

УДК 621.362

©1995

РАССЕЯНИЕ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА НА ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТАХ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

В.А.Гейлер, В.А.Маргулис, И.И.Чучаев

Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева

(Поступила в Редакцию 12 мая 1994 г.)

В окончательной редакции 2 сентября 1994 г.)

Рассмотрено рассеяние носителей заряда на потенциалах нулевого радиуса в $3D$ и $2D$ -системах с использованием точных выражений для амплитуды рассеяния. Показано, что зависимости времени релаксации от энергии и подвижности от температуры носят немонотонный характер. Установлено, что в $2D$ случае для сильно вырожденного газа подвижность не зависит от температуры. Проведены сравнения полученных результатов с теоретическими результатами для других модельных потенциалов нейтральной примеси и с экспериментом.

Рассеяние на нейтральных примесях в трехмерных ($3D$) полупроводниковых структурах исследовалось теоретически и экспериментально, например, в [1-9]. При теоретических расчетах примесь моделировалась потенциалами водородоподобного атома [1], прямоугольной ямы [4], а также δ -образным потенциалом [9]. При этом в формуле Эргинсоя сечение рассеяния σ получалось не зависящим от энергии ϵ , в формуле Скляра $\sigma \sim (\epsilon + \epsilon_T)^{-1}$, а в случае δ -образного потенциала $\sigma \sim \epsilon^{-1/2}$. Экспериментальные данные показывают, что сечение рассеяния имеет слабую немонотонную зависимость от ϵ в области 0.01-1 энергии ионизации [5].

Важно заметить, что результаты по рассеянию на δ -образном потенциале получены в первом порядке теории возмущений [9], которая, как указано в [10], в принципе не применима (в отличие от одномерного δ -потенциала) к потенциалам нулевого радиуса в более высоких размерностях. В связи с этим возникает задача изучения рассеяния на точечных дефектах в $2D$ - и $3D$ -системах с применением точного выражения для сечения рассеяния носителей заряда на δ -образных потенциалах. Эта задача решена в данной работе. Отметим, что, насколько нам известно, в случае $2D$ -систем (гетеропереходов и инверсионных слоев) рассеяние на нейтральных примесях подробно изучено лишь для потенциалов водородоподобного атома [11,12]. В настоящей работе в рамках модели потенциалов нулевого радиуса [10,13] с использованием точных значений амплитуды и сечения рассеяния получены

выражения для времени релаксации и подвижности при рассеянии на точечном потенциале нейтральных примесей. При этом используется лишь приближение эффективной массы, а также предположение о малом значении концентрации примесей n_i и их хаотическом расположении; тем самым мы можем пренебречь интерференцией от отдельных примесных центров, что сводит задачу к рассмотрению рассеяния на одиночном примесном центре.

Для обоснования применимости приближения, линейного по концентрации примесей, рассмотрим поправки высшего порядка по n_i к кинетическому уравнению. Как известно [14,15], суммирование диаграмм для функции Грина, содержащих одну примесь, приводит к обычному выражению для интеграла столкновений. В [15] для оценки поправок к интегралу столкновений, обусловленных учетом диаграмм с двумя примесями, получена формула

$$\Delta J/J \sim n_i \frac{r_0^6}{k} \left(\frac{m^* \bar{\varphi}}{\hbar^2} \right)^2, \quad (1)$$

где J — интеграл столкновений в линейном приближении по n_i , ΔJ — поправка к J во втором приближении по n_i , r_0 — радиус действия потенциала φ , $\bar{\varphi}$ — его среднее значение, k — характерное волновое число. Как следует из результатов [10], при переходе к пределу потенциалов нулевого радиуса выражение $r_0^6 \left(\frac{m^* \bar{\varphi}}{\hbar^2} \right)^2$ в (1) заменяется на $\alpha^2 / (1 + \alpha^2 k^2)^3$, где α — длина рассеяния. Тогда для точечных потенциалов при $\alpha \sim 10^{-7}$ см получим $\Delta J/J \sim 10^{-21} n_i$. Таким образом, в нашем случае интерференцией от примесных центров можно пренебречь, если $n_i \ll 10^{21}$ см³. Из вышеизложенного вытекает, что J имеет для рассматриваемого случая обычный вид $J = -f_l/\tau$, где для 3D-системы

$$\tau^{-1} = 2\pi v n_i \int_0^{2\pi} \sigma(\vartheta) (1 - \cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta. \quad (2)$$

Здесь v — скорость электрона, $\sigma(\vartheta)$ — дифференциальное сечение рассеяния.

