

УДК 621.362

©1993

МЕЖДОЛИННОЕ РАССЕЯНИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СПЛАВАХ BiSb

B.A. Козлов, С.Е. Турецкий

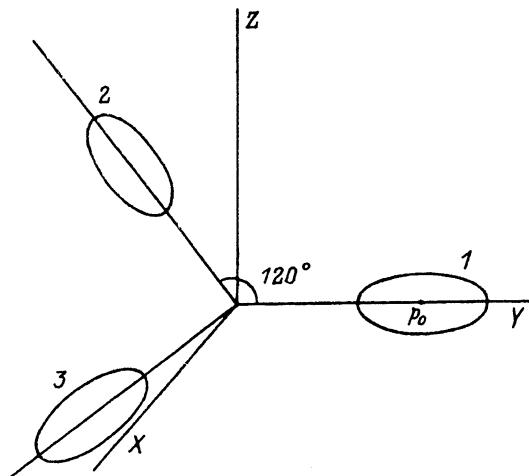
Теоретически исследуется междолинное рассеяние в материалах типа BiSb как на заряженных, так и на нейтральных примесях. Анализируется относительный вклад междолинного рассеяния в величину времени релаксации в зависимости от величины параметра a , имеющего смысл радиуса нейтрального атома. Показано, что согласие с экспериментом достигается при a , лежащем в пределах от 1 до 2.5 Å.

Междолинные процессы рассеяния носителей тока в многодолинных полупроводниках и полуметаллах играют весьма существенную роль в явлениях переноса [1–4]. Помимо того, как было показано в работе [5], наличие междолинного рассеяния в полупроводниковом сплаве BiSb также оказывается на осцилляционных эффектах в магнитном поле. В то же время вопрос о величине и температурной зависимости соответствующей длины пробега l_m по существу остается открытым.

С экспериментальной точки зрения оценка величины l_m оказалась возможной в чистых массивных монокристаллах висмута [2, 6]. Однако, как показывает анализ, здесь фактически удается оценить лишь длину рекомбинации. Последнее обстоятельство относится как к акустомагнитным измерениям [6], так и к измерениям поперечного электрического поля в условиях диффузионно-размерного эффекта, осуществленных в работе [2]. Что же касается переходов между эквивалентными долинами, особенно в условиях, когда отсутствует дырочный экстремум, а длины пробегов относительно междолинных переходов сравнимы по порядку величины с внутридолинными, то здесь по существу не удается сколь-нибудь надежно оценить величину l_m .

Указанная картина имеет место в полупроводниковых сплавах BiSb, где, согласно экспериментальным оценкам работы [5], отношение междолинного времени релаксации τ_m к внутридолинному τ_b находится в интервале $0.8 < \tau_m/\tau_b < 3.3$.

Вообще говоря, вопрос о механизме междолинного рассеяния в отличие от особо чистых монокристаллов Bi, где оно осуществляется в основном на фонах [6], в соединениях BiSb до сих пор не решен. Столь малые длины пробега относительно междолинного рассеяния, следующие из экспериментальных оценок работы [5], скорее свидетельствуют в пользу примесного механизма междолинного рассеяния. На принципиальную возможность такого рассеяния было указано в работе [7], где рассеяние на нейтральной примеси трактовалось как рассеяние на потенциале типа твердой сердцевины, поскольку его Фурье-образ содержит компоненты с



Расположение электронных долин в сплаве BiSb.

волновыми векторами порядка размера зоны Бриллюэна. Однако количественные оценки применительно к реальным материалам в настоящее время фактически отсутствуют.

1. Основные соотношения

Рассматривается легированный полупроводниковый сплав BiSb, зона Бриллюэна которого содержит три эквивалентных эллипсоида 1–3 (см. рисунок). В области гелиевых температур электронный газ можно считать полностью вырожденным, поскольку при концентрациях легирующей примеси $\simeq 10^{16} \text{ см}^{-3}$ соответствующая энергия Ферми составляет 8.4 мэВ. При этом фермиевский импульс имеет порядок 10^6 см^{-1} , так что соответствующие долины являются хорошо определенными и не перекрывающимися друг с другом.

