

УПРУГИЙ МАГНИТОПРИМЕСНЫЙ РЕЗОНАНС В АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ (ВНУТРИДОЛИННОЕ РАССЕЯНИЕ)

С.М.Дикман^{1),2)}, В.М.Жилин

*Институт физики твердого тела РАН
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 24 сентября 1996 г.

Исследуется рассеяние на возбужденном нейтральном доноре в Ge и Si в окрестности пересечения (в силу анизотропии эффективной массы) уровней энергии электронных состояний примеси, рассматриваемых как функции магнитного поля. Пересечение $2s$ - и $2p$ -подобных уровней приводит к появлению отличного от нуля дипольного момента примесного атома и, следовательно, дальнедействующего потенциала, приводящего к особенности в транспорте носителей тока. Рассчитана поперечная примесная проводимость.

PACS: 72.20.Mу

1. Явления магнитопримесного резонанса в полупроводниках определяются особенностями плотности состояний зонных носителей в квантующем магнитном поле или изменением ρ зависимости от B примесных состояний рассеивающих центров [1–2]. Рассматриваемый нами в этой работе резонанс относится ко второму типу явлений, но в то же время представляет собой принципиально новый случай рассеяния на нейтральном доноре. Обычно при этом потенциал рассеяния считается короткодействующим, а задача решается либо с использованием модели Эржинсона [3–4], либо введением дополнительного подгоночного параметра (например, амплитуды рассеяния). В нашем же случае существенно, что рассеяние происходит на дальнедействующем потенциале [$U(r) \propto 1/r^2$], так что основной вклад в сечение определяется отклонениями на малые углы на больших расстояниях между зонным носителем и примесью. Данная ситуация имеет место, если рассеивающим центром является возбужденный донор в $2s$ - или $2p$ -состоянии вблизи точки вырождения, отвечающей взаимному пересечению уровней энергии этих состояний при некотором значении магнитного поля B_0 . Наличие пересечения и возможные следствия этого обсуждались в работах [5–6].

Расчет различных состояний мелкого донора в сильном по критерию Эллиота-Лудона [7] магнитном поле (то есть при $B = (\hbar^3 \kappa^2 / e^3 m^* c) |B| \gtrsim 1$, где κ – статическая диэлектрическая проницаемость, m^* – эффективная масса (ЭМ); ниже с учетом анизотропии мы будем считать, что при обезразмеривании магнитного поля $m^* = m_{\perp}$) мы изложим более подробно в другой публикации. Здесь только приведем результат для уровней $2s$ и $2p$ вблизи точки их пересечения. На рис.1 показаны четыре случая пересечения, которые отвечают долинам типа A или E (по терминологии работы [8]) в германии и кремнии. Ось вращения эллипсоида A-долины параллельна, а E-долины перпендикулярна магнитному полю. В кремнии оба случая ориентации имеют место, когда $B \parallel \langle 001 \rangle$, причем состояния A-долин представляют собой

¹⁾ e-mail: dickmann@issp.ac.ru .

²⁾ S.M.Dickmann

долин-орбитальный дублет, а состояния E – квадруплет. В германии состояния A появляются, если $B \parallel \langle 111 \rangle$ (синглет), а состояния E , когда $B \parallel \langle 110 \rangle$ (дублет).

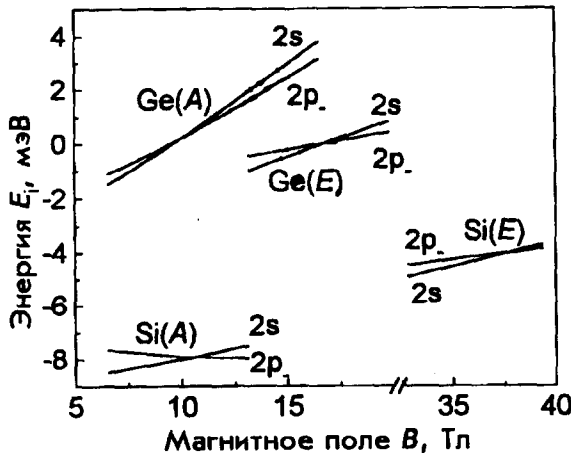


Рис.1. Энергия примесных уровней отсчитана от края зоны проводимости соответствующего полупроводника в нулевом магнитном поле. В скобках указан тип долины