Рассмотрим вначале сферически симметричный потенциал конечного радиуса. Для парциальных сечений рассеяния на таком потенциале справедлива, как известно, оценка $\sigma_l \lesssim k^{-2} (kr_0)^{2l}$. Следовательно, для короткодействующего потенциала ($kr_0 \ll 1$) вкладом в сечение рассеяния зависящих от угла слагаемых σ_l ($l \neq 0$) можно пренебречь, т.е. сечение рассеяния практически изотропно. В терминах потенциалов нулевого радиуса условие $kr_0 \ll 1$ заменяется на $k\alpha \ll 1$. Заметим, что для быстрых частиц ($k\alpha \gg 1$) результаты, полученные далее, не применимы [16]. Рассуждения, аналогичные приведенным выше, обосновывают используемые приближения и в двумерном случае.

1. Нейтральные примеси в 3D-системах

Для дифференциального сечения рассеяния электронов на потенциале $V = V_0\delta(\mathbf{r})$ (точечная примесь) известно точное выражение [10,13]

$$d\sigma = \frac{\alpha^2}{1 + \alpha^2 k^2} d\Omega, \quad (3)$$

где $k = \sqrt{2m^*\varepsilon}/\hbar$. Принципиальное отличие многомерного δ -потенциала от одномерного заключается в том, что первый характеризуется не константой связи V_0 , а длиной рассеяния α , определяющей асимптотику волновой функции носителя заряда в s -состоянии (как хорошо известно, состояния с ненулевым моментом на точечной примеси не рассеиваются [10,13]). Длина рассеяния α играет роль феноменологического параметра, определяемого из сравнения с экспериментом. Для оценки этой величины можно приравнять энергию уровня в δ -образной яме к энергии второго уровня атома водорода [8]. Такая оценка дает для Ge $\alpha \sim 10^{-7}$ см. Вычисляя по формуле (2), с учетом (3) получим для простого закона дисперсии

$$\tau = \frac{\alpha^2 m^{*3/2} \varepsilon + \hbar^2 \sqrt{m^*}}{\sqrt{8\varepsilon\pi\hbar^2\alpha^2 n_i}}. \quad (4)$$

Из этой формулы видно, что зависимость $\tau(\varepsilon)$ является немонотонной функцией ε .

С помощью (4) определим подвижность μ по формуле $\mu = e\langle\tau\rangle/m^*$; где для невырожденного газа

$$\langle\tau\rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \tau(x) \exp(-x) x^{3/2} dx. \quad (5)$$

После простых вычислений получим

$$\mu = \frac{e}{3n_i} \left(\frac{2}{\pi^3 m^* T} \right)^{1/2} \left(\frac{2m^* T}{\hbar^2} + \frac{1}{2\alpha^2} \right). \quad (6)$$

Как и для $\tau(\varepsilon)$, зависимость $\mu(T)$ является немонотонной. Введем энергию связи $\delta_0 = \hbar^2/2m^*\alpha^2$, безразмерную энергию $x = \varepsilon/\delta_0$ и величину $\tau_0 = m^{*3/2}\sqrt{\delta_0}/\pi\hbar^2\sqrt{8n_i}$. Тогда

$$\tau(x)/\tau_0 = (1+x)/\sqrt{x}. \quad (7)$$

Поскольку τ_0 зависит от δ_0 , τ_0 можно считать феноменологическим параметром теории. Из (7) видно, что зависимость $\tau(\varepsilon/\delta_0)$ совпадает с формулой Склера [4], полученной для сферически симметричной прямоугольной ямы.