Для исследования сформулированной задачи удобно записать все уравнения не для каждого минимума энергетического спектра в отдельности, а для всей зоны Бриллюэна сразу. Для этого надо воспользоваться кинетическим уравнением, полученным в [8] для произвольного закона дисперсии электронов проводимости.

Однако для конкретных расчетов воспользоваться уравнением, полученным в [8], невозможно, поскольку не известны ни закон дисперсии электронов $\varepsilon(\mathbf{k})$ во всей зоне, ни точные волновые функции электронов в кристалле $\psi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Для дальнейшего необходимо учесть, что неравновесная добавка к функции распределения содержит в качестве множителя производную от фермиевской функции, которая отлична от нуля только в слое толщиной kT вблизи поверхности Ферми. Как будет показано ниже, данное обстоятельство позволяет записать обычное кинетическое уравнение с интегралом столкновений, правильно описывающим переходы только с участием этой группы электронов.

Для рассмотрения указанных электронов можно воспользоваться методом эффективной массы и считать, что волновая функция электрона

вблизи минимума с центром в точке \mathbf{k}_0 имеет вид

$$\psi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(ikr)\omega_{\nu\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}).$$

Таким образом, в нашем подходе не делается различия между внутридолинным и междолинным рассеянием, которое описывается одним и тем же интегралом столкновений с областью интегрирования, формально распространяющейся на всю зону Бриллюэна.

В соответствии со сказанным запишем кинетическое уравнение Больцмана

$$\epsilon E \frac{\partial f^0}{\partial p} = \int W(k - k') (g_{k'} - g_k) \delta(\epsilon - \epsilon') d^3 k'. \quad (1)$$

Здесь $f^0(\epsilon)$ — равновесная функция распределения Ферми–Лирака; g_k — неравновесная добавка к ней; $\epsilon(\mathbf{k})$ — закон дисперсии электронов с тремя эквивалентными минимумами, повернутыми на 120° относительно друг друга (см. рисунок). Будем считать, что оси эллипсоидов находятся в плоскости, перпендикулярной оси симметрии C_3 .

Для дальнейших расчетов центральным вопросом является выбор потенциала рассеяния на нейтральной примеси. Вполне естественно считать, что роль таких рассеивателей в соединениях BiSb играют атомы сурьмы, являющиеся примесью замещения. Поскольку характерный импульс передачи при междолинном рассеянии в указанных соединениях порядка 10^7 см^{-1} , то детали потенциала, имеющие значения на расстояниях порядка постоянной решетки, в данном случае не играют существенной роли. Поэтому для вычисления рассеяния на нейтральной примеси соответствующий потенциал $W(k)$ вполне разумно считать изотропным и отвечающим рассеянию на водородоподобном атоме

$$W(k) = \frac{4Z^2 e^4 a^4}{\hbar^4} N_0 \frac{(8 + (ak)^2)^2}{(4 + (ak)^2)^4}. \quad (2)$$

В этой формуле Ze — эффективный заряд, a — радиус потенциала, N_0 — концентрация нейтральных примесей.

В случае рассеяния на заряженных примесях $W(k)$ имеет вид

$$W(k) = \frac{4e^4 N_i}{\varkappa_0^2 \hbar^4} \frac{1}{(k^2 + \rho_D^{-2})^2}, \quad (3)$$

где ρ_D — дебаевский радиус, \varkappa_0 — диэлектрическая проницаемость, N_i — концентрация заряженных примесных центров.

Из (2) следует, что при значении a , стремящемся к нулю, вероятность рассеяния $W(k)$ стремится к величине W_0 , не зависящей от волнового вектора \mathbf{k} . В этом пределе кинетическое уравнение (1) можно решить аналитически. Тогда выражение для g_k имеет вид

$$g_p = \epsilon \tau(\epsilon) E \left(-\frac{\partial f^0}{\partial p} \right), \quad (4)$$

где

$$\tau(\epsilon) = \frac{1}{W_0 \int \delta(\epsilon - \epsilon') d^3 p'}. \quad (5)$$

Из (5) следует, что в рассматриваемом предельном случае

$$\frac{\tau_m}{\tau_b} = 0.5.$$

Отметим, что данное значение не попадает в интервал значений τ_m/τ_b , указанный в работе [5].

