

# Высокочастотная электропроводность металлического нанослоя с учетом эффектов размерного квантования и анизотропии зонной структуры проводника

© О.В. Савенко, И.А. Кузнецова

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова,  
150003 Ярославль, Россия  
e-mail: savenko.oleg92@mail.ru

Поступило в Редакцию 28 июля 2025 г.

В окончательной редакции 3 октября 2025 г.

Принято к публикации 21 октября 2025 г.

Получено теоретическое решение задачи о высокочастотной электропроводности металлического нанослоя с учетом эффектов размерного квантования электронов. Поверхность Ферми проводника представляет собой эллипсоид вращения с ориентированной параллельно плоскости нанослоя главной осью. Допускается, что частота электрического поля не превышает частоту плазменного резонанса. Получены аналитические выражения для компонент тензора проводимости, зависящие от безразмерных параметров: толщины, частоты электрического поля, параметров шероховатости границ нанослоя и параметра эллиптичности поверхности Ферми. Выполнен сравнительный анализ полученных результатов с известными экспериментальными данными для пленки висмута.

**Ключевые слова:** нанослой, проводимость, уравнение Лиувилля, модель Соффера, поверхность Ферми.

DOI: 10.61011/JTF.2026.03.62527.161-25

## Введение

Проводящие нанослои активно используются в различных областяхnano-, опто-, СВЧ-электроники и солнечной энергетики [1–5]. Это обусловлено активным развитием технологий, позволяющих изготавливать нанослои толщиной порядка нескольких нанометров [6]. В настоящее время намечается тенденция к уменьшению характерного размера интегральных схем, степень интеграции достигла миллиардов транзисторов на квадратный миллиметр. Многослойные нанопокрытия позволили значительно повысить энергоэффективность солнечных элементов. Для рационального использования слоистых наноструктур появляется необходимость в создании и совершенствовании теоретических моделей, характеризующих их электрические, оптические и др. параметры. В нанослоях с толщиной порядка нанометров необходимо принимать во внимание квантование энергетического спектра носителей заряда. На особенности поведения носителей заряда оказывает значительное влияние неровность поверхности на атомарном уровне. Для адекватного описания электрических параметров нанослоев нужны теоретические модели, учитывающие эффекты размерного квантования и поверхностное рассеяние носителей заряда.

Вопрос о вкладе поверхностного рассеяния электронов проводимости на электрические и гальваномагнитные характеристики тонких пленок был достаточно подробно изучен. В ряде работ [7–13] были использованы различные модели поверхностного рассеяния носителей заряда: граничные условия Фукса и Соффера. Отметим,

что в работах [7–13] использовалось квазиклассическое приближение.

С конца XX в. появляются работы, в которых производился учет квантования энергетического спектра носителей заряда и неровности поверхности [14–17]. В работах [14,15] использован метод функций Грина, согласно которому волновые функции в квантовой яме определялись решением уравнения Дайсона. В других источниках [16,17] производился непосредственный расчет гамильтонiana, обусловленного рассеянием носителей заряда. Авторы вышеупомянутых работ ограничивались лишь случаем металла и постоянного электрического поля.

В работе [18], опубликованной сравнительно недавно, было получено решение задачи о статической электропроводности проводящего нанослоя, где был использован метод решения квантовой задачи, основанный на учете поверхностного рассеяния носителей заряда через граничные условия Соффера [19]. В работе [18] рассматривался нанослой из металла и полупроводника. В первом случае учитывалась зависимость энергии Ферми от толщины нанослоя (предполагалось, что уровень Ферми определяется верхним заполненным энергетическим уровнем). Во втором случае допускалась зависимость концентрации свободных носителей заряда от толщины. В работе [20] построена теоретическая модель электропроводности полупроводникового нанослоя в переменном электрическом поле. Предполагалось, что нанослой сделан из полупроводника, а случай металла не рассматривался.

Отметим, что в работах [18,20] задачи решены с учетом эллипсоидальной зонной структуры проводника, что обусловлено следующими причинами. В микро- и наноэлектронике часто применяются полупроводники кремний и германий, поверхность постоянной энергии которых содержит несколько эллипсоидов вращения. В типичных металлах со сферической поверхностью Ферми эффекты размерного квантования слабо выражены, поскольку длина волны де Броиля электронов проводимости приблизительно равна 0.3 нм (имеет порядок межатомного расстояния) [21]. Квантовые эффекты ярко проявляются в полуметалах висмута и его сплавах с сурьмой [22] (длина волны де Броиля составляет порядка 30 нм [23]). Поверхность Ферми электронов в висмуте представляет собой три симметрично расположенных эллипсоида вращения.

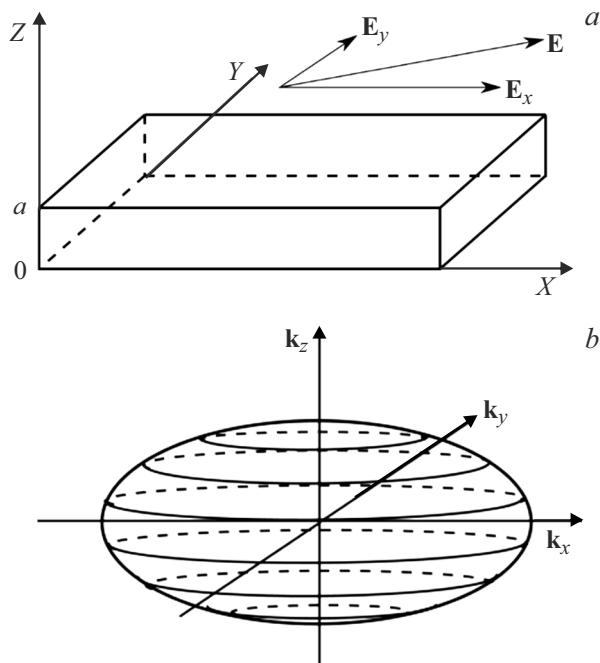
В настоящей работе получено решение задачи об электропроводности металлического нанослоя в переменном электрическом поле с учетом эллипсоидальной формы поверхности Ферми и модели граничных условий Соффера.

## 1. Постановка задачи

Рассмотрим нанослой толщины  $a$ , материалом которого является металл или полуметалл. Электрическое поле напряженности  $\mathbf{E}$  приложено параллельно плоскости нанослоя (рис. 1, a) и изменяется во времени по закону

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t), \quad (1)$$

где  $\omega$  — частота электрического поля.



**Рис. 1.** a — тонкий металлический нанослой в продольном электрическом поле; b — форма изоэнергетической поверхности проводника.

Допускается произвольное соотношение между толщиной нанослоя и длиной волны де Броиля носителей заряда. В этом случае необходимо учитывать эффекты размерного квантования электронов проводимости в направлении, перпендикулярном поверхности слоя. Энергетический спектр в направлении оси  $Z$  будет состоять из нескольких подзон (рис. 1, b). Электронный газ в нанослое можно рассматривать как квазидвумерный газ, заключенный в потенциальную яму. Предполагается, что металлический нанослой может граничить только с диэлектрическими слоями. Наноструктуры, в которых есть переходы металл—полупроводник, не рассматриваются. Высота стенок потенциальной ямы будет больше 1.5 eV (это следует из того, что ширина запрещенной зоны 3 eV является условной границей между полупроводником и диэлектриком). Данного условия будет достаточно, чтобы считать высоту стенок потенциальной ямы бесконечной. Предполагается, что изоэнергетическая поверхность имеет вид эллипса вращения, главная ось которого ориентирована параллельно плоскости нанослоя (рис. 1, b). Рассмотрим ситуацию, когда ось вращения эллипса Ферми ориентирована параллельно оси  $X$ . Полная энергия электрона (дырки), находящегося на  $l$ -й подзоне, будет выражаться следующим образом:

$$\varepsilon_l = \frac{p_x^2}{2m_{||}} + \frac{p_y^2}{2m_{\perp}} + \varepsilon_1 l^2, \quad l = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm N, \quad (2)$$

где  $m_{||}$  и  $m_{\perp}$  — продольная и поперечная эффективные массы носителя заряда соответственно,  $\varepsilon_1 = (\pi\hbar)^2/(2m_{\perp}a^2)$  — собственное значение энергии электрона на первой подзоне,  $N$  — суммарное число подзон.