Для полноты приведем здесь результаты и для случая, когда газ носителей заряда вырожден:

$$\mu = \frac{e}{\sqrt{8m^*\pi n_i} F_{3/2}(\zeta)} \left[\frac{m^*\sqrt{T}}{\hbar^2} F_2(\zeta) + \frac{1}{2\alpha^2\sqrt{T}} F_1(\zeta) \right], \quad (8)$$

где $\zeta = \mu_0/T$, μ_0 — химический потенциал газа, $F_s(\zeta)$ — интеграл Ферми:

$$F_s(\zeta) = \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^s dx, \quad (9)$$

f_0 — распределение Ферми. Обозначим через $\tilde{\mu}$ величину $\tilde{\mu} = e/4\sqrt{2m^*\delta_0}\pi n_i F_{3/2}(\zeta)$, тогда

$$\mu/\tilde{\mu} = F_2(\zeta)\sqrt{T/\delta_0} + F_1(\zeta)\sqrt{\delta_0/T}. \quad (10)$$

2. Нейтральные примеси в 2D-системах

Вначале получим выражение для амплитуды рассеяния в 2D-случае для рассеяния на потенциале нулевого радиуса. Для этого воспользуемся методом Q -функции Крейна, который применялся для этих целей в ряде работ [17–19] и представляется наиболее удобным в рассматриваемом случае. Согласно формуле Крейна, функция Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon)$ оператора Гамильтона H

$$H = -(\hbar^2/2m^*)\Delta + V_0\delta(\mathbf{r}), \quad (11)$$

имеет вид

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) - [Q(\varepsilon) + \lambda]^{-1} G(\mathbf{r}, 0; \varepsilon) G_0(0, \mathbf{r}'; \varepsilon), \quad (12)$$

где G_0 — функция Грина невозмущенного гамильтониана; $Q(\varepsilon)$ — функция Крейна, которая получается перенормировкой функции Грина G_0 в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}' = 0$ путем вычитания из нее логарифмической особенности; величина параметра λ связана с длиной рассеяния α соотношением

$$\lambda = (m^* \ln \alpha) / \pi \hbar^2. \quad (13)$$

Как известно,

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} K_0 \left(-i \frac{\sqrt{2m^*\varepsilon}}{\hbar} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \right), \quad (14)$$

где K_0 — функция Макдональда. Используя асимптотику $K_0(x)$ при $x \rightarrow 0$ [20], получаем

$$Q(\varepsilon) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left[\frac{\pi i}{2} = \ln 2 - \gamma - \ln k \right], \quad (15)$$

где γ — постоянная Эйлера, а $k = \sqrt{2m^*\varepsilon}/\hbar$.

Пользуясь (12), с учетом (15) находим решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (11), соответствующее падающей волне $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. Это решение имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - [Q(\varepsilon) + \lambda]^{-1} G_0(\mathbf{r}, 0; \varepsilon). \quad (16)$$

С учетом асимптотики функции $K_0(x)$ на бесконечности [20] получаем асимптотическое выражение для $\psi(\mathbf{r})$

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \sqrt{\pi i/2k} \left[\ln 2 - \pi i/2 - \gamma - \ln(\alpha k) \right]^{-1} \frac{1}{r} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + O(1/2). \quad (17)$$

Из (17) видно, что амплитуда рассеяния A_{ba} равна

$$A_{ba} = \sqrt{\frac{\pi i}{2k}} \left[\ln 2 + \frac{\pi i}{2} - \gamma - \ln(\alpha k) \right]^{-1}. \quad (18)$$

Следовательно, дифференциальное сечение рассеяния имеет вид

$$d\sigma = \frac{\pi}{2k} [(\ln \alpha k + \gamma - \ln 2)^2 + \pi^2/4]^{-1} d\vartheta, \quad (19)$$

где ϑ — угол рассеяния. Естественно, что в двумерном случае сечение рассеяния имеет размерность длины.

Используя стандартный подход к решению кинетического уравнения [21], нетрудно получить интеграл столкновения для двумерного случая в виде

$$J(f) = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \chi \mathbf{v} \int_0^{2\pi} (\cos \alpha - \cos \beta) W(\vartheta) d\vartheta, \quad (20)$$

где \mathbf{v} — скорость рассеиваемой частицы при упругом рассеянии, $f_1 = -(\partial f_0 / \partial \varepsilon) \chi \mathbf{v}$ — неравновесная добавка к функции распределения, α и β — углы, показанные на рис. 1. Как видно из рис. 1, эти углы удовлетворяют соотношению

$$\cos \alpha = \cos \vartheta \cos \beta + \sin \vartheta \sin \beta. \quad (21)$$

Из (20) и (21) получаем

$$J(f) = -f_1(\mathbf{v}) \int_0^{2\pi} W(\vartheta) (1 - \cos \vartheta - \operatorname{tg} \beta \sin \vartheta) d\vartheta, \quad (22)$$