В случае же произвольного радиуса a или при рассеянии на ионизированных примесях количественный анализ задачи до сих пор не сделан, что связано с невозможностью аналитического решения уравнения Больцмана. Соответствующее решение задачи может быть найдено с помощью вариационного метода.

В соответствии с вариационным принципом решение $g(\mathbf{p})$ кинетического уравнения (1) минимизирует функционал

$$J[\varphi] = (\varphi, \hat{L}\varphi) - 2eE \left(\varphi, \frac{\partial f^0}{\partial \mathbf{p}} \right). \quad (6)$$

Круглые скобки означают интегрирование по всей зоне Бриллюэна

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi(\mathbf{p})\psi(\mathbf{p})d^3p.$$

Функцию $\varphi(\mathbf{p})$ будем искать в следующем виде:

$$\varphi(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^3 c_j v_j \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right). \quad (7)$$

Здесь c_j — варьируемые коэффициенты, $v_j = \partial \varepsilon / \partial p_j$ — скорость электрона.

Подобный подход к исследованию процессов рассеяния в сильно анизотропных материалах применительно к внутридолинному рассеянию был использован в работе [9]. Что же касается междолинного рассеяния, то развитая ниже методика позволяет в рамках единого вариационного принципа получить выражение для эффективного времени релаксации, одновременно учитывающее как внутридолинные, так и междолинные переходы.

В соответствии с вышесказанным в таком виде ищется неравновесная добавка во всей зоне Бриллюэна. Отметим, что в нашем подходе отсутствует индекс долины α , который часто приписывается физическим величинам, относящимся к долине с номером α . Связь между двумя подходами простая. Если \mathbf{p} лежит вблизи минимума с номером α , то можно записать

$$\varphi^{(\alpha)}(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^3 c_j v_j^{(\alpha)} \left(-\frac{\partial f^{0(\alpha)}}{\partial \varepsilon^{(\alpha)}} \right), \quad (8)$$

где

$$v_j^{(\alpha)} = \frac{\partial \varepsilon^{(\alpha)}}{\partial p_j}.$$

Коэффициент c_j связан с тензором времени релаксации τ_{ij} следующим образом:

$$c_j = e\tau_{ij}E_i. \quad (9)$$

С помощью (8), (9) можно найти тензор проводимости

$$\sigma_{ik} = \frac{e^2 V}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^3 \tau_{ij} \int v_k v_j \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) d^3 k. \quad (10)$$

Заметим, что в рассматриваемой модели тензор σ_{ik} инвариантен по отношению к поворотам на 120° . Из (10) следует, что матрица τ_{ij} времени релаксации коммутирует с матрицей M поворота на 120°

$$M\tau = \tau M. \quad (11)$$

Так как производная $(-\partial f^0 / \partial \varepsilon)$ имеет в случае полного вырождения резкий максимум вблизи поверхности Ферми, то основной вклад в интеграл (10) вносят области интегрирования вблизи поверхностей Ферми эллипсоидов. Это дает возможность записать

$$\sigma_{ik} = \sum_{\alpha} \sigma_{ik}^{(\alpha)}, \quad (12)$$

$$\sigma_{ik}^{(\alpha)} = \frac{e^2 V}{(2\pi)^3} \tau_{ij} \int_{(\alpha)} v_j v_k \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) d^3 k, \quad (13)$$

где интегрирование проводится по эллипсоиду с номером α .