В настоящей работе не учитывается электронно-электронное рассеяние, которое становится существенным только при достаточно низких температурах и в чистых образцах. Установлено, что в висмуте при температуре выше 77 K основной вклад в процессы переноса носителей заряда вносит только рассеяние на тепловых колебаниях кристаллической решетки [24]. Рассмотрим верхнюю границу температур, при которых будет справедлива теоретическая модель. В типичных металлах температура вырождения составляет порядка  $10^4$  K. Электронный газ можно считать вырожденным вплоть до температуры плавления металла. В полуметалах висмута из-за малой концентрации носителей заряда (порядка  $10^{17} \text{ см}^{-3}$ ) температура перехода электронного газа в невырожденное состояние сравнительно невысока (около 100 K) [25]. Тем не менее исследования показывают, что в пленках висмута, нанесенных на диэлектрические подложки, может изменяться зонная структура и концентрация носителей заряда. Это происходит из-за наличия микродеформаций пленок висмута. Например, в пленках чистого висмута, нанесенных на подложку из слюды, концентрация может достичь  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  [26]. В этом случае температура вырождения будет около 400 K, т. е. теоретическая модель

настоящей работы может быть применима к пленкам висмута при комнатных температурах.

В рамках квантовой теории система носителей заряда описывается оператором плотности [27]:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_l W_l |\psi_l(t)\rangle\langle\psi_l(t)|, \quad (3)$$

подчиняющемуся уравнению Лиувилля

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]. \quad (4)$$

Здесь  $\psi_l(t)$  — волновая функция электронов,  $\hat{H}(t)$  — гамильтониан системы,  $W_l$  — коэффициент, характеризующий вероятность нахождения системы носителей заряда в состоянии  $\psi_l$ .

Допускается небольшое отклонение системы носителей заряда от равновесного состояния. Оператор плотности можно записать в виде суммы равновесного оператора  $\hat{\rho}^{(0)}$  и малой неравновесной поправки  $\hat{\rho}^{(1)}$ :

$$\hat{\rho}(\mathbf{k}_\parallel, z, t) = \hat{\rho}^{(0)}(\varepsilon_l) + \hat{\rho}^{(1)}(\mathbf{k}_\parallel, z) \exp(-i\omega t), \quad (5)$$

где  $\mathbf{k}_\parallel$  — параллельная плоскость нанослоя компонента волнового вектора.

При условии (5) (см. Приложение) уравнение (4) можно привести к кинетическому уравнению в приближении времени релаксации  $\tau$ :

$$\begin{aligned} -i\omega(f_{l\parallel}^{(1)} + f_{l\perp}^{(1)}) + \frac{\hbar k_{zl}}{m_\perp} \frac{\partial(f_{l\parallel}^{(1)} + f_{l\perp}^{(1)})}{\partial z} \\ + \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f_l^{(0)}}{\partial \mathbf{k}_\parallel} + \frac{f_{l\parallel}^{(1)}}{\tau_\parallel} + \frac{f_{l\perp}^{(1)}}{\tau_\perp} = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь  $\tau_\parallel$  и  $\tau_\perp$  — соответственно продольная и поперечная компоненты тензора времени релаксации,  $e$  — заряд электрона,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $k_{zl}$  —  $z$ -компоненты волнового вектора носителя заряда на  $l$ -й подзоне. Отметим, что функция распределения носителей заряда  $f_l$  играет роль диагональных элементов матрицы плотности в уравнении (6), которая представима в линейном по внешнему полю приближении:

$$f_l(\mathbf{k}_\parallel, z, t) = f_l^{(0)}(\varepsilon_l) + f_l^{(1)}(\mathbf{k}_\parallel, z) \exp(-i\omega t), \quad (7)$$

$$f_l^{(1)}(\mathbf{k}_\parallel, z) = f_{l\parallel}^{(1)}(\mathbf{k}_\parallel, z) + f_{l\perp}^{(1)}(\mathbf{k}_\parallel, z),$$

$$f_l^{(0)}(\varepsilon_l) = \begin{cases} 1, & 0 < \varepsilon_l < \varepsilon_F, \\ 0, & \varepsilon_l > \varepsilon_F, \end{cases}$$

где  $f_l^{(0)}$  — равновесная функция распределения,  $f_{l\parallel}^{(1)}$  и  $f_{l\perp}^{(1)}$  — неравновесные поправки, определяющие отклонение функции распределения от равновесной в направлениях, параллельных главной и побочной осям эллипсоида постоянной энергии соответственно,  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми.

Поверхностное рассеяние носителей заряда будем учитывать при помощи граничных условий Соффера [19], накладываемых на уравнение (6):

$$\begin{cases} f_{l\parallel,\perp}^{(1)+} = q_1(g_1, \theta) f_{l\parallel,\perp}^{(1)-} & \text{при } z = 0, \\ f_{l\parallel,\perp}^{(1)-} = q_2(g_2, \theta) f_{l\parallel,\perp}^{(1)+} & \text{при } z = a, \end{cases} \quad (8)$$

$$q_{1,2}(g_{1,2}, \theta) = \exp(-(4\pi g_{1,2} \cos \theta)^2),$$

$$g_{1,2} = g_{s1,2}/\lambda_F.$$

Здесь  $f_{l\parallel}^{(1)+}$  и  $f_{l\perp}^{(1)+}$  — неравновесные поправки к функции распределения электронов с  $k_{zl} > 0$ ;  $f_{l\parallel}^{(1)-}$  и  $f_{l\perp}^{(1)-}$  — неравновесные поправки с  $k_{zl} < 0$ ;  $\lambda_F$  — длина волны де Броиля электрона с энергией Ферми;  $g_{s1}$  и  $g_{s2}$  — соответственно среднеквадратичная высота поверхности рельефа нижней и верхней границы нанослоя;  $\theta$  — угол между направлением волнового вектора электрона и нормалью к поверхности нанослоя.

## 2. Математические расчеты

Решая уравнение (6) с учетом граничного условия (8), получим выражения для неравновесных поправок к функции распределения носителей заряда

$$f_{l\parallel}^{(1)+}(z) = -\frac{e(v_x \cdot E_x)}{v_\parallel} \frac{\partial f_l^{(0)}}{\partial \varepsilon_\parallel} (1 - \phi_{l\parallel}^+ e^{-\Omega_{l\parallel}\xi}), \quad (9)$$

$$f_{l\perp}^{(1)+}(z) = -\frac{e(v_y \cdot E_y)}{v_\perp} \frac{\partial f_l^{(0)}}{\partial \varepsilon_\parallel} (1 - \phi_{l\perp}^+ e^{-\Omega_{l\perp}\xi}), \quad (10)$$

$$f_{l\parallel}^{(1)-}(z) = -\frac{e(v_x \cdot E_x)}{v_\parallel} \frac{\partial f_l^{(0)}}{\partial \varepsilon_\parallel} (1 - \phi_{l\parallel}^- e^{\Omega_{l\parallel}(1-\xi)}), \quad (11)$$

$$f_{l\perp}^{(1)-}(z) = -\frac{e(v_y \cdot E_y)}{v_\perp} \frac{\partial f_l^{(0)}}{\partial \varepsilon_\parallel} (1 - \phi_{l\perp}^- e^{\Omega_{l\perp}(1-\xi)}). \quad (12)$$

Введены следующие обозначения:

$$\phi_{l\parallel,\perp}^+ = \frac{(1 - q_1) + q_1(1 - q_2)e^{-\Omega_{l\parallel,\perp}}}{1 - q_1q_2e^{-2\Omega_{l\parallel,\perp}}},$$

$$\phi_{l\parallel,\perp}^- = \frac{(1 - q_2) + q_2(1 - q_1)e^{\Omega_{l\parallel,\perp}}}{1 - q_1q_2e^{2\Omega_{l\parallel,\perp}}},$$

$$\Omega_{l\parallel,\perp} = av_{\parallel,\perp}/(\nu_1 l); \quad \xi = z/a.$$

Здесь  $v_{\parallel,\perp} = \tau_{\parallel,\perp}^{-1} - i\omega$  — соответственно комплексная частота рассеяния носителей заряда в направлениях, параллельных главной и побочной осям эллипсоида постоянной энергии,  $\varepsilon_\parallel$  — продольная кинетическая энергия электрона.