Вид ВФ четного состояния $2s$ и нечетного $2p_-$ приведен в [5–6]. В результате может быть вычислен матричный элемент дипольного момента $ed = e \langle 2s | r | 2p_- \rangle$, который при учете малого возмущения определяет ВФ соответствующих гибридинизированных состояний донора в окрестности $2s - 2p_-$ -пересечения. Для электрона, находящегося в связанном состоянии на центре, удобно ввести "атомные" единицы, которые соответствуют следующим значениям длины, энергии и магнитного поля:

$$a_B = \frac{\hbar^2 \kappa}{m_{\perp} e^2} \simeq (99.9, 31.7) \text{ \AA}^0; \quad \frac{m_{\perp} e^4}{2\hbar^2 \kappa^2} \simeq (4.68, 19.94) \text{ мэВ}; \quad \frac{e^3 m_{\perp}^2 c}{\hbar^3 \kappa^2} \simeq (6.59, 65.6) \text{ Тл}. \quad (1)$$

Первое из чисел в каждой паре отвечает германию, второе кремнию (соответственно $\gamma = m_{\perp}/m_{\parallel} = 0.05134, 0.208$). В Таблице мы приводим значения поля B_0 и соответственно безразмерной величины B_0 в точках $2s - 2p_-$ -вырождения. В третьем столбце приведен квадрат безразмерного матричного элемента

$$D = \begin{cases} (d_x + id_y)/a_B & \text{(для эллипсоида A)} \\ 2d_z/a_B & \text{(для эллипсоида E)} \end{cases} \quad (2)$$

в точке пересечения. Причем ось z считается направленной вдоль B .

	Тип долины	B_0	B_0 , Тл	$ D(B_0) ^2$
Ge	A	1.50	9.9	0.25
	E	2.54	16.7	8.2
Si	A	0.16	10.5	3.73
	E	0.575	37.7	16.8

2. Поскольку ниже речь идет о температурах $T \lesssim 10 \text{ К}$ и полях $|B| \gtrsim 10 \text{ Тл}$, то в качестве свободных носителей мы будем подразумевать электроны нулевой зоны Ландау, относящиеся к долинам с наименьшей по сравнению с другими циклотронной частотой. Как мы увидим далее, характерной длиной, определяющей основной вклад в рассеяние, является магнитная длина

$\lambda = (\hbar c/eB)^{1/2}$, поэтому решение задачи о рассеянии на примеси в приближении дальнего действия возможно, если λ больше характерного борковского радиуса в материале,

$$\lambda \gg a_B. \quad (3)$$

Для кремния вблизи резонансных значений поля это условие выполнено с некоторым запасом, тогда как для германия λ и a_B , очевидно, одного порядка. Данный факт не означает отсутствие в германии эффекта, как такового, но следует иметь в виду, что полученный ниже ответ применительно к германию справедлив лишь по порядку величины.

Вырождение в точке пересечения $2s - 2p_-$ снимается при учете возмущающего потенциала электрона проводимости. Мы будем предполагать адиабатичность его действия на связанный электрон, так что задачу о собственных состояниях для каждого из них можно решать поочередно, используя "медленность" переменных, описывающих состояние зонного носителя. Оценка показывает, что адиабатичность в окрестности точки вырождения имеет место, если энергия свободного электрона ϵ , отсчитанная от нулевого уровня Ландау, меньше циклотронной энергии. Это позволяет в решении задачи о рассеянии описать потенциал донора на расстояниях, много больших, чем a_B , с помощью величин $E_{2s}(B)$, $E_{2p_-}(B)$ и $d(B)$, найденных предварительно в "атомном" масштабе (1) невозмущенных ВФ связанного электрона:

$$U_{\pm}(r) = \pm \left(\sqrt{(\Delta E)^2/4 + e^4 |dr|^2/\kappa^2 r^6} - |\Delta E|/2 \right), \quad \Delta E = E_{2s} - E_{2p_-}. \quad (4)$$

