

УДК 621.315.592

© 1990

ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С РЕЗОНАНСНЫМИ УРОВНЯМИ

А. В. Дмитриев

Рассмотрен электронный транспорт в полупроводнике, легированном примесями, которые образуют квазилокальные электронные состояния на фоне разрешенной зоны. Резонансное рассеяние носителей на таких примесях отличается от обычного потенциального рассеяния значительной продолжительностью пребывания частицы на центре, что приводит к уменьшению концентрации свободных электронов в зоне. Впервые принято во внимание влияние этой стороны резонансного рассеяния на кинетику носителей. Рассмотрен нелинейный электроперенос в полупроводнике с резонансными примесями. Возможность перехода части носителей на центры в процессе резонансного рассеяния приводит к появлению N-образных вольт-амперных характеристик по аналогии с эффектом Ганна.

Во многих полупроводниковых соединениях, таких как GaAs, GaSb, $Pb_{1-x}Sn_xTe$, PbSe, $Hg_{1-x}Cd_xTe$ и др., примеси и дефекты порождают квазилокальные электронные состояния, уровни энергии которых расположены на фоне разрешенной зоны [1-3]. Эти так называемые резонансные состояния оказывают заметное влияние на электронный транспорт. Во-первых, рассеяние на обладающих ими центрах носит резонансный характер с резкой энергетической зависимостью сечения и большой его величиной в максимуме (порядка квадрата де-Бройлевской длины волны электрона λ_D). Подчеркнем, что под резонансным рассеянием мы в этой статье подразумеваем именно столкновения с центрами, имеющими квазилокальные состояния, а не рассеяние на примесях с мелкими или виртуальными уровнями, которое тоже иногда называют резонансным [4].

Второй характерной особенностью резонансного рассеяния является длительность самого процесса взаимодействия частицы с примесью. Продолжительность пребывания электрона на центре определяется тут не временем пролета частицей радиуса действия потенциала, как при обычном рассеянии, а временем жизни квазилокального состояния на центре $\tau \sim \hbar/\gamma$ [5], где γ — энергетическая ширина этого состояния. Диапазон значений времен жизни резонансных состояний в полупроводниках очень широк [1], и для долгоживущих резонансов τ может быть наибольшим из электронных времен. Поскольку одним из основных условий применимости кинетического уравнения является малость времени рассеяния по сравнению с временем свободного пробега τ_p [6], то при $\tau > \tau_p$ уравнение Больцмана оказывается непригодным для описания транспорта в системе [7] и возникает вопрос о построении адекватного формализма для этого случая. Поскольку τ не связано с сечением резонансного рассеяния, максимальная величина которого определяется только длиной волны электрона $\sigma \sim 1/k^2$ (k — волновой вектор), то условие $\tau > \tau_p$ может быть выполнено при низкой плотности резонансных центров N , когда $N\sigma^{3/2} \ll 1$ и соответственно $kl \gg 1$ (l — длина свободного пробега). Таким образом, кинетическое уравнение может сделаться неприменимым даже в слабо легированном полупроводнике.

Проблемы, возникающие вследствие длительности взаимодействия электрона с примесью, связаны с тем, что находящийся в процессе рассеяния на центре носитель не дает в это время вклада в ток, так что число подвижных носителей эффективно уменьшается. Соответственно влияние резонансного рассеяния на транспорт не сводится только к изменению направления движения частиц, как предполагается в уравнении Больцмана. Существенно, что уменьшение концентрации свободных носителей обусловлено самим упругим и когерентным процессом резонансного рассеяния. С точки зрения квантовой механики описанный эффект связан с аномально большой величиной амплитуды волновой функции на резонансном центре, которая намного превосходит амплитуду на бесконечности.