Плотность тока определяется выражением [18]:

$$\mathbf{j} = \frac{2ek_1}{(2\pi)^3} \sum_l \int \int \mathbf{v} (f_l^{(1)+} + f_l^{(1)-}) dk_x dk_y. \quad (13)$$

Распишем выражение (13) для компонент плотности тока на оси  $X$  и  $Y$ :

$$j_x = \frac{2ek_1}{(2\pi)^3} \sum_l \int \int v_x (f_{l\parallel}^{(1)+} + f_{l\parallel}^{(1)-}) dk_x dk_y, \quad (14)$$

$$j_y = \frac{2ek_1}{(2\pi)^3} \sum_l \int \int v_y (f_{l\perp}^{(1)+} + f_{l\perp}^{(1)-}) dk_x dk_y. \quad (15)$$

Для вычисления интегралов (14) и (15) удобно перейти к системе координат  $(\varepsilon_{\parallel}, \varphi)$ . Связь координат  $(k_x, k_y)$  и  $(\varepsilon_{\parallel}, \varphi)$  дается следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} k_x = \frac{\sqrt{2m_{\parallel}\varepsilon_{\parallel}}}{\hbar} \cos \varphi, \\ k_y = \frac{\sqrt{2m_{\perp}\varepsilon_{\parallel}}}{\hbar} \sin \varphi. \end{cases} \quad (16)$$

Подставляя (9)–(12), (16) в (14) и (15) и проводя необходимые вычисления, получим следующие выражения для  $x$ - и  $y$ -компонент плотности тока:

$$j_x = \frac{4\pi e^2 m_0^{3/2} E_x \sqrt{2\varepsilon_1}}{\nu_{\parallel} h^3 m_{\parallel}} \sum_{l=1}^N (\varepsilon_F - \varepsilon_1 l^2) \times (2 + \phi_{l\parallel}^+ e^{-\Omega_{l\parallel}\xi} + \phi_{l\parallel}^- e^{-\Omega_{l\parallel}(1-\xi)}), \quad (17)$$

$$j_y = \frac{4\pi e^2 m_0^{3/2} E_x \sqrt{2\varepsilon_1}}{\nu_{\perp} h^3 m_{\perp}} \sum_{l=1}^N (\varepsilon_F - \varepsilon_1 l^2) \times (2 + \phi_{l\perp}^+ e^{-\Omega_{l\perp}\xi} + \phi_{l\perp}^- e^{-\Omega_{l\perp}(1-\xi)}), \quad (18)$$

где введено обозначение для скалярной эффективной массы электрона  $m_0 = \sqrt[3]{m_{\parallel} m_{\perp}^2}$ .

Будем предполагать, что концентрация носителей заряда в металле не меняется. Согласно зонной теории, энергия Ферми в металле определяется верхним заполненным энергетическим уровнем. С уменьшением толщины слоя снижается количество разрешенных энергетических состояний. Если концентрацию носителей считать постоянной величиной, то уровень Ферми должен меняться с изменением толщины. Аналогичные рассуждения были проведены в работе [28] для тонких пленок алюминия и золота. Показано, что энергия Ферми увеличивается с уменьшением толщины, и зависимость энергии Ферми от толщины ведет себя осцилирующим образом. Воспользуемся зависимостью энергии Ферми от толщины нанослоя, полученной в работе [18]:

$$\rho^2 = \frac{2}{3N} \rho_v^3 + \frac{1}{6} (N+1)(2N+1), \quad (19)$$

$$\rho = \sqrt{\varepsilon_F/\varepsilon_1}, \quad \rho_v = \sqrt{\varepsilon_{Fv}/\varepsilon_1},$$

где  $\varepsilon_{Fv}$  — энергия Ферми без учета квантования энергетического спектра носителей заряда (макроскопического образца),  $N$  — общее число заполненных подзон, определяемое выражением

$$N = \text{int} \left[ \sqrt[3]{\frac{p}{2} + \sqrt{Q}} + \sqrt[3]{\frac{p}{2} - \sqrt{Q}} + \frac{1}{4} \right], \quad (20)$$

$$Q = \left( \frac{p}{2} \right)^2 - \left( \frac{7}{48} \right)^3, \quad p = \frac{3}{32} + \rho_v^3.$$

Компоненты тензора интегральной проводимости определяются по формулам (21)–(23). В случае, когда главная ось эллипсоида Ферми ориентирована параллельно оси  $X$ , проводимость представляет собой диагональный тензор второго ранга:

$$G = \begin{pmatrix} G_{\parallel} & 0 \\ 0 & G_{\perp} \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$G_{\parallel} = \int_0^a \sigma_{\parallel} dz = a \int_0^1 \frac{j_x}{E_x} d\xi, \quad (22)$$

$$G_{\perp} = \int_0^a \sigma_{\perp} dz = a \int_0^1 \frac{j_y}{E_y} d\xi. \quad (23)$$

Подставляя (17) и (18) в (22) и (23), получим выражения для продольных и перпендикулярных компонент тензора проводимости:

$$G_{\parallel, \perp} = \sigma_0 a \Sigma_{\parallel, \perp} (x_0, x_{\lambda}, y_0, \gamma, g_1, g_2), \quad (24)$$

$$\Sigma_{\parallel} = \frac{\gamma^2}{z_{0\parallel}} \left\{ 1 - \frac{3}{16x_0^3\gamma^{1.5}} \sum_{l=1}^N (\rho^2 - l^2) \chi \left( \frac{2x_0^2 z_{0\parallel} \gamma}{lx_{\lambda}} \right) \right\}, \quad (25)$$

$$\Sigma_{\perp} = \frac{1}{\gamma z_{0\perp}} \left\{ 1 - \frac{3}{16x_0^3\gamma^{1.5}} \sum_{l=1}^N (\rho^2 - l^2) \chi \left( \frac{2x_0^2 z_{0\perp} \gamma}{lx_{\lambda}} \right) \right\}. \quad (26)$$

Введены следующие параметры:

$$\sigma_0 = \frac{ne^2 \tau_{0v}}{m_0}, \quad \tau_{0v} = \sqrt[3]{\tau_v \tau_{v\perp}^2},$$

$$\chi(p) = \frac{1}{2p} (1 - e^{-p}) \frac{2 - q_1 - q_2 + (q_1 + q_2 - 2q_1 q_2)e^{-p}}{1 - q_1 q_2 e^{-2p}},$$

$$q_{1,2}(g_{1,2}, \theta) = \exp(-(2\pi g_{1,2} l/x_0)^2),$$

$$z_{0\parallel} = \frac{\rho \sqrt{\gamma}}{2x_0} - iy_0, \quad z_{0\perp} = \frac{\rho}{2x_0 \gamma} - iy_0, \quad \gamma = \frac{m_{\perp}}{m_0},$$

$$\rho^2 = \frac{16}{3N} x_0^3 \gamma^{1.5} + \frac{1}{6} (N+1)(2N+1),$$

$$x_0 = \frac{a}{\lambda_{F0}}, \quad x_{\lambda} = \frac{\Lambda}{\lambda_{F0}}, \quad y_0 = \omega \tau_{0v}.$$

Здесь  $\sigma_0$  — классическая проводимость без учета эффектов размерного квантования,  $\tau_{0v}$  — скалярное время релаксации в макроскопическом образце,  $\Sigma_{\parallel}$  и  $\Sigma_{\perp}$  — соответственно безразмерные продольная и поперечная компоненты тензора проводимости, являющиеся функциями безразмерных параметров:  $x_0$  — толщина слоя;  $x_{\lambda}$  — длина свободного пробега носителей заряда;  $y_0$  — частота электрического поля;  $g_1$  и  $g_2$  — параметры

шероховатости поверхностей слоя;  $\gamma$  — параметр эллиптичности, определяющий степень анизотропии изоэнергетической поверхности. Параметры  $x_0$ ,  $x_\lambda$ ,  $g_1$  и  $g_2$  нормированы на длину волны де Броиля электрона  $\lambda_{F0}$  с энергией Ферми  $\varepsilon_{Fv}$ .