Знак потенциала зависит от того в каком конкретно нижнем или верхнем гибридинизированном состоянии находится донор и на дальнейших ответах не сказывается. Обратим внимание на то, что рассматриваемый в зависимости от магнитного поля потенциал имеет сингулярность вблизи значения B_0 , то есть при $\Delta E = 0$. Как мы увидим, это приводит к особенностям, хотя и слабой, в поперечной проводимости и даже формально к появлению отрицательного поперечного магнетосопротивления.

3. Пусть электрическое поле F направлено перпендикулярно B . В сильном магнитном поле продольные и поперечные релаксационные характеристики вычисляются по-разному, но выражаются через вероятность $W_{\nu, \nu'}$ перехода электрона проводимости из зонного состояния ν в любое другое ν' [1] (индекс ν обозначает полный набор квантовых чисел). В известные формулы для поперечной диффузии и проводимости входит явно одна из поперечных декартовых координат (например y) центра ларморовского кружка, что в квантовом случае обуславливает выбор калибровки Ландау ($A_x = -By$, $A_y = A_z = 0$). При расчете проводимости направление y задано направлением F . Мы ограничимся рассмотрением случая магнитного поля, перпендикулярного оси вращения этой долины, поэтому ВФ электрона на нулевом уровне Ландау имеет обычный вид магнито-осцилляторной функции с той лишь разницей, что магнитная длина должна быть заменена на величину $\lambda \eta^{-1/2}$, где

$$\eta(\alpha) = \frac{\gamma^{1/2} - i(1 - \gamma) \sin 2\alpha/2}{\sin^2 \alpha + \gamma \cos^2 \alpha},$$

а α - угол между осью y и осью симметрии зонного эллипсоида ЭМ. В силу условия адиабатичности, набор ν задан волновыми векторами k_x и k_z , а энергия свободного электрона квантовым числом k_z ($\epsilon = \hbar k_z^2/2m_{\perp}$). Предполагается также, что $eF\lambda \ll \hbar\Omega_z = \hbar\gamma^{1/2}\Omega$ ($\Omega = eB/m_{\perp}c$).

Когда концентрация доноров достаточно мала, вероятность рассеяния может быть найдена в первом порядке ТВ [1]. Если, как обычно, считать что примеси

распределены в пространстве однородно и хаотически, то после вычисления соответствующего матричного элемента получим

$$W_{\nu\nu'} = \frac{2\hbar^3 n_d^* \lambda}{m_{\perp}^2 L_x L_z} \delta(\epsilon - \epsilon') S\left(\frac{y_0 - y'_0}{\lambda}\right) \quad (y_0 = \hbar k_x c / eB), \quad (5)$$

где n_d^* – концентрация возбужденных доноров, L_x, L_y – размеры. Безразмерная функция

$$S(v) = \rho e^{-|\eta|^2 v^2 / 2\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} du \left| \int d^3 \bar{r} U(\bar{r}) \exp[-iv\bar{x} - \rho(\bar{y} - u + iv\vartheta/2)^2] \right|^2 \quad (6)$$

появилась в результате подстановки $\tau = \lambda \bar{t}$. При выводе в (5) учтено, что в нашем случае малых ϵ рассеяниям с изменением и без изменения знака k_x равновероятны. Используются также обозначения: $U = U/\hbar\Omega$, $\rho(\alpha) = \text{Re}\eta(\alpha)$, $\vartheta(\alpha) = \text{Im}\eta(\alpha)/\text{Re}\eta(\alpha)$.

