

АНИЗОТРОПИЯ ПРЫЖКОВОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ n -Ge

Жарекешев И. Х.

На основе теории протекания рассмотрено магнитосопротивление n -Ge в области прыжковой проводимости. С помощью ЭВМ вычислена зависимость показателя экспоненты магнитосопротивления от направления магнитного поля по отношению к кристаллическим осям, обусловленная анизотропией волновых функций доноров. Проведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными в широком диапазоне магнитных полей.

Введение. В рамках теории прыжковой проводимости [1, 2], основанной на методе протекания, в работах [3, 4] были получены выражения для магнитосопротивления (МС) в слабом и сильном магнитных полях. В этих выражениях основная зависимость от магнитного поля при слабом легировании определяется экспоненциальным множителем МС. Поскольку часто экспериментальные результаты лежат в области промежуточных полей, представляет интерес вычисление МС в произвольном магнитном поле. Для полупроводника с изотропным законом дисперсии это было сделано в работе [5]. В полупроводниках с анизотропными волновыми функциями примеси показатель экспоненты МС в общем случае зависит также и от ориентации магнитного поля по отношению к кристаллическим осям. Такая зависимость подтверждается экспериментально наблюдаемой сильной анизотропией МС германия n -типа в широком интервале магнитных полей [6, 7].

В настоящей работе метод, развитый в [3-5], обобщен на полупроводник с анизотропным законом дисперсии и вычислено МС n -Ge в магнитном поле произвольных величины и направления. Согласно общей схеме, принятой в [3, 4], вычисление МС проводится в два этапа. Сначала нужно найти показатель экспоненты $\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H})$ квадрата интеграла перекрытия между парой соседних доноров, находящихся на расстоянии r друг от друга в магнитном поле \mathbf{H} . На втором этапе необходимо рассчитать порог протекания $\xi_c(\mathbf{H})$ задачи на случайных узлах с условием связности $\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H}) \leq \xi_c$. Тогда экспоненциальная зависимость прыжкового МС от поля \mathbf{H} определяется выражением $\rho_3(\mathbf{H})/\rho_3(0) = \exp[\xi_c(\mathbf{H}) - \xi_c(0)]$ (зависимость энергии активации ε_3 от H не учитывается).

В работе [4] показано, что для n -Ge без магнитного поля поверхность связности Q_ξ , соответствующая уравнению $\xi(\mathbf{r}, 0) = \xi_c$, является огибающей четырех эллипсоидов вращения одинаковой формы (см. рис. 1 из [4]), связанных с четырьмя минимумами зоны проводимости. Поскольку магнитное поле, приложенное в произвольном направлении, «сжимает» каждый эллипсоид независимо от других, то для описания поверхности Q_ξ в ненулевом магнитном поле достаточно задать четыре уравнения $\xi^{(k)}(\mathbf{r}, \mathbf{H}) = \xi_c$ ($k=1, 2, 3, 4$). Эти уравнения определяют «сжатые» полем эллипсоиды, оси вращения которых направлены под разными углами $\gamma^{(k)}$ к вектору \mathbf{H} .

Таким образом, первый этап вычисления показателя экспоненты МС сводится к нахождению зависимости $\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H})$ для анизотропного спектра, отвечающего только одной долине зоны проводимости. Эта задача решена в разделе 1 для системы координат, совпадающей с главными осями эллипсоида. В разделе 2 для удобства расчета на ЭВМ выражения $\xi^{(k)}(\mathbf{r}, \mathbf{H})$, соответствующие эллипсоидам поверхности связности, записаны в одной системе координат, оси

которой направлены вдоль кристаллических осей изучаемого полупроводника. Далее приводится алгоритм второго этапа вычисления МС — поиска критического значения ξ_c (\mathbf{H}). В разделе 3 полученные с помощью ЭВМ величины МС сравниваются с экспериментальными.