Если направление главной оси эллипсоида вращения будет совпадать с осью  $Y$ , то продольная и поперечная компоненты тензора проводимости поменяются местами друг с другом. В случае произвольного направления оси вращения эллипсоида в плоскости  $(k_x, k_y)$  выражение для тензора проводимости принимает вид

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} G_{\parallel} \cos^2 \varphi_0 + G_{\perp} \sin^2 \varphi_0 & (G_{\parallel} - G_{\perp}) \cos \varphi_0 \sin \varphi_0 \\ (G_{\parallel} - G_{\perp}) \cos \varphi_0 \sin \varphi_0 & G_{\parallel} \sin^2 \varphi_0 + G_{\perp} \cos^2 \varphi_0 \end{pmatrix}, \quad (27)$$

где  $\varphi_0$  — угол между главной осью эллипсоида вращения и осью  $X$ .

### 3. Предельные случаи

Рассмотрим случай сферически-симметричной энергетической зоны ( $\gamma = 1$ ). Продольные и поперечные компоненты тензора проводимости будут равны друг другу:

$$\Sigma_{\parallel} = \Sigma_{\perp} = \frac{\gamma^2}{z_0} \left\{ 1 - \frac{3}{16x_0^3} \sum_{l=1}^N (\rho^2 - l^2) \chi \left( \frac{2x_0^2 z_0}{lx_\lambda} \right) \right\}, \quad (28)$$

$$z_0 = \frac{\rho}{2x_0} - iy_0.$$

Рассмотрим предельный переход в квазиклассический случай ( $a \gg \lambda_B$ ,  $a \lesssim \Lambda$ ). Заметим, что из (19) и (20) следует

$$N \approx \text{int} [\rho_v], \quad (29)$$

$$\rho^2 \approx \rho_v^2. \quad (30)$$

Поскольку энергетический спектр электронов является практически непрерывным, в выражениях (25) и (26) от суммирования по номеру подзоны  $l$  можно перейти к интегрированию. В результате получим

$$\Sigma_{\parallel} = \frac{\gamma^2}{z_{0\parallel}} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \int_0^1 (1-t^2) \chi \left( \frac{x_0 z_0 \parallel \sqrt{\gamma}}{t} \right) dt \right\}, \quad (31)$$

$$\Sigma_{\perp} = \frac{1}{z_{0\perp} \gamma} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \int_0^1 (1-t^2) \chi \left( \frac{x_0 z_0 \perp \sqrt{\gamma}}{t} \right) dt \right\}. \quad (32)$$

Здесь введены обозначения:

$$t = \frac{v_z}{v_{F\perp}}, \quad x_0 = \frac{a}{\Lambda},$$

где  $v_{F\perp}$  — скорость Ферми электрона в направлении, перпендикулярном оси вращения эллипсоида Ферми. Выражения (31) и (32) согласуются с результатом работы [29] в случае вырожденного электронного газа.

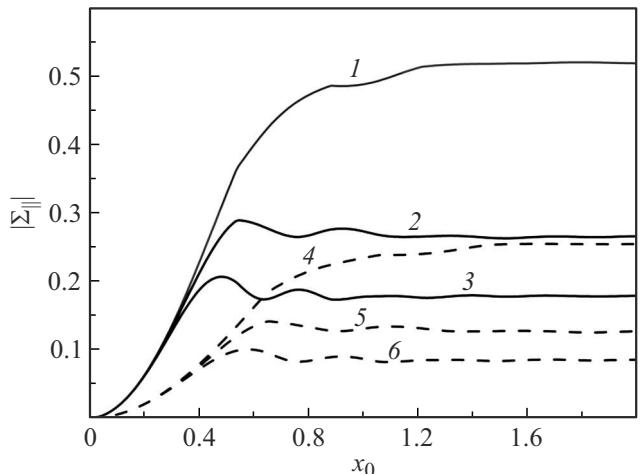
В статическом случае выражения для продольных и поперечных компонент тензора проводимости принимают вид, соответствующий результату работы [18]:

$$\Sigma_{\parallel} = \frac{2x_0 \gamma^{1.5}}{\rho} \left\{ 1 - \frac{3x_\lambda \rho}{32x_0^4 \gamma^3} \sum_{l=1}^N l \left( 1 - \frac{l^2}{\rho^2} \right) \chi \left( \frac{x_0 \rho \gamma^{1.5}}{lx_\lambda} \right) \right\}, \quad (33)$$

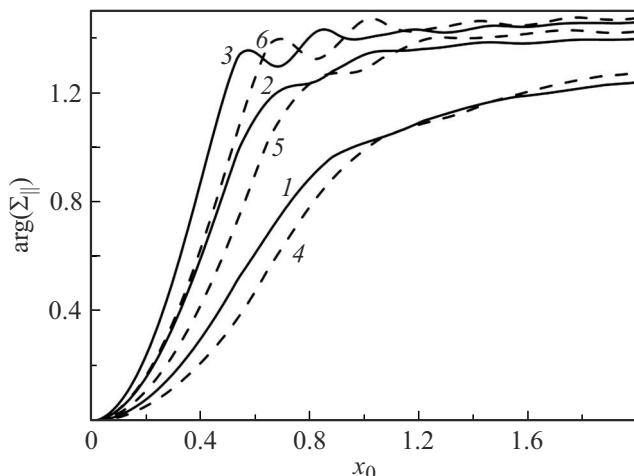
$$\Sigma_{\perp} = \frac{2x_0}{\rho} \left\{ 1 - \frac{3x_\lambda \rho}{32x_0^4 \gamma^{1.5}} \sum_{l=1}^N l \left( 1 - \frac{l^2}{\rho^2} \right) \chi \left( \frac{x_0 \rho}{lx_\lambda} \right) \right\}. \quad (34)$$

### 4. Анализ результатов

На рис. 2 и 3 представлены зависимости модуля и аргумента безразмерной продольной компоненты тензора интегральной проводимости от безразмерной толщины. Сплошные и штриховые кривые построены при разных значениях параметра эллиптичности  $\gamma$ . Наблюдаются осцилляции, период которых зависит от частоты электрического поля. Возникновение осцилляций, возможно, обусловлено следующими причинами. Поскольку при малых толщинах нанослоя перпендикулярная компонента волнового вектора квантуется, дискретными величинами будут проекция скорости на ось  $Z$  и частота поверхностного рассеяния носителя заряда. Если подобрать период колебаний напряженности электрического поля  $T$  таким образом, чтобы выполнялось условие  $\tau_s = nT$  (где  $\tau_s$  — время движения носителя заряда от одной границы нанослоя до другой,  $n$  — положительное целое число), часть носителей заряда будет рассеиваться поверхностью нанослоя в момент изменения направления вектора напряженности электрического поля. Когда эти носители заряда испытывают поверхностное рассеяние, внешнее электрическое поле не оказывает



**Рис. 2.** Зависимости модуля безразмерной продольной компоненты тензора интегральной проводимости  $\Sigma_{\parallel}$  от безразмерной толщины  $x_0$  при  $x_\lambda = 8$ ;  $g_1 = g_2 = 0.2$ ,  $\gamma = 2.32$  (сплошные кривые 1–3),  $\gamma = 1.6$  (штриховые кривые 4–6): 1 —  $y_0 = 10$ ; 2 —  $y_0 = 20$ ; 3 —  $y_0 = 30$ .