Необходимо заметить, что продолжительность пребывания электрона на центре в процессе резонансного рассеяния может ограничиваться не только временем жизни квазилокального состояния, но и различными неупругими процессами выброса с примеси в зону. Например, носитель, находящийся на центре в процессе рассеяния, может поглотить фонон или быть выбит другим электроном. Случай, когда время неупругого выброса мало по сравнению с τ , относительно прост [7]; при этом можно пренебречь шириной резонансного уровня и считать его полностью локализованным. Мы же рассмотрим здесь менее очевидную ситуацию, когда время жизни носителя на центре, обусловленное неупругими процессами, существенно превосходит τ , так что влияние других частиц на резонансное взаимодействие электрона с примесью можно не учитывать. Соответственно мы будем полагать, что время межэлектронных столкновений и время релаксации энергии носителей гораздо больше τ .

Построить теорию электронного транспорта в описанной ситуации удастся в стационарных условиях и в предположении о классичности движения частиц вдали от центров, т. е. при $kl \gg 1$. Кроме того, мы будем считать, что заселенность зонных состояний с энергиями порядка резонансной мала, $f \ll 1$. Как будет показано ниже, заселенность центров при этом тоже мала. Распределение квазилокальных состояний по энергиям $\rho_I(\epsilon_0)$ мы будем считать заданным. Оно может, например, определяться случайными полями заряженных примесей или неэквивалентностью положений резонансных центров в элементарной ячейке. В [8] рассмотрен более сложный случай, когда ρ_I самосогласованно определяется полями электронов, которые находятся на самих резонансных примесях. При $f \ll 1$ этот эффект, однако, можно не учитывать.

В силу предположения $kl \gg 1$ движение частиц между центрами классично. Из этого следует, что электроны, свободно движущиеся между примесями вдали от них (в масштабе λ_B), можно описывать обычной классической функцией распределения $f(\mathbf{k})$. Она, однако, не включает носители, пребывающие на центрах. Таким образом, $f(\mathbf{k})$ представляет собой функцию распределения только частиц, налетающих на примеси и рассеивающихся на них. Поскольку в стационарных условиях уход частиц из состояния \mathbf{k} определяется просто темпом стационарного рассеяния, для f справедливо уравнение обычного вида

$$\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{df}{d\mathbf{k}} = N \int d\sigma' v(f(\mathbf{k}')) - f(\mathbf{k}) + \text{St}\{f\}, \quad (1)$$

где \mathbf{E} — электрическое поле, $d\sigma'$ — дифференциальное сечение резонансного рассеяния, v — скорость частиц, $\text{St}\{f\}$ — интеграл нерезонансных столкновений. Поскольку $f \ll 1$ при энергии порядка энергии квазилокализированных состояний, то число примесей, на которых возможно резонансное рассеяние, можно считать равным их полному числу N .

Таким образом, хотя формальные условия применимости уравнения Больцмана и нарушены, тем не менее описание движения частиц вдали от рассеивающих центров сводится к уравнению того же вида. Если функция распределения f определена, все кинетические коэффициенты можно найти обычным образом, так как потоки частиц при $kl \gg 1$ могут быть вычислены через поверхность, проходящую всюду далеко от примесей.

Однако встает вопрос о том, как отнормировать f , ведь она, по определению, описывает только частицы вдали от примесей, тогда как при $\tau > \tau_p$ значительная плотность носителей сосредоточена на центрах. Дело в том, что условие $\hbar/\gamma > \tau_p$ эквивалентно неравенству $N/\gamma > \rho_b$, где ρ_b — плотность состояний в зоне, а N/γ имеет смысл плотности примесных состояний [7]. Ясно, что при этом становится существенным пребывание частиц на резонансных примесях.

Определим плотность носителей, находящихся на центрах, если рассеивающиеся частицы описываются функцией распределения f . Такая задача должна решаться квантовомеханически, но при малой плотности примесей в ней можно ограничиться одноцентровым приближением. К тому же при $f \ll 1$ мы можем не учитывать взаимодействие между носителями на центре и решать одноэлектронную задачу. Для простоты мы будем считать, что резонанс имеет место в s -канале и центр устроен так, что вероятность рассеяния на нем не зависит от спина.