1. Выберем систему координат (x_0, y_0, z_0) так, чтобы в центре находился донор, а ее оси направлены вдоль главных осей эллипсоида, который в отсутствие магнитного поля описывается уравнением [4]

$$\xi(\mathbf{r}_0, 0) \equiv 2 \left(\frac{x_0^2 + y_0^2}{a^2} + \frac{z_0^2}{b^2} \right)^{1/2} = \xi, \quad (1)$$

где $a = \hbar / \sqrt{2m_t E_0}$, $b = \hbar / \sqrt{2m_l E_0}$, m_t — поперечная, m_l — продольная массы электрона, E_0 — энергия основного состояния донора. Полуоси этого эллипсоида равны $a\xi/2$ и $b\xi/2$, а их отношение — $a/b = \sqrt{m_l/m_t}$.

Вычисление функции $\xi(\mathbf{r}_0, \mathbf{H})$ для однодолинного спектра проводится в следующей последовательности. Сначала мы перейдем в систему координат (x_1, y_1, z_1) , в которой спектр является изотропным, и найдем выражения для $\xi(\mathbf{r}_1, \mathbf{H}_1)$. Возврат в систему координат (x_0, y_0, z_0) даст нам искомое выражение для $\xi(\mathbf{r}_0, \mathbf{H})$, записанное в главных осях эллипсоида.

Приложим магнитное поле \mathbf{H} под углом γ к оси z_0 в плоскости $y_0 z_0$ и запишем гамильтониан донорного состояния, связанного с одной долиной спектра,

$$\mathcal{H} = \frac{\left(p_{x_0} - \frac{e}{c} A_{x_0} \right)^2}{2m_t} + \frac{\left(p_{y_0} - \frac{e}{c} A_{y_0} \right)^2}{2m_t} + \frac{\left(p_{z_0} - \frac{e}{c} A_{z_0} \right)^2}{2m_l}, \quad (2)$$

где $\mathbf{A} = 1/2 [\mathbf{H}, \mathbf{r}_0]$ — векторный потенциал. Теперь перейдем в систему координат (x_1, y_1, z_1) с помощью преобразования

$$x_1 = (b/a)^{1/2} x_0, \quad y_1 = (b/a)^{1/2} y_0, \quad z_1 = (a/b)^{1/2} z_0. \quad (3)$$

Гамильтониан (2) в системе (x_1, y_1, z_1) имеет изотропный вид

$$\mathcal{H} = \frac{\left(p_1 - \frac{e}{c} A_1 \right)^2}{2m^*}, \quad (4)$$

где $\mathbf{A}_1 = 1/2 [\mathbf{H}_1, \mathbf{r}_1]$, $m^* = (m_t^2 m_l)^{1/3}$, а величина эффективного магнитного поля H_1 связана с полем H следующим образом:

$$H_1 = H [(b/a)^{1/2} \sin^2 \gamma + (a/b)^{1/2} \cos^2 \gamma]^{1/2}.$$

Затем удобно перейти в новую систему координат (x_2, y_2, z_2) , такую, что ось z_2 направлена вдоль вектора \mathbf{H}_1 , с помощью преобразования

$$x_2 = x_1, \quad y_2 = y_1 \cos \gamma^* - z_1 \sin \gamma^*, \quad z_2 = z_1 \cos \gamma^* + y_1 \sin \gamma^*, \quad (5)$$

осуществляющего поворот системы (x_1, y_1, z_1) вокруг оси x_1 на угол $\gamma^* = \arctg [(b/a) \operatorname{tg} \gamma]$. При таком повороте закон дисперсии (4) остается изотропным, а величина магнитного поля H_2 равна H_1 .

Для того чтобы найти функцию $\xi(\mathbf{r}_2, \mathbf{H}_2)$ в системе (x_2, y_2, z_2) , нужно знать показатель экспоненты волновой функции основного состояния. В [3] показано, что экспоненциальный множитель волновой функции электрона на больших расстояниях от центра донора совпадает с экспоненциальным множителем функции Грина при $E_0 < 0$. Воспользуемся формулой (24.23) из работы [3] для функции Грина в изотропном случае при направлении поля \mathbf{H}_2 вдоль оси z_2 :

$$G(\mathbf{r}_2, H_2) = \frac{1}{\lambda_2} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \exp \left\{ - \frac{\lambda_2^2 \tau}{2(a_H^*)^2} - \frac{z_2^2}{2\lambda_2^2 \tau} - \frac{x_2^2 + y_2^2}{4\lambda_2^2} \operatorname{cth} \frac{\tau}{2} \right\} (1 - e^{-\tau})^{-1}, \quad (6)$$