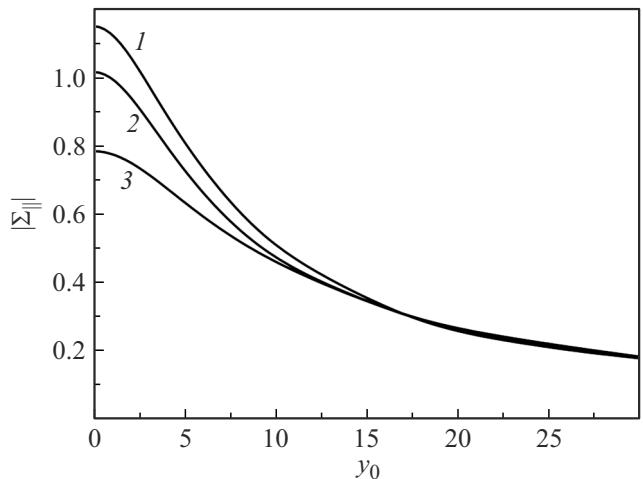


**Рис. 3.** Зависимости аргумента безразмерной продольной компоненты тензора интегральной проводимости  $\Sigma_{\parallel}$  от безразмерной толщины  $x_0$  при  $x_\lambda = 8$ ;  $g_1 = g_2 = 0.2$ ,  $\gamma = 2.32$  (сплошные кривые 1-3),  $\gamma = 1.6$  (штриховые кривые 4-6): 1 —  $y_0 = 10$ ; 2 —  $y_0 = 20$ ; 3 —  $y_0 = 30$ .

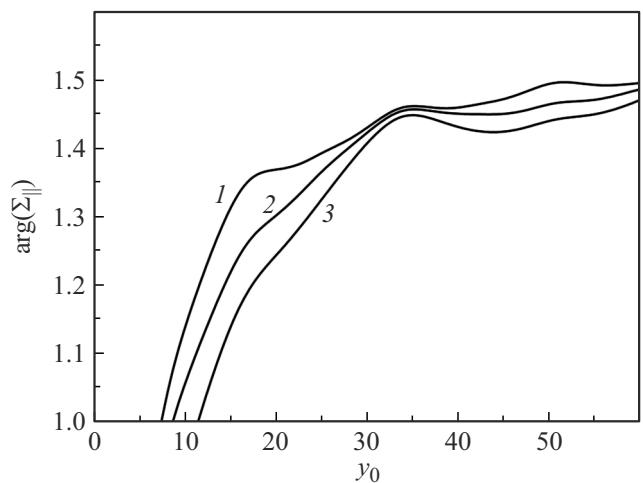
на них влияния. Следовательно, функция распределения таких носителей заряда вблизи границ нанослоя будет равновесной. Как показывают граничные условия (8), поверхности нанослоя не будут оказывать влияния на характер движения этой группы носителей заряда при  $\tau_s = nT$ . В результате этого при некоторых значениях  $x_0$  и  $y_0$  модуль и аргумент проводимости будут близкими случаю зеркальной поверхности. Рис. 3 показывает, что с увеличением частоты период осцилляций убывает, а максимумы смещаются влево. При низких частотах, когда  $y_0 < 10$ , осцилляции модуля и фазы проводимости становятся слабовыраженными. Анизотропия поверхности Ферми влияет на период осцилляций зависимостей проводимости от толщины: с уменьшением  $\gamma$  период осцилляций уменьшается. Это можно объяснить изменением соотношения между продольной и поперечной эффективными массами носителей заряда, оказывающими влияние на частоту поверхностного рассеяния. Снижение  $\gamma$  приводит к уменьшению поперечной эффективной массы электрона и увеличению частоты поверхностного рассеяния (уменьшению  $\tau_s$ ). Отметим, что осцилляционные максимумы пунктирных кривых смещены в сторону больших  $x_0$ .

На рис. 4 и 5 представлены частотные зависимости модуля и аргумента безразмерной продольной компоненты тензора проводимости. Наблюдается уменьшение модуля проводимости с ростом частоты электрического поля. Это можно объяснить запаздыванием отклика носителей заряда при высоких частотах, в результате чего поведение носителей заряда становится аналогичным совокупности связанных зарядов, не вносящих вклада в проводимость. Отметим, что частотная зависимость модуля проводимости монотонна, а фаза проводимости осциллирует с изменением частоты. Причина возник-

новения осцилляций аналогична той, что изложена в пояснениях к рис. 2 и 3. При варьировании параметра  $y_0$  периодически будет выполняться условие  $\tau_s = nT$ , когда модуль и аргумент проводимости будут близки к случаю зеркального рассеяния. Период осцилляций в случае одинаковых параметров шероховатости верхней и нижней поверхности нанослоя (кривая 3 на рис. 5) в два раза меньше периода осцилляций в ситуации, когда одна поверхность нанослоя зеркальная, а другая — шероховатая (кривая 1 на рис. 5). Это можно объяснить тем, что в случае, описываемом кривой 1, частота поверхностного рассеяния носителей заряда в два раза меньше частоты рассеяния в ситуации, характеризуемой кривой 3. Можно сказать, что характер движения носителей заряда в случае, когда одна из



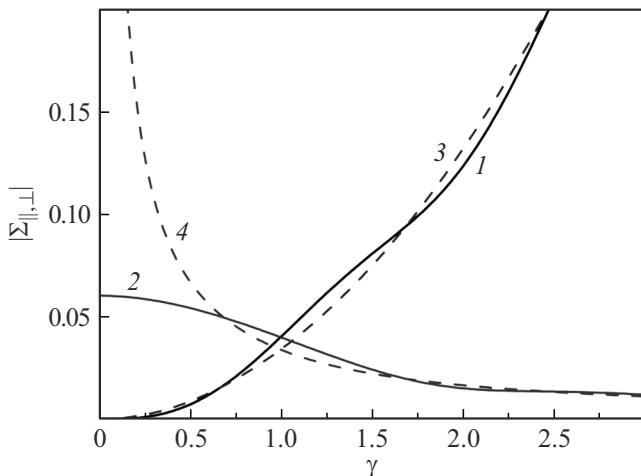
**Рис. 4.** Зависимости модуля безразмерной продольной компоненты тензора интегральной проводимости  $\Sigma_{\parallel}$  от безразмерной частоты  $y_0$  при  $x_0 = 0.8$   $x_\lambda = 8$ ;  $\gamma = 2.32$ ;  $g_2 = 0.15$ : 1 —  $g_1 = 0$ ; 2 —  $g_1 = 0.06$ ; 3 —  $g_1 = 0.15$ .



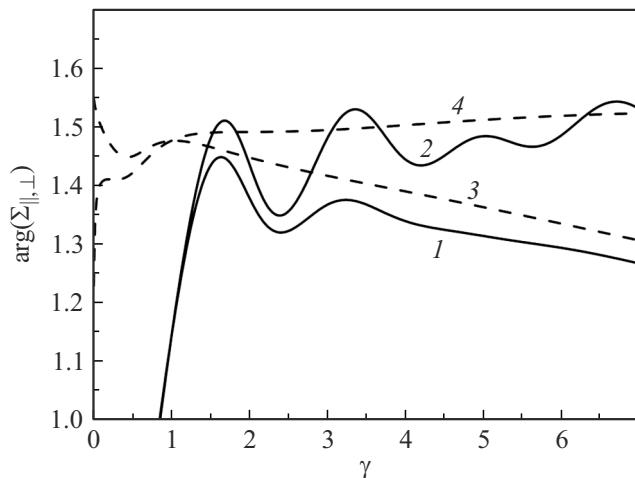
**Рис. 5.** Зависимости аргумента безразмерной продольной компоненты тензора интегральной проводимости  $\Sigma_{\parallel}$  от безразмерной частоты  $y_0$  при  $x_0 = 0.8$   $x_\lambda = 8$ ;  $\gamma = 2.32$ ;  $g_2 = 0.15$ : 1 —  $g_1 = 0$ ; 2 —  $g_1 = 0.06$ ; 3 —  $g_1 = 0.15$ .

границ нанослоя зеркальна, аналогичен случаю нанослоя удвоенной толщины с двумя шероховатыми границами. В ситуации, когда параметры шероховатости границ нанослоя произвольны (кривая 2) частотная зависимость фазы осциллирует сложным образом. В этом случае осцилляции представляют собой совокупность чередующихся более выраженных и менее выраженных максимумов фазы проводимости.

