$:

$$\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}^*}{\tau_{\mathcal{E}}} = \frac{1}{\tau}\delta_0\left(\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}^*}{\hbar\omega_0}\right)^{\pm 1/2}; \quad \mathcal{E}^*_{DA} = 2T; \quad \mathcal{E}^*_{PA} = T. \tag{4a}$$

Для акустич. фононов в металлах и вырожденных полупроводниках при высоких темп-рах ($T > \hbar s p_F$) τ_p определяется ф-лой

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{\tau_F}\ \frac{T}{\hbar s p_F}; \quad \bar{\tau}_F = \frac{\pi\hbar}{m p_F^2\,\Xi^2} \approx 0{,}01\ \text{пс}. \tag{5}$$

Скорость релаксации энергии

$$\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{\tau_{\mathcal{E}}} = \frac{\hbar s p_F}{\bar{\tau}_F}\ \operatorname{th}\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{T}. \tag{6}$$