где $\lambda_2 = \sqrt{c\hbar/eH_2}$ — магнитная длина, $a_H^* = \hbar / \sqrt{2m^* H}$ — эффективный боровский радиус состояния в магнитном поле, $E_H = (\hbar\omega/2) - E_0$ — энергия электрона, отсчитанная от уровня основного состояния до дна нулевой зоны Ландау,

$\omega = eH_2/mc$ (зависимое от H не учитывается). Взяв интеграл (6) методом перевала и пренебрегая, как и везде в работе, предэкспоненциальным множителем, для квадрата показателя экспоненты интеграла перекрытия между донорами получим выражение

$$\xi_2(\mathbf{r}_2, H_2, \tau_2) = \frac{\lambda_2^2}{(a_H^*)^2} \tau_2 + \frac{z_2^2}{\lambda_2^2} \frac{1}{\tau_2} + \frac{x_2^2 + y_2^2}{2\lambda_2^2} \operatorname{cth} \frac{\tau_2}{2}, \quad (7)$$

где точка перевала τ_2 определяется из условия экстремума подынтегральной функции

$$\partial \xi_2(\mathbf{r}_2, H_2, \tau_2) / \partial \tau_2 = 0. \quad (8)$$

Согласно (7), уравнение (8) имеет вид

$$\frac{z_2^2}{\tau_2^2} + \frac{x_2^2 + y_2^2}{4 \operatorname{sh}^2(\tau_2/2)} = \frac{\lambda_2^4}{(a_H^*)^2}. \quad (9)$$

Результат, аналогичный выражениям (7)–(9), можно получить также из работы [5], в которой функция $\xi_2(\mathbf{r}_2, H_2, \tau_2)$ рассматривалась как классическое действие на подбарьерной траектории электрона между донорами. Тогда величина τ_2 связана с временем туннелирования электрона под барьером $\tau_2 = i\omega t$, а условие (8) означает минимальность действия на заданной траектории.

Возвратимся теперь в систему координат (x_0, y_0, z_0) . В работе [3] доказано, что такой переход не меняет концентрацию примесей и показатель экспоненты МС, следовательно, $\xi_2(\mathbf{r}_2, H_2, \tau_2) = \xi(\mathbf{r}_0, \mathbf{H}, \tau)$. Производя обратные преобразования с помощью (3) и (5), запишем функцию $\xi(\mathbf{r}_0, \mathbf{H}, \tau)$ в координатах (x_0, y_0, z_0)

$$\xi(\mathbf{r}_0, \mathbf{H}, \tau) = \frac{1}{K(\gamma)} \left\{ \frac{\lambda^2 \tau}{(a_H^*)^2 (a/b)^{2/3}} + \frac{(a/b)^2 [z_0 \cos \gamma + y_0 (b/a)^2 \sin \gamma]^2}{\lambda^2 \tau} + \frac{x_0^2 K^2(\gamma) + (y_0 \cos \gamma - z_0 \sin \gamma)^2}{2\lambda^2 \operatorname{th}(\tau/2)} \right\}, \quad (10)$$

где $K(\gamma) = [\cos^2 \gamma + (a/b)^2 \sin^2 \gamma]^{1/2}$, $\lambda^2 = c\hbar/eH$, а величина τ по-прежнему определяется из условия (8):

$$\frac{(a/b)^2 [z_0 \cos \gamma + y_0 (b/a)^2 \sin \gamma]^2}{\tau^2} + \frac{x_0^2 K^2(\gamma) (y_0 \cos \gamma - z_0 \sin \gamma)^2}{4 \operatorname{sh}^2(\tau/2)} = \frac{\lambda^4}{(a_H^*)^2 (a/b)^{2/3}}. \quad (11)$$