Для расчета удобно использовать формализм вигнеровского времени задержки [9, 10]. В соответствии с результатами [9] волновой пакет при рассеянии на потенциале задерживается по отношению к свободно движущемуся пакету. Задержка имеет определенное значение лишь для пакета, составленного из собственных функций задачи рассеяния, в представлении на которых S -матрица диагональна. Для такого пакета величина задержки равна $t_l = 2 d\delta_l(\varepsilon)/d\varepsilon$, где δ_l — фаза рассеяния парциальной волны с моментом l ; ε — энергия рассеивающихся частиц. Если резонанс в s -канале, то

$$\delta_s(\varepsilon) = \text{const} - \arctg \{ \gamma / [2(\varepsilon - \varepsilon_0)] \} \quad [11],$$

где ε_0 — энергия резонанса, и соответственно

$$t_0 = \hbar\gamma / [(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \gamma^2/4] \sim \hbar/\gamma. \quad (2)$$

Для остальных нерезонансных парциальных волн задержка имеет порядок величины времени пролета частицей области действия потенциала центра, так что $t_l \ll t_0$, $l=1, 2, 3, \dots$. В результате оставания рассеявшегося пакета от свободного на центре образуется избыточная плотность частиц φ (рис. 1). Если амплитуда сходящейся волны e^{-ikr} в s -пакете есть A , то

$$\varphi = 4\pi \int_0^R dr |\psi|^2 = 4\pi A^2 v t_0,$$

где v — скорость частиц, R — радиус центра, ψ — волновая функция пакета. Результат не зависит от длины импульса, так что ее можно устремить к бесконечности. Это означает, что полученное выражение справедливо и в интересующем нас стационарном случае.

Поскольку плотность пропорциональна t , основной вклад в нее дает резонансная волна, а вкладом прочих можно пренебречь. Коэффициент A находится из разложения рассеивающейся плоской волны по сферическим гармоникам [11], $A = i/2k$. Таким образом, средняя плотность частиц на центре за счет резонансного рассеяния носителей, находящихся в состоянии с волновым вектором k , есть $\varphi = \pi v t / k^2$. Чтобы получить суммарную плотность частиц, создаваемую на центре всеми рассеивающимися электронами с различными энергиями, φ должна быть проинтегрирована по всем k с функцией распределения $f(k)$, учитывающей заполнение состояний

$$\Phi(\varepsilon_0) = \int \frac{2dk}{(2\pi)^3} \varphi f = \frac{1}{\pi} \int dk v t f = \frac{1}{\pi} \int d\varepsilon \frac{\gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \gamma^2/4} f(\varepsilon), \quad (3)$$

$f(\varepsilon)$ — изотропная часть функции распределения. Поскольку резонанс образуется из состояний непрерывного спектра, принадлежащих энергетическому интервалу шириной $\sim \gamma$, его заполнение Φ определяется ин-

тегралом по этим состояниям. Используя полученный результат, мы можем выписать уравнение электронейтральности в виде

$$2 \int d\varepsilon \rho_b(\varepsilon) f(\varepsilon) + \int d\varepsilon_0 \rho_I(\varepsilon_0) \Phi(\varepsilon_0) = n_0, \quad (4a)$$

где ρ_b — плотность состояний в зоне (для частиц с одним направлением спина), n_0 — концентрация несобственных электронов. Используя (4) для нормировки f , мы можем теперь полностью определить ее из системы (1), (3) и (4).

Интересно проследить за поведением заполнения центров при уменьшении ширины резонанса. Нетрудно убедиться, что при $\gamma \ll T$ — температуры электронов (4a) упрощается

$$2 \int d\varepsilon \rho_b(\varepsilon) f(\varepsilon) + 2 \int d\varepsilon_0 \rho_I(\varepsilon_0) f(\varepsilon_0) = n_0, \quad (4б)$$