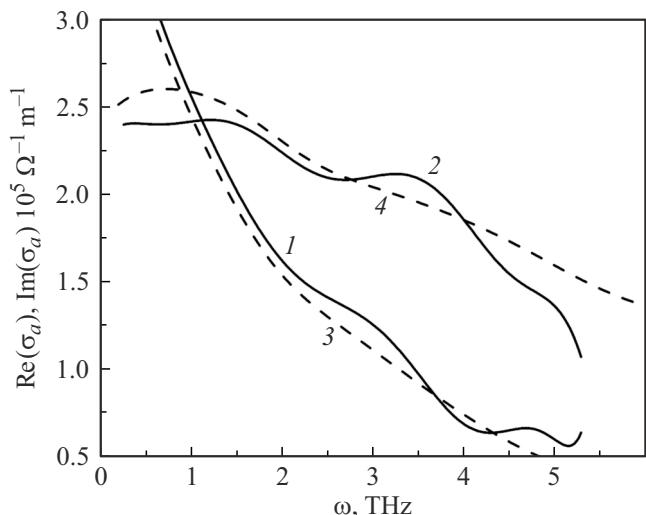
На рис. 6 и 7 изображены зависимости модуля и аргумента проводимости от параметра эллиптичности поверхности Ферми  $\gamma$ . Сплошные кривые построены с уч-



**Рис. 6.** Зависимости модуля безразмерной продольной ( $\Sigma_{||}$ , кривые 1, 3) и поперечной ( $\Sigma_{\perp}$ , кривые 2, 4) компоненты тензора интегральной проводимости от параметра эллиптичности  $\gamma$  при  $x_0 = 0.5$ ;  $x_\lambda = 8$ ;  $y_0 = 30$ ;  $g_1 = 0$ ;  $g_2 = 0.2$ . Сплошные кривые построены с учетом квантовой теории, штриховые кривые построены с учетом квазиклассической теории.



**Рис. 7.** Зависимости аргумента безразмерной продольной ( $\Sigma_{||}$ , кривые 1, 3) и поперечной ( $\Sigma_{\perp}$ , кривые 2, 4) компоненты тензора интегральной проводимости от параметра эллиптичности  $\gamma$  при  $x_0 = 0.5$ ;  $x_\lambda = 8$ ;  $y_0 = 30$ ;  $g_1 = 0$ ;  $g_2 = 0.2$ . Сплошные кривые построены с учетом квантовой теории, штриховые кривые построены с учетом квазиклассической теории.



**Рис. 8.** Зависимости действительной (кривые 1, 3) и мнимой (кривые 2, 4) части проводимости пленки висмута толщиной 70 nm от частоты. Сплошные кривые 1, 2 — экспериментальные данные работы [30]. Штриховые кривые 3, 4 — теоретический расчет при  $\lambda_{B0} = 27$  nm,  $\Lambda = 1.8$   $\mu$ m;  $\gamma = 0.4$ ;  $g_1 = 0.1$ ;  $g_2 = 0.9$ .

том квантовой теории явлений переноса ((25) и (26)), а штриховые — в квазиклассическом приближении ((31) и (32)). Как показывают рисунки, с увеличением  $\gamma$  модуль и фаза продольной компоненты тензора проводимости убывают, а модуль и фаза поперечной компоненты — увеличиваются. На рис. 6 и 7 видно, что при значении  $\gamma = 1$  кривые 1–4, сходятся в одну точку. Это означает, что в случае сферической зонной структуры проводника продольная и поперечная компоненты проводимости совпадают друг с другом. Наблюдаются осцилляции зависимостей фазы проводимости от параметра эллиптичности. Наиболее сильное отличие результатов, полученных с учетом квантовой и квазиклассической теорий, наблюдается в случае поперечного направления главной оси эллипсоида Ферми. Расчеты, полученные в квазиклассическом приближении, показывают неограниченное увеличение модуля проводимости при  $\gamma \ll 1$ . Это, возможно, связано с малой эффективной массой носителей заряда в направлении, параллельном вектору напряженности электрического поля. Рис. 1, б показывает, что в квантовом случае уменьшение длины побочной оси эллипсоида постоянной энергии (уменьшение  $\gamma$ ) приводит к снижению концентрации носителей заряда из-за уменьшения числа разрешенных энергетических состояний. Это приводит к тому, что модуль проводимости не может неограниченно увеличиваться при  $\gamma \ll 1$ .

На рис. 8 изображены зависимости действительной и мнимой частей проводимости пленки висмута от частоты электрического поля. Сплошная кривая — экспериментальные данные работы [30], а штриховая кривая — теоретический расчет. Пленки висмута были

получены термическим напылением при температуре 70 °C с последующим отжигом при 180 °C. Такие условия напыления позволили создать пленки висмута с преимущественной ориентацией вдоль тригональной оси  $C_3$ . Это подтверждается рентгеновской дифрактометрией и микрофотографиями рельефа поверхности, сделанными с помощью атомно-силовой микроскопии [30]. Авторами работы [30] было установлено, что пленка состоит из кристаллитов, представляющих собой треугольники. Соседние кристаллиты ориентированы относительно общей границы таким образом, что одна из кристаллографических осей (бинарная  $C_1$  или биссекторная  $C_2$ ) не меняет своего направления, а другая ось повернута на 180°. Как утверждают авторы работы, границы между зернами при такой ориентации кристаллитов в образце практически не влияют на проводимость. Основным фактором, оказывающим влияние на проводимость, остается поверхностное рассеяние носителей заряда и размерное квантование.

Ориентация вдоль оси  $C_3$  соответствует случаю, когда главные оси трех эллипсоидов постоянной энергии электронов практически параллельны плоскости пленки. Для сравнения теоретических расчетов с экспериментальными данными было использовано выражение для усредненной по толщине слоя проводимости, определяемой суммой составляющих проводимости от электронов с каждого эллипса:

$$\sigma_a = \frac{G}{a} = \frac{1}{a} \sum_{i=1}^3 G_{xx}^i = \frac{1}{a} \sum_{i=1}^3 \left\{ G_{\parallel} \cos^2 \left( \chi + i \frac{2\pi}{3} \right) + G_{\perp} \sin^2 \left( \chi + i \frac{2\pi}{3} \right) \right\} = \frac{3}{2a} (G_{\parallel} + G_{\perp}). \quad (35)$$

Здесь  $\chi$  — угол между направлением главной оси эллипса и осью  $X$ .  $G_{\parallel}$  и  $G_{\perp}$  определяются выражениями (24)–(26).

Отметим, что в достаточно тонких слоях проводимость пленок висмута может вести себя подобно полупроводнику. Это происходит из-за изменения относительного расположения энергетических зон, на которых расположены носители заряда. Как показали исследования [31,32], критическая толщина пленки висмута, меньше которой материал висмут проявляет свойства полупроводника, варьируется в диапазоне 25–30 нм. Для сравнения с теоретическими расчетами были использованы экспериментальные результаты для пленки висмута толщиной 70 нм. В этом случае висмут проявляет металлические свойства, т.е. для сравнения с экспериментом можно использовать построенную в настоящей работе теоретическую модель, применимую к металлическим нанослоям.

Рисунки показывают хорошее согласие теоретических расчетов с экспериментальными данными. Период осцилляций сплошных кривых совпадает с периодом осцилляций штриховых кривых. Различие состоит в положении осцилляционных максимумов (минимумов)

проводимости. Имеются различия в положении осцилляционных максимумов действительной и мнимой частей проводимости, возможно, связанные с особенностью зонной структуры висмута, наличием межэллипсоидных переходов носителей заряда. Расхождение сплошных и штриховых кривых может быть связано с тем, что в настоящей работе рассматривался случай, когда энергия Ферми изменяется при варьировании толщины слоя, а концентрация носителей заряда остается постоянной. Вероятно, в полуметалах необходимо учитывать зависимость сразу двух параметров от толщины, что потребует более детального описания квантовых явлений переноса применительно к полуметаллам.

## Заключение

В настоящей работе с учетом эффектов размерного квантования носителей заряда получены аналитические выражения для продольной и поперечной компонент тензора проводимости металлического нанослоя как функций толщины нанослоя, длины свободного пробега носителей заряда, частоты электрического поля, параметров шероховатости границ нанослоя и параметра эллиптичности поверхности Ферми. Обнаружены осцилляции зависимостей модуля и фазы проводимости от толщины и частоты электрического поля. Варьирование параметрами шероховатости поверхности позволяет изменять амплитуду осцилляций, а частотой электрического поля — их положение и период. Осцилляции частотных зависимостей модуля и фазы проводимости ярко выражены в относительно тонких нанослоях с толщиной, сопоставимой с длиной волны де Броиля носителей заряда при частотах порядка нескольких десятков терагерц.