2. Для реализации расчета на ЭВМ выберем систему координат, оси которой x, y, z совпадают с кристаллическими осями $[1\bar{1}0], [110], [001]$ соответственно, и найдем функции $\xi^{(k)}(\mathbf{r}, \mathbf{H}, \tau)$ в этой системе для четырех эллипсоидов поверхности связности. Поскольку эллипсоиды совмещаются друг с другом при повороте системы на угол $\pi/2$ вокруг оси z , достаточно найти функцию $\xi^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{H}, \tau)$ для одного эллипсоида, ось вращения которого направлена вдоль $[111]$. Орт главной оси этого эллипсоида z_0 имеет координаты $(0, \sqrt{2/3}, 1/\sqrt{3})$. Орт y_0 направим так, чтобы вектор поля \mathbf{H} лежал в плоскости $y_0 z_0$, а орт x_0 дополняет систему до правой. Координаты x_0, y_0, z_0 связаны с координатами x, y, z соотношениями

$$\begin{aligned} x_0 &= x \cos \beta - (y \cos \alpha - z \sin \alpha) \sin \beta, \\ y_0 &= (y \cos \alpha - z \sin \alpha) \cos \beta + x \sin \beta, \end{aligned} \quad (12)$$

$$z_0 = z \cos \alpha + y \sin \alpha,$$

где

$$\cos \alpha = (z_0, z) = 1/\sqrt{3}, \quad \cos \beta = (\mathbf{x}, \mathbf{x}_0). \quad (13)$$

Подставляя (12) в (10), запишем выражение для классического действия выбранного эллипсоида ($k=1$)

$$\xi^{(1)} = \frac{1}{K(\gamma^{(1)})} \left\{ \frac{\lambda^2 \tau^{(1)}}{(a_H^*)^2 (a/b)^{2/3}} + \frac{\left(\frac{a}{b}\right)^2 \left\{ \left(\frac{z}{\sqrt{3}} + y \sqrt{\frac{2}{3}} \right) \cos \gamma^{(1)} + \left[\left(\frac{y}{\sqrt{3}} - z \sqrt{\frac{2}{3}} \right) \cos \beta + x \sin \beta \right] \left(\frac{b}{a} \right)^2 \sin \gamma^{(1)} \right\}^2}{\lambda^2 \tau^{(1)}} + \frac{\left[x \cos \beta - \left(\frac{y}{\sqrt{3}} - z \sqrt{\frac{2}{3}} \right) \sin \beta \right]^2 K^2(\gamma^{(1)})}{2\lambda^2 \operatorname{th}(\tau^{(1)}/2)} + \frac{\left\{ \left[\left(\frac{y}{\sqrt{3}} - z \sqrt{\frac{2}{3}} \right) \cos \beta + x \sin \beta \right] \cos \gamma^{(1)} - \left(\frac{z}{\sqrt{3}} + y \sqrt{\frac{2}{3}} \right) \sin \gamma^{(1)} \right\}^2}{2\lambda^2 \operatorname{th}(\tau^{(1)}/2)} \right\}, \quad (14)$$

где β — угол, определяемый из соотношений (13). Аналогично записываются действия для трех других эллипсоидов с учетом поворота системы координат на $\pi/2$ вокруг оси z . Величины $\tau^{(k)}$ определяются из условия (8) $\partial \xi^{(k)} / \partial \tau^{(k)} = 0$.

Следующий этап при расчете показателя экспоненты МС состоял в определении порога протекания $\xi_c(\mathbf{H})$. С этой целью методом Монте-Карло вычислялся объем $V(\xi, \mathbf{H})$, заключенный внутри поверхности Q_ξ , которая огибает «сжатые» полем эллипсоиды $\xi^{(k)} = \xi$, где $k=1, 2, 3, 4$. Необходимое значение порога протекания $\xi_c = \xi_c(\mathbf{H})$ находили из условия протекания

$$NV(\xi_c, \mathbf{H}) = B_c, \quad (15)$$

где N — концентрация доноров, $B_c = 2.6$ [3]. Из соотношения (15) можно также найти порог протекания в нулевом магнитном поле $\xi_c(0) = 1.24 (N^{1/3} a^*)^{-1}$ [4].