поскольку в этом пределе $\Phi \approx 2f$. Это означает, что Φ совпадает с асимптотической функции заполнения f_d локализованных донорных состояний, вырожденных по спину

$$f_d(\varepsilon_0) = \{1 + 2 \exp[(\varepsilon_0 - \mu)/T]\}^{-1} \approx 2 \exp[(\mu - \varepsilon_0)/T] = 2f(\varepsilon_0).$$

Это не случайно, поскольку тот резонансный центр, который мы рассматривали, с не зависящей от спина вероятностью рассеяния подобен обыч-

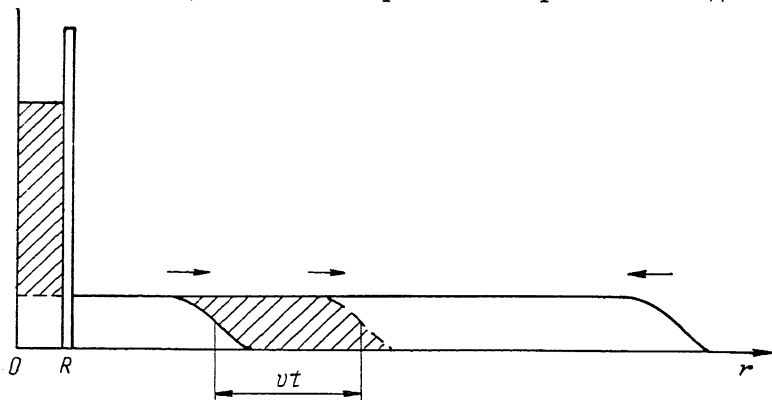


Рис. 1. Рассеяние волнового пакета, составленного из S -волн, на резонансном центре, изображенном условно в виде сферического потенциального барьера радиуса R .

Сплошной линией показана величина $|\psi|^2$ в пакете, рассеивающемся на центре. Передний фронт этого импульса отстает на расстояние vt от фронта свободно движущегося пакета ($|\psi|^2$ в котором изображен штриховой линией). Соответственно возросла амплитуда волновой функции ψ на центре: площади заштрихованных участков совпадают.

ному донору, у которого энергия основного нейтрального состояния не зависит от направления спина внешнего электрона.

Таким образом, в пределе $\gamma \ll T$ квазилокальные состояния несут тот же заряд, что и локализованные. Для узкого резонанса это кажется вполне естественным. Соответственно уравнение электронейтральности (4б) по форме такое же, как в полупроводнике с локализованными состояниями. Однако между этими двумя случаями имеется и заметная разница. Действительно, для локализованных уровней уравнение типа (4б) справедливо только в термодинамическом равновесии, так как иначе заполнение зоны и примеси может существенно различаться. Для резонансных же центров (4б) сохраняет силу и в неравновесных условиях, поскольку это уравнение следует для них из чисто квантовомеханических соображений. Разумеется, сходство двух случаев пропадает при увеличении ширины резонанса (см. (3) и (4a)). Кроме того, сама физическая картина, приводящая к уравнению (4), совершенно отличается от обычных представлений о захвате носителей на примеси с последующим их выбросом. Действительно, допустим, что мы формально представили себе, что

носителю с энергией ϵ упруго захватывается на центр, причем сечение захвата равно сечению резонансного рассеяния при данной энергии, и что потом он так же упруго выбрасывается через какое-то время τ . Тогда из условия равенства получающейся таким путем стационарной заселенности центра найденной выше величине $f(\epsilon) \varphi(\epsilon)$ легко определить формально введенное время выброса τ . Оказывается, что оно должно быть одинаково для всех состояний, образующих резонанс, вне зависимости от их энергии: $\tau = \text{const} = \hbar/\gamma$. В действительности же время, которое частица проводит на центре, совпадает с $t_0(\epsilon)$ [5] и резко зависит от энергии (см. (2)). Таким образом, представления о захвате и выбросе частиц на центр и обратно не позволяют адекватно описать когерентный процесс резонансного рассеяния.