С помощью (11) легко получить обычный результат

$$\sigma = \sigma^{(1)} + M\sigma^{(1)}M^T + M^T\sigma^{(1)}M. \quad (14)$$

Из вариационного метода следует система уравнений на неизвестные коэффициенты c_j

$$\sum_{j'=1}^3 L_{jj'} c_{j'} = b_j, x \quad (15)$$

$$L_{jj'} = \left(v_j \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}, \hat{L} v_{j'} \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right), \quad (16)$$

$$b_j = \left(v_j \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial f^0}{\partial \mathbf{p}} \right) e\mathbf{E}. \quad (17)$$

Таким образом, задача сводится к нахождению коэффициентов $L_{jj'}$, b_j и решению системы (15). Используя самосопряженность оператора столкновений L на примесях [10], коэффициенты $L_{jj'}$ можно записать в симметричном виде

$$L_{jj'} = -\frac{1}{2} \int d^3 p d^3 p' W(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \left(\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right)^2 (v'_j - v_j) (v'_{j'} - v_{j'}) \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (18)$$

Анализируя интеграл (18) аналогично интегралу (10), приедем к результату

$$L_{jj'} = \sum_{\alpha, \beta=1}^3 L_{jj'}^{(\alpha, \beta)}. \quad (19)$$

В этих обозначениях $L_{jj'}^{(\alpha, \beta)}$ есть интеграл (18), в котором областью интегрирования по \mathbf{p} является эллипсоид с номером α , а по \mathbf{p}' — эллипсоид с номером β .

Учитывая симметрию рассматриваемой системы, несложно показать, что для вычисления $L_{jj'}$ достаточно знать $L_{xx}^{(1,1)}$, $L_{xx}^{(1,2)}$, $L_{yy}^{(1,1)}$, $L_{yy}^{(1,2)}$ и $L_{zz}^{(1,2)}$.

$$L_{xx} = 3L_{xx}^{(1,1)} + 6L_{xx}^{(1,2)}, \quad (20)$$

$$L_{yy} = L_{zz} = \frac{3}{2} \left(L_{xx}^{(1,1)} + L_{yy}^{(1,1)} \right) + 3 \left(L_{yy}^{(1,2)} + L_{zz}^{(1,2)} \right). \quad (21)$$

Выведем теперь выражения, необходимые для вычисления величин $L_{jj'}^{(1,1)}$ и $L_{jj'}^{(1,2)}$. Согласно (18), коэффициенты $L_{jj'}^{(1,1)}$ определяются выражением

$$L_{jj'}^{(1,1)} = -\frac{1}{2} \int d^3p d^3p' W(p' - p) \left(\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right)^2 (v'_j - v_j) (v'_{j'} - v_{j'}) \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (22)$$

в котором областью интегрирования является первая долина с законом дисперсии

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p_x^2}{2m_1} + \frac{(p_y - p_0)^2}{2m_2} + \frac{p_z^2}{2m_1}. \quad (23)$$

С помощью несложных преобразований интеграл (22) приводится к виду

$$L_{jj'}^{(1,1)} = -\frac{1}{2} \frac{m_2}{m_1} \frac{\pi}{3T} I_{jj'}, \quad (24)$$

где

$$I_{jj'} = \int d^3q \frac{\Theta(2p_F - q)}{q} c_j c_{j'} W(R), \quad (25)$$

$$R = q_x^2 + \frac{m_2}{m_1} q_y^2 + q_z^2, \quad c_x = q_x, \quad c_y = q_y \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}, \quad c_z = q_z,$$

Θ — функция Хевисайда.

При получении формул (24), (25) было учтено наличие резкого максимума у производной $(\partial f^0 / \partial \varepsilon)^2$, что дало возможность в оставшейся части подынтегрального выражения заменить p на p_F .