где величина $W(\vartheta)$ связана с амплитудой рассеяния соотношением

$$d\sigma = W(\vartheta) \frac{d\vartheta}{v n_i}. \quad (23)$$

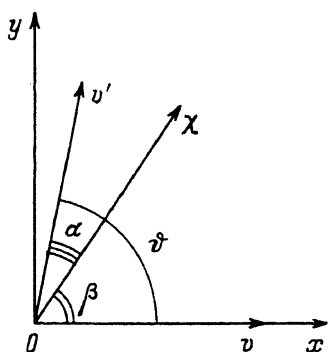


Рис. 1. Геометрия рассеяния носителей заряда.

Из (22) и (23) с учетом соотношения $J(f) = -f_1/\tau$ получим для транспортного времени релаксации τ выражение

$$\tau^{-1} = v n_i \int_0^{2\pi} (1 - \cos \vartheta - \operatorname{tg} \beta \sin \vartheta) d\sigma(\vartheta), \quad (24)$$

где n_i — число примесных центров на единицу площади. Подставляя (19) в (24), нетрудно получить

$$\tau = \frac{m^*}{\pi \hbar^2 n_i} \left[\frac{\pi^2}{4} + \left(\ln \frac{\alpha \sqrt{2m^* \varepsilon}}{2\hbar} + \gamma \right)^2 \right]. \quad (25)$$

Функция распределения невырожденного газа носителей заряда в приближении времени релаксации и линейного отклика (электрическое поле $E \parallel 0X$) имеет вид $f = f_0 + f_1$, где

$$\begin{cases} f_0 = (\pi \hbar^2 / m^* T) \exp(-\varepsilon/T), \\ f_1 = -e E v_x \tau(\varepsilon) f_0(\varepsilon) / T. \end{cases} \quad (26)$$

Вводя обозначения $x = \varepsilon/T$, $\mu = e \langle \tau \rangle / m^*$ и используя (26), получим

$$\langle \tau \rangle = \int_0^{\infty} \exp(-x) \tau(x) x dx. \quad (27)$$

Вычисляя входящий в (27) интеграл, найдем

$$\mu = \frac{e}{4\pi^2 \hbar n_i} \left[\ln^2 \left(e^{1+\gamma} \frac{m^* \alpha^2 T}{2\hbar^2} \right) + \frac{7\pi^2}{6} - \frac{1}{4} \right]. \quad (28)$$

Поскольку параметры потенциала короткодействующей примеси определяются эффективным боровским радиусом в 2D-системе [12,22], для длины рассеяния α получаем оценку $\alpha \sim 10^{-6}$ см.

В вырожденном случае стандартный подход [21] дает следующее выражение для проводимости $2D$ -газа:

$$\sigma = \frac{e^2 T}{2\pi \hbar^2} \int_0^\infty \tau(x) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x dx, \quad (29)$$

где $f_0(x)$ — распределение Ферми, а $\tau(x)$ определено выражением (25). Концентрация $2D$ -газа носителей заряда связана с химическим потенциалом μ_0 формулой $n = [m^* T \ln(1 + e^\zeta)] / 2\pi \hbar^2$, где $\zeta = \frac{\mu_0}{T}$. С учетом этой формулы из (29) и (25) получим для подвижности выражение

$$\mu = \frac{e}{\pi^2 \hbar n_i \ln(1 + e^\zeta)} \int_0^\infty \left[\frac{\pi^2}{4} + \left(\ln \frac{\alpha \sqrt{2m^* T x}}{2\hbar} + \gamma \right)^2 \right] \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x dx. \quad (30)$$

При сильном вырождении $(\partial f_0 / \partial x) \simeq \delta(x - \zeta)$ имеем

$$\mu = \frac{e}{4\hbar n_i} \left[1 + \frac{1}{\pi^2} \ln^2 \left(\frac{m^* \alpha^2 \mu_0}{2\hbar^2} e^{2\gamma} \right) \right]. \quad (31)$$

Как видно из (31), в этом случае μ не зависит от T .