Кроме предположения $kl \gg 1$ и стационарности, наиболее существенным ограничением представленного подхода является требование $f \ll 1$ при $\epsilon \sim \epsilon_0$. Оно позволило нам считать, что все центры свободны и могут резонансно рассеивать носители. При увеличении f средняя заселенность

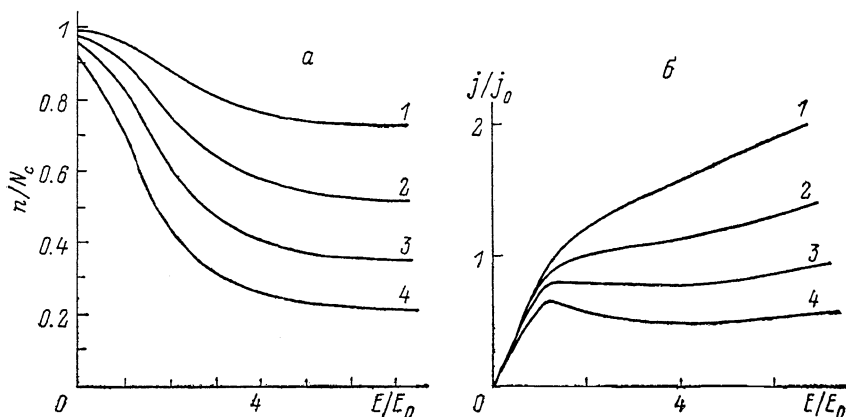


Рис. 2. Полевые зависимости концентрации зонных электронов при рассеянии на резонансных центрах и акустических фононах (а) и ВАХ системы (б).

$n_0 = N_0$, $\epsilon_1 = 8T_0$, $\Gamma = T_0$, $\gamma = \hbar\nu_0 = 0.1 T_0$, $q = 1/2$, $r = 3/2$ (а), $j_0 = [4/(3\sqrt{\pi})] e^2 N_c E_0 (m\nu_0)$ (б). Кривым соответствует различная плотность резонансных центров N : 1 — $10N_c$, 2 — $25N_c$, 3 — $50N_c$, 4 — $100N_c$.

примеси возрастает и встает вопрос о взаимодействии налетающего на центр электрона с другим, который раньше оказался на том же самом центре в процессе своего резонансного рассеяния. Электрон-электронное взаимодействие на примеси не может быть учтено просто введением в кинетическое уравнение обычного множителя $[1 - f_d(\epsilon_0)]$, учитывающего заполнения примеси электронами, как это предлагалось в [12]. Во-первых, резонанс имеет конечную ширину, так что образующие его состояния непрерывного спектра могут при низких температурах $T \sim \gamma$ быть заселены существенно по-разному (см. (3)). Во-вторых, находящийся на центре в процессе рассеяния электрон не только препятствует резонансному рассеянию другого носителя, что могло бы быть учтено фермиевским множителем, но и сам он может быть выбит с центра этой налетающей частицей, которая тем самым влияет на процесс резонансного рассеяния уже находившегося на центре электрона. Это обстоятельство чисто статистически учтено быть не может. Что же касается последовательного рассмотрения резонансного рассеяния заряженных частиц в условиях не малой заселенности центров, требующего учета межчастичного взаимодействия, то в общем виде его вряд ли можно произвести, так как у примесей разной природы это взаимодействие может иметь различную силу и характер (отталкивание или эффективное притяжение).

Для иллюстрации явлений, которые могут возникать в описываемой системе, рассмотрим с помощью развитого формализма транспорт горячих электронов в полупроводнике с резонансными примесями, энергия квази-

локальных состояний на которых ε_0 существенно больше, чем энергия носителей в равновесии, $\varepsilon_0 \gg T_0, \varepsilon_F$. На омическом переносе наличие примесей в таких условиях не отражается. Когда электроны разогреваются электрическим полем до энергии $\sim \varepsilon_0$, они начинают испытывать резонансное рассеяние и некоторая их концентрация переходит из зоны на центры. Это явление аналогично захвату горячих электронов на отрицательно заряженные примеси [13], который приводит к эффекту Ганна. Очевидно, этого эффекта можно ожидать и в рассматриваемой системе.