Приведем алгоритм расчета на ЭВМ величины $\xi^* = \xi_c(H)/\xi_c(0)$ как функции безразмерного магнитного поля $H^* = H/H_c$ для заданного угла γ [здесь $H_c = 6/\xi_c(0) (c\hbar/ea^*)$]. а) Задавались параметры N , $\xi_c(0)$, H^* , набор случайных точек \mathbf{r}_m ($m=1 \div M$), равномерно распределенных внутри куба объемом V_M , и начальное приближение ξ_0^* . б) Методом секущих решались уравнения (11) для нахождения $\tau^{(k)}$ в каждой случайной точке \mathbf{r}_m . в) Найденные $\tau^{(k)}$ подставлялись в выражения для $\xi^{(k)}$ [формула (14) и др.]. Количество точек M_0 , которые удовлетворяли условию $\xi^{(k)}/\xi_c(0) \leq \xi_0^*$ хотя бы для одного k , позволяло найти объем $V(\xi_0^*, H^*) = M_0 V_M / M$, заключенный в пределах поверхности $Q_{\xi_0^*}$. г) Вычислялась функция $\Delta(\xi_0^*) \doteq V(\xi_0^*, H) - B_c/N$. Дальнейший итерационный процесс состоял в поиске нуля функции $\Delta(\xi_0^*)$ с заданной точностью. Таким образом, была найдена зависимость $\xi^*(H^*)$ при различных направлениях магнитного поля.

3. Наибольший интерес для сравнения рассчитанных величин МС с экспериментальными данными представляет германий, легированный фосфором [6-8]. В работе [6] приводятся результаты измерений $\rho(H)/\rho(0)$ для 18 направлений поля в плоскости, перпендикулярной направлению [110] (в наших обозначениях оси y), от [001] до [00 $\bar{1}$] в диапазоне магнитных полей от 29.3 до 78.2 кГс (концентрация примеси фосфора $N = 9 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, температура 4.2 К). Зная энергию основного состояния донора $E = 12.9 \text{ мэВ}$ и $m_i = 0.082 m_0$, $m_j = 1.59 m_0$, можно найти эффективный борковский радиус $a^* = 37.4 \text{ \AA}$, порог протекания в отсутствие поля $\xi_c(0) = 16.34$ и критическое магнитное поле $H_c = 180.6 \text{ кГс}$, при котором радиус состояния равен магнитной длине λ . На рис. 1 показаны расчетные и экспериментальные зависимости $\xi^* = 1 + \xi_c^{-1}(0) \ln[\rho_3(H)/\rho_3(0)]$ от магнитного поля H^* для двух его направлений [001] и [110]. Видно, что в достаточно слабых полях величины ξ^* для обоих направлений почти совпадают. При увеличении поля по направлению [001] МС растет по закону $\ln[\rho_3(H)/\rho_3(0)] = t(H^*)^2$ с $t_{\text{эксп}} = 0.92$ и $t_{\text{расч}} = 0.79$. Расчетные кривые лежат ниже экспериментальных и при более высоких полях. Для направления [110] отклонение

от квадратного закона, как и предполагалось в [4], наступает при меньших полях, чем для направления [001]. Величина коэффициента $t_{\text{расч}}$ совпадает с соответствующей величиной, вычисленной в пределе слабого поля [4]. Относительная разница между расчетными значениями ξ^* —1 и экспериментальными на всем исследованном интервале полей составляет приблизительно 20—25 %.

На рис. 2 представлены вычисленные зависимости МС от направления магнитного поля в плоскости, перпендикулярной оси [110], для различных величин поля H^* и экспериментальный график для одного значения $H=78.2$ кГс [6] или $H^*=0.43$, т. е. относящийся к области промежуточных полей. Как отмечалось в [4], благодаря кубической симметрии кристалла в слабом магнитном поле $H^* \leq 0.2$ зависимость ξ^* от H^* почти отсутствует. С увеличением поля анизо-

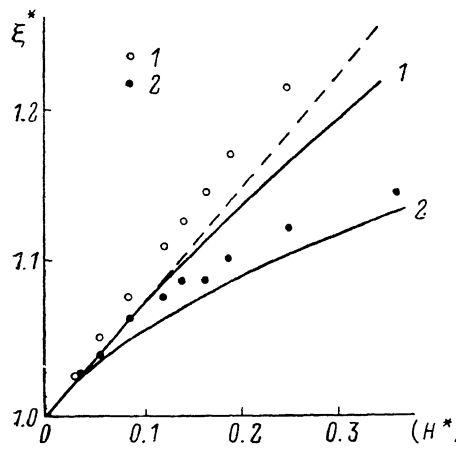


Рис. 1. Зависимость $\xi^* = \xi_c(H)/\xi_c(0)$ от квадрата безразмерного магнитного поля $H^* = H/H_c$.