4. Вычислим непосредственно в точке вырождения обратное время ухода электрона проводимости из зонного состояния ν , положив в (4) $\Delta E = 0$ и заменив суммирование по ν' интегрированием $\sum_{\nu'} = \int d\epsilon' g(\epsilon') \int dy'_0$, где $g(\epsilon)$ – плотность квантовых состояний в нулевой зоне Ландау на единицу энергии и единицу длины (заполнение считаем малым):

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \sum_{\nu'} W_{\nu, \nu'} = \frac{\sqrt{2}\hbar^2 n_d^*}{\pi^2 m_{\perp}^{3/2} \epsilon^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} S(v) dv = \frac{2^{5/2} \pi |D(B_0)|^2 \hbar^2 n_d^*}{(m_{\perp})^{3/2} \epsilon^{1/2}} \Lambda. \quad (7)$$

В этом выражении величина Λ возникла вследствие "обрезания" формально логарифмически расходящегося при $\Delta E = 0$ на малых $|v|$ интеграла по v . Оценка показывает, что $\Lambda = \ln(n_d^{*1/3}/\lambda + |D|\hbar\Omega/\delta E)$, причем $\delta E = \max(|E(B) - E(B_0)|, |eF\lambda|, \epsilon)$, поэтому $\Lambda \simeq 4 \div 6$.

Любопытно, что частота столкновений (7) не содержит константу взаимодействия. Эта величина (e^2/κ) "сокращается", так как входит дважды: как множитель, определяющий потенциал рассеяния зонного электрона, и как делитель, из-за того, что для связанного электрона $|d| \sim a_B \propto \kappa/e^2$. Само собой, константа взаимодействия "выпадает" из ответа лишь до тех пор, пока выполнено условие дальнего действия (3).

Для справедливости получаемых ответов время τ должно быть ограничено как сверху так и снизу. Ограничение сверху связано с предположением, что именно данный канал рассеяния является доминирующим. Оказывается, что роль других каналов сводится к минимуму, если концентрация невозбужденных доноров $n_d \lesssim 10^{14} \text{ см}^{-3}$ в кремнии, или $n_d < 10^{13} \text{ см}^{-3}$ в германии; при этом ограничение сверху оказывается порядка 10 пс. Сравнивая этот результат с (7), найдем, что полученный ответ справедлив, если $n_d^* \gtrsim 10^{13} \text{ см}^{-3}$ в Si или $n_d^* \gtrsim 10^{11} \text{ см}^{-3}$ в Ge. В этом смысле, в условиях, когда $n_d^* < n_d$, более предпочтительным материалом оказывается германий. Ограничение на τ снизу возникает из-за того, что де-бройлева длина волны свободного электрона в направлении магнитного поля должна быть меньше длины пробега $(\epsilon/m_{\perp})^{1/2} \tau$. Отсюда $\epsilon > \bar{\epsilon} \sim \hbar^2 (n_d^* \Lambda)^{2/3} |D|^{4/3} / m_{\perp}$.

Наконец, полезно сравнить наш ответ (7) с соответствующим результатом τ_{Er} , получаемым в рамках модели Эржинсоа, обобщенной на случай сильного ($k_x \lambda \ll 1$) магнитного поля [4]. При этом, пренебрегая анизотропией ЭМ, найдем

$$\tau_{Er}(\epsilon) / \tau(\epsilon) = \frac{64}{15} \sqrt{2\pi} |D|^2 \Lambda \frac{n_d^* \lambda}{n_d a_B},$$

то есть релаксация по Эржинсоу происходит медленнее по крайней мере на два порядка, и эффект дальнего действия (наиболее интересны случаи E долины для донора в Ge и A долины в Si, см. таблицу) окажется заметным уже с $n_d^*/n_d \sim 0.01$.