Мы используем для расчета стандартную параболическую и изотропную зонную модель и приближение эффективной температуры, а механизмы нерезонансного рассеяния электронов возьмем квазиупругими, так что им соответствуют частота релаксации импульса $\nu(\varepsilon) = \nu_0 (\varepsilon/T_0)^2$ и ча-

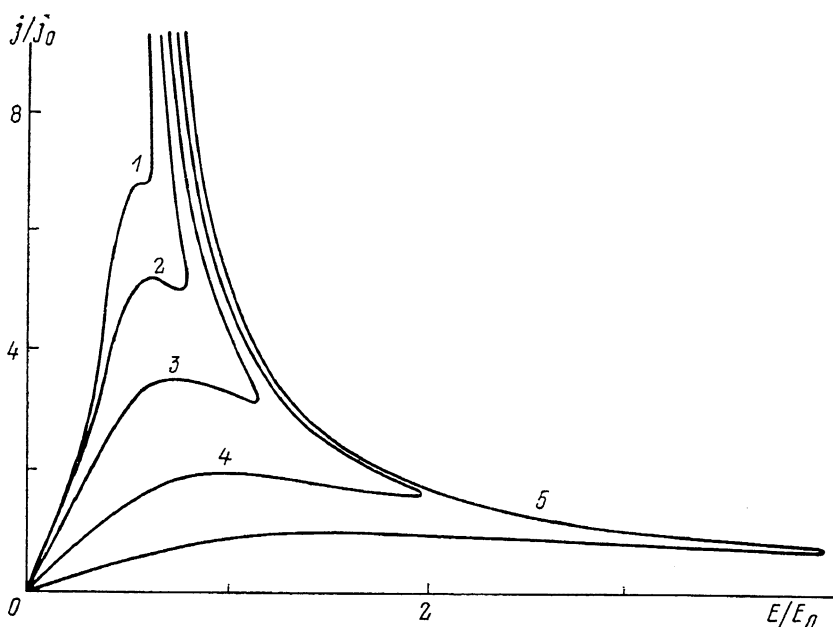


Рис. 3. ВАХ в случае, когда импульс носителей релаксирует за счет столкновений с резонансными центрами и ионизированными примесями, а их энергия — за счет ДА-рассеяния.

$n_0 = N_c, \varepsilon_1 = 15T_0, \Gamma = 3T_0, \gamma = 0.3T_0, \hbar \nu_0 = 0.03T_0, N = 300N_c, q = -3/2, r = 3/2, j_0 = [4/(3\sqrt{\pi})]e^2 N_0 E_0 / (m \nu_0)$. Цифра у кривой — величина Γ в единицах T_0 .

стота энергетической релаксации $\nu^-(\varepsilon) = \nu_0^- (\varepsilon/T_0)^{r-1}$. Здесь T_0 — температура решетки, а выражение для ν_0 и ν_0^- и показателей степеней для различных механизмов рассеяния приведены, например, в [14]. Относительно резонансных состояний мы предположим, что их энергии ε_0 распределены по Гауссу в полосе шириной Γ вокруг средней энергии ε_I . Мы будем считать, что ширины резонансных состояний $\gamma \ll \Gamma, \varepsilon_I$.

При бoльцмановском распределении носителей уравнение электро-нейтральности (4) легко приводится к виду

$$(T/T_0)^{3/2} \exp(\mu/T) + 2(N/N_c) \exp[(\mu - \varepsilon_I)/T + (\Gamma/2T)^2] = n_0/N_c, \quad (5)$$

где T, μ — температура и химический потенциал электронов; $N_c = (2\pi m T_0)^{3/2} / (4\pi^3 \hbar^3)$; m — эффективная масса.