Сплошные линии — результат расчета для двух направлений поля: 1 — [001], 2 — [110]; точки — соответствующие экспериментальные результаты из работы [6]; штриховая линия — теория для предельного случая слабого поля [4].

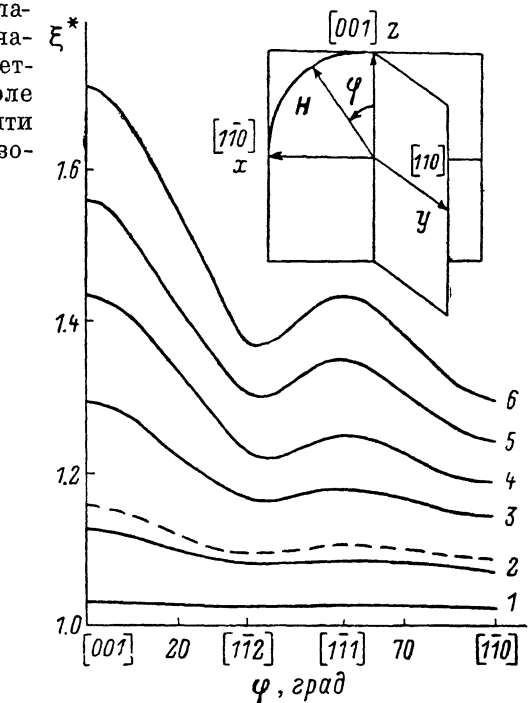


Рис. 2. Зависимость ξ^* от угла наклона φ магнитного поля к направлению [001] в плоскости, перпендикулярной [110].

Сплошные линии — результат расчета для различных значений H^* . H^* : 1 — 0.2, 2 — 0.43, 3 — 0.7, 4 — 0.9, 5 — 1.1, 6 — 1.3. Штриховая линия — экспериментальный результат для $H^* = 0.43$ [6]. На вставке — кристаллические оси, направление магнитного поля H и угол φ между H и осью [001].

тропия МС постепенно усиливается, причем в направлении [001], более «жестком», чем другие, она максимальна, а в направлении [110] минимальна. Имеются также минимум вблизи [112] и максимум вблизи [111]. Такая немонотонность МС связана с «перераспределением ролей» между эллипсоидами при изменении углов наклона их осей к направлению поля. Из рис. 2 видно, что для вычисленного и измеренного МС направления минимумов и максимумов совпадают. Однако при одной и той же величине магнитного поля $H^* = 0.43$ вычисленные значения МС меньше измеренных. Такое различие, возможно, связано с неучтенной зависимостью энергии основного состояния E_0 от H и зависимостью $\epsilon_3(H)$, а также с пренебрежением предэкспоненциальными множителями, дающими поправки в показателе экспоненты МС следующих степеней по параметру малости $\xi_c^{-1}(0) \simeq N^{1/2} a^* \ll 1$.

Автор выражает глубокую признательность Б. И. Шкловскому за предложение темы и всестороннюю помощь и Нгуен Ван Лиену за предоставление программы для ЭВМ, послужившей основой для использованной в работе программы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Шкловский Б. И. — ЖЭТФ, 1971, т. 61, в. 6, с. 2033—2040.
- [2] Шкловский Б. И. — ФТТ, 1973, т. 8, в. 2, с. 416—418.
- [3] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М., 1979. 416 с.
- [4] Шкловский Б. И., Нгуен Ван Лиен. — ФТТ, 1978, т. 12, в. 5, с. 1346—1354.
- [5] Иоселевич А. С. — ФТП, 1981, т. 15, в. 12, с. 2373—2377.
- [6] Chroboczek J. A., Sladek R. J. — Phys. Rev., 1966, v. 151, N 2, p. 595—598.
- [7] Chroboczek J. A., Sladek R. J. — Sol. St. Commun., 1976, v. 18, p. 527—529.
- [8] Trylski J. — Sol. St. Commun., 1971, v. 9, p. 2085—2088.

Физико-технический институт
им А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получена 10.03.1988
Принята к печати 25.03.1988