5. Рассчитаем поперечную проводимость [1]:

$$\sigma_{yy}(\alpha) = -\frac{e^2}{2V} \sum_{\nu\nu'} \frac{df}{d\epsilon} (y_0 - y_0')^2 W_{\nu\nu'} = -\frac{e^2 \hbar n_d^*}{\pi m_{\perp} B^{1/2}} \mathcal{F}(\alpha, B) \int_{\epsilon > \bar{\epsilon}} \left(\frac{df}{d\epsilon} \right) \frac{d\epsilon}{\epsilon} \quad (8)$$

($V = L_x L_y L_z$, $f(\epsilon)$ – распределение электронов). Функция безразмерного магнитного поля B и угла α определяется выражением

$$\mathcal{F}(\alpha, B) = B^{1/2} |D|^2 G \left(\eta(\alpha), \frac{\Delta E}{4B|D|} \right); \quad (9)$$

где $G(\eta, \zeta)$ вычисляется, вообще говоря, по-разному в зависимости от того, к какому случаю, A или E , принадлежит долина локализованного электрона:

$$G_{A,E}(\eta, \zeta) = \frac{4\rho}{\pi^3} \int_0^{\infty} v^2 dv e^{-\frac{|\eta|^2 v^2}{2\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} du |K_{A,E}(\eta, \zeta, u, v)|^2, \quad (10)$$

$$K_{A,E}(\eta, \zeta, u, v) = \int_0^{\infty} d\bar{x} \cos(v\bar{x}) \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{y} \exp[-\rho(\bar{y} - u + iv\vartheta/2)^2] \int_0^{\infty} d\bar{z} \times \\ \times \left[\sqrt{\zeta^2 + \frac{s_{A,E}(\bar{r})}{(\bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2)^3}} - |\zeta| \right],$$

причем $s_A = \bar{x}^2 + \bar{y}^2$, $s_E = \bar{z}^2$. В формуле (9) ΔE есть безразмерная по правилу (1) разность энергий ΔE . Если $\Delta E = 0$, то выражение существенно упрощается и не зависит от типа ориентации A или E . В частных случаях

$$G(\eta, 0) = \begin{cases} 2 \sin^2 \alpha, & \text{если } \gamma \ll 1, \text{ но } \alpha \gg \gamma^{1/2}; \\ 1, & \text{если } \eta = 1; \\ 2\gamma^{1/2}, & \text{если } \alpha^2 \lesssim \gamma \ll 1. \end{cases} \quad (11)$$

Как уже отмечалось, в точке $\zeta = 0$ функции (10) не аналитичны. Можно показать, что при $|\zeta| \ll 1$

$$G_{A,E}(\eta, \zeta) - G(\eta, 0) = \begin{cases} G_A^{(1)}(\gamma, \alpha) |\zeta|^{2/3} + O(|\zeta|) & (\text{случай } A), \\ G_E^{(1)}(\gamma, \alpha) |\zeta|^{1/2} + O(|\zeta|) & (\text{случай } E). \end{cases} \quad (12)$$

В наиболее исчерпывающем виде мы демонстрируем вычисления на рис.2 применительно к Si для случая A -долины локализованного электрона и направлений $\alpha = 0, \pi/2$. Расчет показывает, что $G_A^{(1)}(0.208, 0) = 0.479$, $G_A^{(1)}(0.208, \pi/2) = 1.041$; но член порядка $|\zeta|$ в (12) оказывается существенным уже начиная с $\zeta \simeq 0.01$ и имеет разный знак в зависимости от η . При $\alpha = 0$ он отрицателен (см. вставку на рис.2). Фактически, особенность по ζ "размывается", если учесть присутствие в материале внешнего электрического поля или нарушение адиабатичности в воздействии электрона проводимости на донор.

Интеграл по энергии (8) легко вычисляется, если ввести эффективную температуру T^* , характеризующую распределение неравновесных электронов проводимости: $(df/d\epsilon)|_{\epsilon=0} = -f(0)/T^*$. Окончательно, учитывая все четыре E -долины зонного квадруплета в кремнии, находим

$$\bar{\sigma}_{yy}(\alpha) = \frac{2e^2 \hbar n_d^* f(0)}{\pi m_{\perp} T^* B^{1/2}} \ln(T^*/\bar{\epsilon}) [\mathcal{F}(\alpha, B) + \mathcal{F}(\pi/2 - \alpha, B)], \quad T^* \gg \bar{\epsilon}.$$