Установлено, что анизотропия поверхности Ферми проводника влияет на период осцилляций зависимостей модуля и фазы проводимости от толщины. Показано, что модуль проводимости монотонно зависит от параметра эллиптичности, а аргумент проводимости — осциллирующим образом.

Сравнение полученных теоретических расчетов с экспериментальными данными пленки висмута показало адекватность построенной теоретической модели. Имеются различия в положении осцилляционных максимумов действительной и мнимой частей проводимости, возможно связанные с особенностью зонной структуры висмута, наличием межэллипсоидных переходов носителей заряда и т.д.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] S. Datta. *Quantum transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press, NY, 2005)
- [2] Ч. Пул, Ф. Оуэнс. *Нанотехнологии* (Техносфера, М., 2004)
- [3] В.Ю. Киреев. *Введение в технологии микрэлектроники и нанотехнологий* (ЦНИИХМ, М., 2008)
- [4] С.А. Яковлев, И.Ю. Дмитриев, М.Ю. Михайлов, К.В. Емцев, А.С. Абрамов, Е.И. Теруков. ЖТФ, **94** (10), 1707 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.10.58865.173-24
- [5] В.А. Небольсин, Н. Сваикат, А.Ю. Воробьев, В.А. Юрьев. Письма в ЖТФ, **49** (2), 34 (2023). DOI: 10.21883/PJTF.2023.02.54284.19285 [V.A. Nebol'sin, N. Swaikat, A.Yu. Vorob'ev, V.A. Yuryev. Tech. Phys. Lett., **49** (1), 75 (2023). DOI: 10.21883/TPL.2023.01.55355.19285]
- [6] А. Кавалейро, Д. де Хоссон. *Наноструктурные покрытия* (Техносфера, М., 2011)
- [7] K. Barmak, A. Darbal, K.J. Ganesh, P.J. Ferreira, J.M. Rickman, T. Sun, B. Yao, A.P. Warren, K.R. Coffey. J. Vac. Sci. Tech. A, **32**, 061503 (2014). DOI: 10.1116/1.4894453
- [8] L. Moraga, K.F. Arenas, R. Henriquez, S. Bravo, B. Solis. Physica B: Condens. Matt., **499**, 17 (2016). DOI: 10.1016/j.physb.2016.07.001
- [9] T. Zhou, D. Gall. Phys. Rev. B, **97**, 165406 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevB.97.165406
- [10] R.L. Graham, G.B. Alers, T. Mountsier, N. Shamma, S. Dhuey, S. Cabrini, R.H. Geiss, D.T. Read, S. Peddeti. Appl. Phys. Lett., **96**, 042116 (2010). DOI: 10.1063/1.3292022
- [11] A.A. Pribylov. J. Vac. Sci. Tech. B, **39**, 022804 (2021). DOI: 10.1116/6.0000781
- [12] И.А. Кузнецова, О.В. Савенко, А.А. Юшканов. ЖТФ, **87** (12), 1769 (2017). DOI: 10.21883/JTF.2017.12.45196.1831 [I.A. Kuznetsova, O.V. Savenko, A.A. Yushkanov. Tech. Phys., **62** (12), 1766 (2017). DOI: 10.1134/S1063784217120143]
- [13] П.А. Кузнецов, О.В. Савенко, А.А. Юшканов. ЖТФ, **90** (12), 2002 (2020). DOI: 10.21883/JTF.2020.12.50114. 36-20 [P.A. Kuznetsov, O.V. Savenko, A.A. Yushkanov. Tech. Phys., **65** (12), 1912 (2020). DOI: 10.1134/S1063784220120130]
- [14] L. Sheng, D.Y. Xing, Z.D. Wang. Phys. Rev. B, **51**, 7325 (1995). DOI: 10.1103/PhysRevB.51.7325
- [15] R.C. Munoz, C. Arenas. Appl. Phys. Rev., **4**, 011102 (2017). DOI: 10.1063/1.4974032
- [16] A.E. Meyerovich, A. Stepaniants. J. Phys.: Condens. Matter, **12**, 5575 (2000). DOI: 10.1088/0953-8984/12/26/305
- [17] S. Chatterjee, A.E. Meyerovich. Phys. Rev. B, **84**, 165432 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevB.84.165432
- [18] I.A. Kuznetsova, O.V. Savenko, D.N. Romanov. Phys. Lett. A, **427**, 127933 (2022). DOI: 10.1016/j.physleta.2022.127933
- [19] S.B. Soffer. J. Appl. Phys., **38** (4), 1710 (1967).
- [20] O.V. Savenko, I.A. Kuznetsova. Proc. SPIE, **12157**, 121570W (2022). DOI: 10.1117/12.2622544
- [21] Б.Л. Тавгер, В.Я. Демиховский. УФН, **96** (1), 61 (1968). DOI: 10.3367/UFNr.0096.196809d.0061 [B.A. Tavger, V.Ya. Demikhovskii. Sov. Phys. Usp., **11**, 644 (1969). DOI: 10.1070/PU1969v01n05ABEH003739]
- [22] В.С. Эдельман. УФН, **123** (2), 257 (1977). DOI: 10.3367/UFNr.0123.197710d.0257. [V.S. Édel'man. Sov. Phys. Usp., **20**, 819 (1977). DOI: 10.1070/PU1977v020n10ABEH005467]
- [23] Е.В. Демидов, В.М. Грабов, В.А. Комаров, А.Н. Крушинецкий, А.В. Суслов, М.В. Суслов. ФТП, **53** (6), 736 (2019). DOI: 10.21883/FTP.2019.06.47718.27. [E.V. Demidov, V.M. Grabov, V.A. Komarov, A.N. Krushelnitckii, A.V. Suslov, M.V. Suslov. Semiconductors, **53** (6), 727 (2019). DOI: 10.1134/S1063782619060046]
- [24] Г.А. Иванов, В.М. Грабов. ФТП, **29** (5), 1040 (1995).
- [25] Л.А. Фальковский. УФН, **94** (1), 3 (1968). DOI: 10.3367/UFNr.0094.196801a.0003 [L.A. Fal'kovskii. Sov. Phys. Usp., **11** (1), 1 (1968). DOI: 10.1070/PU1968v011n01ABEH003 721]
- [26] А.В. Суслов, В.М. Грабов, В.А. Комаров, Е.В. Демидов, С.В. Сенкевич, М.В. Суслов. ФТП, **53** (5), 616 (2019). DOI: 10.21883/FTP.2019.05.47549.07 [M.V. Suslov, V.M. Grabov, V.A. Komarov, E.V. Demidov, S.V. Senkevich, A.V. Suslov. Semiconductors, **53**, 589 (2019). DOI: 10.1134/S1063782619050257]
- [27] К. Блум. *Теория матрицы плотности и ее приложения* (Мир, М., 1983)
- [28] V.P. Kurbatsky, V.V. Pogosov. Phys. Rev. B, **81**, 155404 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.81.155404
- [29] O.V. Savenko, P.A. Kuznetsov, I.A. Kuznetsova. J. Phys.: Conf. Series. **1697**, 012094 (2020). DOI: 10.1088/1742-6596/1697/1/012094
- [30] A. Zaitsev, P. Demchenko, E. Makarova, A. Tukmakova, N. Kablukova, A. Asach, A. Novotelnova, M. Khodzitsky. Phys. Stat. Sol. RRL, **14**, 2000093 (2020). DOI: 10.1002/pssr.202000093
- [31] C.A. Hoffman, J.R. Meyer, F.J. Bartoli. Phys. Rev. B, **48** (15), 11431 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevB.48.11431
- [32] D.E. Martínez-Lara, R. González-Campuzano, D. Mendoza. Thin Solid Films, **821**, 140678 (2025). DOI: 10.1016/j.tsf.2025.140678

## Приложение

### Вывод кинетического уравнения

В рамках теории возмущения гамильтониан  $\hat{H}$  можно представить в виде

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad (\text{П1})$$

где  $\hat{H}_0$  — собственный гамильтониан электрона,  $\hat{V}$  — зависящий от времени потенциал перехода между собственными состояниями.