Переходя в (25) к сферической системе координат, для $I_{jj'}$ получим

$$I_x = I_z = \pi A \int_0^1 dx (1 - x^2) \frac{\alpha^2(x)}{b^4} J(\alpha(x)), \quad (26)$$

$$I_y = 2\pi \frac{m_1}{m_2} A \int_0^1 dx x^2 \frac{\alpha^2(x)}{b^4} J(\alpha(x)). \quad (27)$$

Здесь

$$A = 4Z^2 \epsilon^4 a^4 N_0, \quad b^2 = 4/a^2,$$

$$\alpha(x) = \frac{b^2}{1 + (m_2/m_1 - 1)^2}, \quad p_F = \sqrt{2m_1 E_F},$$

$$J(\alpha(x)) = \ln \left(1 + \frac{4p_F^2}{\alpha(x)} \right) + \frac{4p_F^2}{\alpha(x) + 4p_F^2} + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2(x) - (\alpha(x) + 4p_F^2)^2}{(\alpha(x) + 4p_F^2)^2} + \\ + \frac{1}{3} \frac{\alpha^3(x) - (\alpha(x) + 4p_F^2)^2}{(\alpha(x) + 4p_F^2)^3}.$$

Интегралы в (26), (27) не выражаются через элементарные функции. Дальнейшее интегрирование приводит к громоздкому выражению, которое мы опустим.

В случае рассеяния на ионизированных примесях результат будет иметь вид

$$J_x = J_z = \pi A \int_0^1 dx (1 - x^2) \alpha^2(x) J(\alpha(x)), \quad (28)$$

$$J_y = 2\pi \frac{m_1}{m_2} A \int_0^1 dx x^2 \alpha^2(x) J(\alpha(x)), \quad (29)$$

$$J(\alpha) = \ln \left(1 + \frac{4p_F^2}{\alpha(x)} \right) + \frac{\alpha(x)}{4p_F^2 + \alpha(x)} - 1,$$

$$\alpha(x) = \frac{\hbar^2}{\rho_D^2} \frac{1}{1 + \left(\frac{m_2}{m_1} - 1 \right) x^2}, \quad A = \frac{4\epsilon^4 N_i}{\kappa_0^2} \left(\frac{\rho_D}{\hbar} \right)^4.$$

В свою очередь, согласно (18), элемент $L_{jj'}^{(1,2)}$ дается выражением

$$L_{jj'}^{(1,2)} = -\frac{1}{2} \int d^3 p \int d^3 p' W(\mathbf{p} - \mathbf{p}') (v'_j - v_j) (v'_{j'} - v_{j'}) \left(\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right)^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (30)$$

Окончательный результат получается из (30) после громоздких, но простых вычислений

$$L_{jj}^{(1,2)} = \frac{m_2}{3Tm_1} \int d\vartheta d\vartheta' d\varphi d\varphi' W(R) \varphi_j^2 \cos \vartheta \sin \vartheta' \sin \vartheta' \sin \vartheta', \quad (31)$$

где

$$R = q_x^2 + \left(\frac{3}{2} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} p_y + \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} q_y + \frac{\sqrt{3}}{2} p_z + \frac{3}{2} p_0 \right)^2 +$$

$$+ \left(\frac{3}{2} p_z + q_z - \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} p_y - \frac{\sqrt{3}}{2} p_0 \right)^2, \quad (32)$$

$$\varphi_x = q_x,$$

$$\varphi_y = \frac{3}{2} \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} p_y + \frac{\sqrt{3}}{2} p_z + \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} q_y,$$

$$\varphi_z = \frac{3}{2} p_z - \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} p_y + q_z. \quad (33)$$

Входящие в результаты (32) и (33) переменные \mathbf{p} и \mathbf{q} связаны с переменными интегрирования ϑ , ϑ' , φ и φ' следующими соотношениями:

$$q_x = \sin \vartheta' \cos \varphi',$$

$$q_y = \sin \vartheta' \sin \varphi',$$

$$q_z = \cos \vartheta',$$

$$p_x = \sin \vartheta \cos \varphi \sin \varphi' + \sin \vartheta \sin \varphi \cos \vartheta' \cos \varphi' + \cos \vartheta \sin \vartheta' \cos \varphi',$$

$$p_y = -\sin \vartheta \cos \varphi \cos \varphi' + \sin \vartheta \sin \varphi \cos \vartheta' \sin \varphi' + \cos \vartheta \sin \vartheta' \sin \varphi',$$

$$p_z = -\sin \vartheta \sin \varphi \sin \vartheta' + \cos \vartheta \cos \vartheta'. \quad (34)$$

Поскольку дальнейшее изучение выражения (31) аналитически невозможно, его вычисление проводилось численными методами.