Зависимость $\bar{\sigma}_{yy}$ от угла α является слабой (это подтверждается и формулой (11)). В основной части рисунка 2 показаны зависимости $\mathcal{F}_A(0, B) + \mathcal{F}_A(\pi/2, B)$

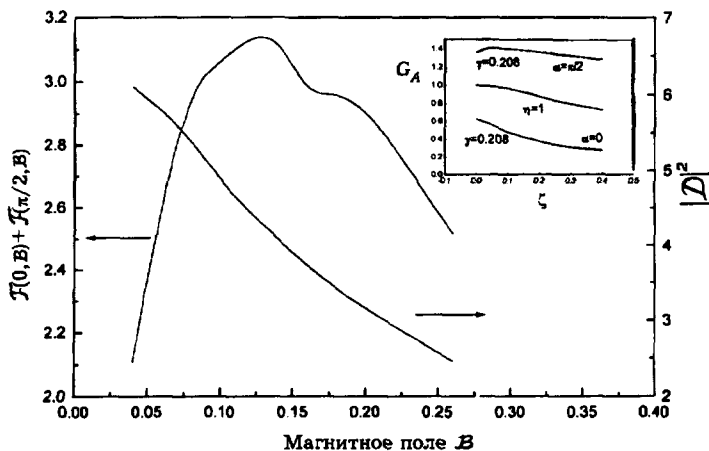


Рис.2

и $|\mathcal{D}_A(B)|$. Учитывая соотношение точности расчета и графического представления результатов, мы сгладили особенность в точке B_0 , используя сплайны.

Поперечное магнетосопротивление в нашем случае есть

$$\rho_{yy}(B) = \bar{\sigma}_{yy} / \bar{\sigma}_{xy}^2 \propto B^{3/2} [\mathcal{F}(\alpha, B) + \mathcal{F}(\pi/2 - \alpha, B)].$$

Отвлекаясь от немонотонности, определяемой функцией $\mathcal{F}(B)$, мы видим, что, грубо говоря, оно растет с полем как $B^{3/2}$. Наш ответ является в какой-то мере промежуточным между рассеянием на заряженных примесях (при этом ρ_{yy} не зависит от B , см.[1]) и рассеянием на точечных дефектах ($\rho_{yy} \propto B^2$, см. там же). Главной же особенностью, конечно, является немонотонная с максимумом в окрестности $B_0 = 10.5$ Тл зависимость от поля величины $\rho_{yy} / B^{3/2}$. Еще более существенно отреагирует на появление дальнего действия в примесном рассеянии производная $d\rho_{yy}/dB$, которая формально в силу (12) обращается при B_0 в бесконечность и меняет знак.

Что же касается возможного наблюдения эффекта, то, по-видимому, наиболее подходящим материалом, несмотря на фактическое невыполнение условия (3), является германий при условии, что в нем $B \parallel \langle 110 \rangle$.

Авторы благодарны В.Н.Звереву за обсуждение. Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты 95-02-05883 и 96-02-17535).

1. В.Ф.Гантмахер, И.Б.Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, М.: Наука, 1984.
2. V.F.Gantmakher and V.N.Zverev, In *Landau Level Spectroscopy*. Eds. G.Landwehr and E.I.Rashba, North-Holland, 1991, P.1135.
3. C.Erginsoy, *Phys. Rev.* **79**, 1013 (1950).
4. H.Kobori, T.Ohyama, and E.Otsuka, *J. Phys. Soc. Jap.* **59**, 2164 (1990).
5. С.М.Дикман, Д.И.Сидельников, *Письма в ЖЭТФ* **53**, 600 (1991).
6. S.M.Dickmann and D.I.Sidel'nikov, *Phys. Letters, A* **187**, 79 (1994).
7. R.J.Elliott and R.Loudon, *J. Phys. Chem. Solids* **8**, 382 (1959); *ibid.* **15**, 196 (1960).
8. Е.М.Гершензон, Г.Н.Гольцман, А.И.Елантьев, *ЖЭТФ* **72**, 1062 (1977).