3. Обсуждение результатов

Из результатов, полученных выше для $3D$ -случая, следует, что ход немонотонной зависимости подвижности от температуры $\mu(T)$ совпадает с результатами [4]. Это объясняется тем обстоятельством, что в расчетах Скляра предполагалось существенным рассеяние лишь в z -канале, т.е. в дифференциальном сечении рассеяния отброшены члены с $l \neq 0$. Поэтому единственным параметром потенциала, входящим в $\sigma(\vartheta)$, является отношение ширины ямы к ее глубине. Этому параметру в нашем случае соответствует длина рассеяния. Как объяснено в [10], сечение рассеяния для δ -образной ямы можно получить из сечения рассеяния для прямоугольной ямы предельным переходом при постоянном отношении глубины ямы к ее ширине, в этом пределе исчезают парциальные сечения с $l \neq 0$. Сравнение с экспериментом формулы Скляра (а следовательно, и формулы (7)) проведено в [8]; оно позволяет сделать вывод о применимости модели δ -образных потенциалов для описания процессов рассеяния на нейтральных примесях в рассматриваемых системах.

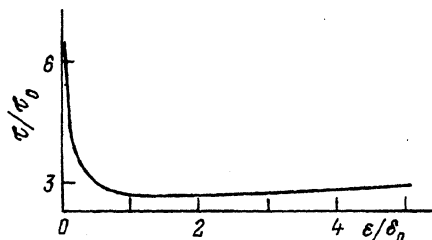


Рис. 2. Зависимость времени релаксации от энергии, отнесенной к энергии связи δ_0 .

Время релаксации отнесено к величине $\tau_0 = m^* / \pi \hbar^2 n_i$.

В $2D$ -системе характер зависимости $\tau(\varepsilon)$ также является немонотонным (рис. 2). Форма кривой на рис. 2 аналогична форме кривой для $3D$ -случая, но зависимость $\tau(\varepsilon)$, как и следовало ожидать, более слабая (логарифмическая вместо степенной). В более интересном для $2D$ -систем вырожденном случае оценка второго слагаемого в (31) показывает, что оно на три порядка меньше первого. Если этим малым слагаемым пренебречь, то в актуальной области температур $T < 30$ К величина подвижности равна $\mu = e\hbar/n_i$. По экспериментальным данным в этой области температур μ практически не зависит от T [12]. Численная оценка величины μ по формуле (31) согласуется с приведенными в [12] экспериментальными данными.

Список литературы

- [1] Erginsoy C. // Phys. Rev. 1950. V. 79. P. 1013–1022.
- [2] Mattis D., Sinha D. // Ann. Phys. (N.Y.). 1970. V. 61. P. 214–229.
- [3] Ансельм М.И. // ЖЭТФ. 1953. Т. 24. С. 83–89.
- [4] Sclar N. // Phys. Rev. 1956. V. 104. P. 1548–1558.
- [5] McGill T., Baron R. // Phys. Rev. B. 1975. V. 11. P. 5208–5213.
- [6] Temkin A., Lamkin J.C. // Phys. Rev. 1961. V. 121. P. 788–794.
- [7] El-Ghanem H.M.A., Ridley B.K. // J. Phys. C. 1980. V. 13. P. 2041–2048.
- [8] Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М.: Мир, 1986. 304 с.
- [9] Ансельм А.И., Аскеров Б.М. // ФТТ. 1961. Т. 3. № 12. С. 3668–3677.
- [10] Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971. 544 с.
- [11] Stern F., Howard W.E. // Phys. Rev. 1967. V. 163. P. 816–835.
- [12] Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985. 416 с.
- [13] Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. 240 с.
- [14] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 528 с.
- [15] Кон В., Люттингер Дж. // Вопросы квантовой теории необратимых процессов. М.: ИЛ, 1961. С. 121–207.
- [16] Гинзбург С.Л. // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. № 6. С. 2264–2273.
- [17] Pavlov B.S. // Lect. Notes Phys. 1989. V. 324. P. 241–256.
- [18] Альберверо С., Гестези Ф., Хёэг-Крон Р., Хольден Х. Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир, 1991. 568 с.
- [19] Гейлер В.А., Маргулис В.А., Чучаев И.И. // Письма в ЖЭТФ. 1993. Т. 58. № 8. С. 668–671.
- [20] Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. М.: Наука, 1974. Т. 2. 296 с.
- [21] Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 615 с.
- [22] Квантовый эффект Холла / Под ред. Прендж, С. Гирвин. М.: Мир, 1989. 408 с.