Что же касается коэффициентов b_j , то элементарные расчеты приводят к результату

$$b_x = \frac{2\pi}{3} \frac{eE_x}{m_1 T} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} p_F^3,$$

$$b_y = b_z = \frac{\pi}{3} \frac{eE_{y,z}}{m_1 T} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} p_F^3 \left(1 + \frac{m_2}{m_1} \right). \quad (35)$$

Как было показано выше, матрица $L_{jj'}$ имеет диагональный вид, поэтому система уравнений (15) распадается на три независимых уравнения. Отличные от нуля компоненты тензора времени релаксации τ_{ij} , определяемого формулой (9), даются следующими выражениями:

$$\tau_x = \frac{2\pi}{3} \frac{p_F^3}{m_1 T} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} / L_{xx}, \quad (36)$$

$$\tau_y = \tau_z = \frac{\pi}{3} \frac{p_F^3}{m_1 T} \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \left(1 + \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} \right) / L_{yy,zz}. \quad (37)$$

Пользуясь (20), (21), (36) и (37), можно выделить относительный вклад междолинного рассеяния в тензор τ_{ij}

$$\left(\frac{1}{\tau_x} \right)_M / \left(\frac{1}{\tau_x} \right)_B = 2 \frac{L_{xx}^{(1,2)}}{L_{xx}^{(1,1)}}, \quad (38)$$

$$\left(\frac{1}{\tau_y}\right)_M / \left(\frac{1}{\tau_y}\right)_B = 2 \frac{L_{yy}^{(1,2)} + L_{zz}^{(1,2)}}{\left(1 + d \frac{m_1}{m_2}\right) L_{xx}^{(1,1)}}, \quad (39)$$

$$\left(\frac{1}{\tau_z}\right)_M / \left(\frac{1}{\tau_z}\right)_B = 2 \frac{L_{yy}^{(1,2)} + L_{zz}^{(1,2)}}{\left(1 + d \frac{m_1}{m_2}\right) L_{xx}^{(1,1)}}. \quad (40)$$

Как показал дальнейший анализ, проведенный численными методами применительно к сплаву Bi_{0.9}Sb_{0.1}(Te), добиться согласия с экспериментальными результатами [5] возможно только в случае рассеяния на нейтральной примеси, причем при изменении параметра a , имеющего смысл размера примеси, от 1 до 2.5 Å отношение τ_M/τ_B лежит в пределах от 0.8 до 3.5.

Список литературы

- [1] Рашба Э.И. // ЖЭТФ. 1965. Т. 48. С. 1427–1432.
- [2] Межов-Деглин Л.П. // Автореф. докт. дис. Черноголовка, 1981.
- [3] Козлов В.А., Сахаров К.А. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. № 7. С. 267–270.
- [4] Козлов В.А., Сахаров К.А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 235–242.
- [5] Киракозова Л.А., Минина Н.Я., Савин А.М. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 52. № 1. С. 693–696.
- [6] Lopez A.A. // Phys. Rev. 1968. V. 175. N 3. P. 823–840.
- [7] Гантмахер Ф.В., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М.: Наука, 1984. С. 351.
- [8] Кон В., Люттенгер Дж. // Сб. „Вопросы квантовой теории необратимых процессов“. М.: ИЛ, 1961. С. 365.
- [9] Somaiovich A.G., Nitsovich M.U., Nitsovich V.M. // Phys. Stat. Sol. 1966. V. 16. N 2. P. 449–452.
- [10] Дыкман И.М., Томчук П.М. Явления переноса и флюктуации в полупроводниках. Киев: Наукова думка, 1981. С. 320.

Московский
физико-технический институт

Поступило в Редакцию
21 мая 1991 г.
В окончательной редакции
18 декабря 1992 г.