Сечение резонансного рассеяния на отдельном центре с энергией квазилокального состояния ε_0 возьмем в стандартной форме [11]

$$\sigma(\varepsilon, \varepsilon_0) = \frac{\pi}{k^2} \frac{\gamma^2}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \gamma^2/4}.$$

Используя это выражение и принимая во внимание также нерезонансное рассеяние, легко обычным образом [14] получить уравнение баланса энергии

$$\int d\varepsilon \left[\frac{E^2 (\varepsilon/T_0)^{3/2}}{(\varepsilon/T_0)^2 + (N/N_c) (\gamma/\Gamma) (T_0/\hbar\nu_0) (T_0/\varepsilon)^{1/2} \exp\{ -[(\varepsilon - \varepsilon_I)/\Gamma]^2 \}} - [(T/T_0) - 1] (\varepsilon/T_0)^{r+1/2} \right] = 0, \quad (6)$$

где первый член — джоулево тепло, а второй — поток энергии от носителей в решетку за счет процессов энергетической релаксации электронов. В (6) электрическое поле E измеряется в единицах $E_0 = [3m \nu_0 \nu_0^- T_0 / (2e^2)]^{1/2}$. Система уравнений (5), (6) позволяет определить T и μ как функции E , а следовательно, и полевые зависимости всех прочих характеристик электронной системы.

Условие $kl \gg 1$, при котором применим этот подход, накладывает ограничение на степень легирования образца резонансными примесями $(N/N_c) \ll (\Gamma/\gamma) (\varepsilon_I/T_0)^{1/2}$, которое при $\Gamma \gg \gamma$ и $\varepsilon_I \gg T_0$ не является слишком жестким.

На рис. 2 представлены результаты численного решения уравнений (5), (6) для случая, когда нерезонансное рассеяние происходит на акустических фононах. Видно, что при достаточно большой плотности резонансных примесей концентрация электронов в зоне резко падает с ростом электрического поля (рис. 2, а) за счет перехода носителей на примеси. Соответственно вольт-амперные характеристики (ВАХ) приобретают N-образную форму (рис. 2, б).

Если же нерезонансный механизм релаксации импульса электронов — рассеяние на заряженных примесях, то возникают NS-образные характеристики (рис. 3). N-образная часть связана с уменьшением концентрации зонных электронов, а S-образная — с увеличением их подвижности при $\varepsilon > \varepsilon_I$ за счет уменьшения сечения резонансного рассеяния, что приводит к неустойчивости перегретого типа. Таким образом, форма ВАХ в этом случае отражает обе стороны влияния резонансного рассеяния на электронный транспорт.

Автор благодарит С. Д. Бенеславского, М. И. Каганова и А. Г. Миронова за неоднократное обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Кайданов В. И., Равич Ю. И. // УФН. 1985. Т. 145. № 1. С. 51—86.
- [2] Иванов-Омский В. И., Константинова Н. Н., Смекалова К. П. // ФТП. 1976. Т. 10. № 2. С. 381—383.
- [3] Fisher M. A., Adams A. R., O'Reilly E. P., Harris J. J. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 20. P. 2341—2344.
- [4] Ансельм А. И. // ЖЭТФ. 1953. Т. 24. № 1. С. 83—89.
- [5] Базь А. И. // ЯФ. 1967. Т. 5. № 1. С. 229—232.
- [6] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М., 1979. § 3, 16. 528 с.
- [7] Бенеславский С. Д., Дмитриев А. В., Салимов Н. С. // ЖЭТФ. 1987. Т. 92. № 1. С. 305—310.
- [8] Райх М. Э., Эфрос А. Л. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 5. С. 1307—1316; № 1. С. 208—217.
- [9] Wigner E. P. // Phys. Rev. 1955. V. 98. N 1. P. 145—147.
- [10] Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. М., 1967. Гл. 8. § 5. 824 с.
- [11] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1984. § 34, 134. 752 с.
- [12] Кулеев И. Г., Харус Г. И. // ФТП. 1987. Т. 21. № 11. С. 2002—2005.
- [13] Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Миронов А. Г. Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках. М., 1972.
- [14] Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г. Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М., 1975. Гл. 1. § 2. 400 с.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
24 апреля 1989 г.
В окончательной редакции
20 июля 1990 г.