Тогда с учетом (П1) уравнение для матричных элементов оператора плотности  $\rho_{ll'}$  принимает вид [27]:

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{ll'}}{\partial t} = (\varepsilon_{l'} - \varepsilon_l)\rho_{ll'} + \sum_{l_1} (V_{ll_1}\rho_{l_1 l} - \rho_{ll_1}V_{l_1 l}). \quad (\text{П2})$$

Здесь  $\varepsilon_l$  — собственное значение гамильтониана  $\hat{H}_0$ ,  $V_{ll_1}$  — матричный элемент оператора  $\hat{V}$ .

Уравнение для диагональных элементов матрицы плотности (функции распределения)  $f_l = \rho_{ll}$  запишется следующим образом:

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{l_1} (V_{ll_1}\rho_{l_1 l} - \rho_{ll_1}V_{l_1 l}). \quad (\text{П3})$$

В нестационарном случае уравнение (П3) можно переписать в виде

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} = \left( \frac{\partial f_l}{\partial t} \right)_F - \frac{i}{\hbar} \sum_{l_1} (V_{ll_1} \rho_{l_1 l} - \rho_{ll_1} V_{l_1 l}). \quad (\text{П4})$$

Первое слагаемое в правой части уравнения описывает изменение функции распределения  $f_l$  под действием внешнего электрического поля. Второе слагаемое характеризует изменение функции распределения в результате рассеяния носителей заряда.

В работе [18], где рассматривался случай постоянного электрического поля, получено выражение для первого слагаемого уравнения (П4):

$$\left( \frac{\partial f_l}{\partial t} \right)_F = \frac{\hbar k_{z_l}}{m_\perp} \frac{\partial f_l}{\partial z} + \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f_l}{\partial \mathbf{k}_\parallel}, \quad (\text{П5})$$

где  $k_{z_l} = \pi l/a$  — перпендикулярная компонента волнового вектора электрона на  $l$ -й подзоне;  $\mathbf{k}_\parallel$  — компонента волнового вектора носителя заряда, параллельная плоскости нанослоя.

Второе слагаемое уравнения (П4) связано с вероятностью перехода носителя заряда  $W_{l_1 l}$  из состояния  $l$  в состояние  $l_1$  в результате объемного рассеяния [18]:

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} = - \sum_{l_1} W_{l_1 l} (f_l - f_{l_1}), \quad (\text{П6})$$

$$W_{l_1 l} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ll_1}^0|^2 \delta(\varepsilon_{l_1} - \varepsilon_l),$$

где  $V_{ll_1}^0$  — матричный элемент потенциала рассеяния носителя заряда на одной примеси.

В случае эллипсоидальной зонной структуры металла правую часть уравнения (П6) можно выразить через компоненты тензора времени релаксации. Рассмотрим подробно этот вопрос. Учитывая линейное по внешнему полю разложение функции  $f_l$  (7), интеграл столкновений можно переписать в виде

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} = - \sum_{l_1} W_{l_1 l} (f_l^{(1)} - f_{l_1}^{(1)}). \quad (\text{П7})$$

Будем считать, что рассеяние носителей заряда упругое. Переходим к системе координат в пространстве волновых векторов таким образом, чтобы поверхность Ферми имела сферическую симметрию:

$$\begin{cases} \tilde{k}_x = \sqrt{m_0/m_\parallel} k_x, \\ \tilde{k}_y = \sqrt{m_0/m_\perp} k_y, \\ \tilde{k}_{z_l} = \sqrt{m_0/m_\perp} k_{z_l}. \end{cases} \quad (\text{П8})$$

Выражение для полной энергии в этой системе координат принимает вид

$$\varepsilon_l = \frac{\hbar^2 \tilde{k}_x^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 \tilde{k}_y^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 \tilde{k}_{z_l}^2}{2m_0}. \quad (\text{П9})$$

Неравновесные поправки к функции распределения  $f_l^{(1)}$  и  $f_{l_1}^{(1)}$ , полученные в результате линейного по внешнему полю разложения, можно представить в виде суммы произведений функций, зависящих от энергии носителя заряда на компоненты продольного волнового вектора  $\mathbf{k}_\parallel$ :

$$f_l^{(1)}(z, \tilde{\mathbf{k}}_\parallel) = f_{l\parallel}^{(1)}(z, \tilde{\mathbf{k}}_\parallel) + f_{l\perp}^{(1)}(z, \tilde{\mathbf{k}}_\parallel) = \chi_\parallel(\varepsilon_l) \tilde{k}_x + \chi_\perp(\varepsilon_l) \tilde{k}_y, \quad (\text{П10})$$

$$f_{l_1}^{(1)}(z, \tilde{\mathbf{k}}_\parallel) = f_{l_1\parallel}^{(1)}(z, \tilde{\mathbf{k}}_\parallel) + f_{l_1\perp}^{(1)}(z, \tilde{\mathbf{k}}_\parallel) = \chi_\parallel(\varepsilon_{l_1}) \tilde{k}_x + \chi_\perp(\varepsilon_{l_1}) \tilde{k}_y. \quad (\text{П11})$$

Подставляя (П10) и (П11) в (П7), получим выражение для интеграла объемных столкновений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_l}{\partial t} = & -\chi_\parallel(\varepsilon_l) \tilde{k}_x \sum_{l_1} W_{l_1 l} \left( 1 - \frac{\chi_\parallel(\varepsilon_{l_1})}{\chi_\parallel(\varepsilon_l)} \right) \\ & - \chi_\perp(\varepsilon_l) \tilde{k}_y \sum_{l_1} W_{l_1 l} \left( 1 - \frac{\chi_\perp(\varepsilon_{l_1})}{\chi_\perp(\varepsilon_l)} \right). \end{aligned} \quad (\text{П12})$$

Заметим, что получившийся множитель в скобках зависит только от энергии носителей заряда в  $l$  и  $l_1$ -й подзонах. В приведенной системе координат  $(\tilde{k}_x, \tilde{k}_y, \tilde{k}_z)$  в случае упругого рассеяния носителей заряда матрица перехода зависит только от модуля волнового вектора (энергии носителей заряда). В этом случае можно ввести время релаксации носителей заряда:

$$\sum_{l_1} W_{l_1 l} \left( 1 - \frac{\chi_\perp(\varepsilon_{l_1})}{\chi_\perp(\varepsilon_l)} \right) = \frac{1}{\tau} \quad (\text{П13})$$

и переписать выражение (П12) в виде

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} = - \frac{\chi_\parallel(\varepsilon_l) \tilde{k}_x}{\tau} - \frac{\chi_\perp(\varepsilon_l) \tilde{k}_y}{\tau}. \quad (\text{П14})$$

Переходя к старым координатам в пространстве волновых векторов, получим

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} = - \frac{\chi_\parallel(\varepsilon_l)}{\tau} \sqrt{\frac{m_\parallel}{m_0}} k_x - \frac{\chi_\perp(\varepsilon_l)}{\tau} \sqrt{\frac{m_\perp}{m_0}} k_y = \frac{f_{l\parallel}^{(1)}}{\tau_\parallel} + \frac{f_{l\perp}^{(1)}}{\tau_\perp}, \quad (\text{П15})$$

где  $\tau_\parallel$  и  $\tau_\perp$  — продольная и поперечная компоненты тензора времени релаксации.

Учитывая вышесказанное, кинетическое уравнение приобретает вид

$$\begin{aligned} & -i\omega(f_{l\parallel}^{(1)} + f_{l\perp}^{(1)}) + \frac{\hbar k_{z_l}}{m_\perp} \frac{\partial(f_{l\parallel}^{(1)} + f_{l\perp}^{(1)})}{\partial z} \\ & + \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f_l^{(0)}}{\partial \mathbf{k}_\parallel} + \frac{f_{l\parallel}^{(1)}}{\tau_\parallel} + \frac{f_{l\perp}^{(1)}}{\tau_\perp} = 0. \end{aligned} \quad (\text{П16})$$