1990 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 24, N 10

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ В УСЛОВИЯХ РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА

Тарасенко А. А., Чумак А. А.

Получены общие выражения для линейной и квадратичной по магнитному полю добавок к тензору электропроводности $\hat{\sigma}$. Предложенный метод позволяет вычислить эти добавки даже в случае сильного взаимодействия электронов с примесями (например, при резонансном рассеянии электронов акцепторами в бесщелевом полупроводнике), если известна одночастичная функция Грина. Анализ полученной недиагональной компоненты тензора высокочастотной проводимости показывает, что эффективность резонансного рассеяния вырожденных электронов уменьшается с ростом частоты.

Наличие в бесщелевом полупроводнике резонансных акцепторных примесей существенно сказывается на кинетике электронов зоны проводимости [1]. Чем ближе энергия электрона к значению энергии акцепторного уровня ε_A, тем сильнее взаимодействуют электрон и акцепторная примесь. Это приводит к резонансной зависимости частоты примесного рассеяния от энергии. Если частота столкновений достаточно большая (длина свободного пробега сравнима с де-бройлевской длиной волны электронов или меньше ее), то для расчета кинетических коэффициентов нельзя использовать классическое кинетическое уравнение Больцмана (см. [2]). Эффективность резонансного рассеяния зависит от следующих параметров: температуры носителей (T), ширины уровня (Γ), концентрации акцепторов (N_A), частоты исследуемого процесса (ω). Далее мы покажем, что при достаточно больших значениях N_A и ω классическое описание столкновений на основе τ-приближения [3] неприменимо даже для качественного анализа. Будут найдены области параметров, где необходим квантовый подход, который, в частности, использовался нами ранее при решении задачи о флуктуациях населенности акцепторных уровней [4].

Расчет электропроводности

Вычислим ток свободных электронов кристалла, на которые действуют взаимно перпендикулярные электрическое (**E**) и магнитное (**H**) поля, считая их независимыми малыми параметрами. Ограничимся линейными по **E** членами и членами до второго порядка по **H** включительно. Будем исходить из следующего выражения для тока:

$$\mathbf{j} = e \sum_{\alpha\alpha'} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha\alpha'} f_{\alpha\alpha'}, \tag{1}$$

где $\dot{\mathbf{r}}$ — оператор скорости электрона, $f_{\alpha\alpha'} = \langle a^+_\alpha a_{\alpha'} \rangle$, a^+_α, a_α — операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии $|\alpha\rangle$, причем $|\alpha\rangle$ — волновая функция электрона, движущегося в поле примесей.

Положим для определенности $\mathbf{E} \parallel \mathbf{X}$, $\mathbf{H} \parallel Z$ $\Big(\mathbf{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$, $\mathbf{A} = \frac{H}{2}\{-y,\ x,\ 0\}$, поля **E** и **H** не зависят от времени$\Big)$. Тогда легко получим следующее уравнение для $f_{\alpha\alpha'}$:

$$f_{\alpha\alpha'}=\frac{e}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}\sum_{\alpha_1}\left[f_{\alpha_1\alpha'}\left(Ex+\frac{H}{2c}\hat{L}\right)_{\alpha_1\alpha}-f_{\alpha\alpha_1}\left(Ex+\frac{H}{2c}\hat{L}\right)_{\alpha'\alpha_1}\right], \tag{2}$$

где ε_α — энергия электрона в состоянии $|\alpha\rangle$, $\eta\to+0$, $\hat{L}=x\dot{y}-y\dot{x}$. Явный вид оператора $\hat{L}$, а следовательно, и правой части (2) зависит от калибровки векторного потенциала $\mathbf{A}$. Однако выбор калибровки не влияет на ток $\mathbf{j}$, поскольку изменение $\hat{L}$ при переходе к иной калибровке компенсируется изменением явного вида оператора $\dot{\mathbf{r}}$.

Решая (2) итерациями, легко получим

$$f^1_{\alpha\alpha'}=\frac{e\,(f_{\alpha'}-f_\alpha)}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}\left(Ex+\frac{H}{2c}\hat{L}\right)_{\alpha'\alpha}, \tag{3}$$

$$f^2_{\alpha\alpha'}=\frac{e^2H}{2c}\frac{1}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}\sum_{\alpha_1}\Big[E\,(x_{\alpha_1\alpha}\hat{L}_{\alpha'\alpha_1})^s+$$
$$+\frac{H}{2c}\hat{L}_{\alpha_1\alpha}\hat{L}_{\alpha'\alpha_1}\Big]\left(\frac{f_\alpha-f_{\alpha_1}}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}-\frac{f_{\alpha_1}-f_{\alpha'}}{\varepsilon_{\alpha_1}-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}\right), \tag{4}$$

$$f^3_{\alpha\alpha'}=\frac{e^3}{4c^2}\frac{EH^2}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}\sum_{\alpha_1\alpha_2}(x_{\alpha'\alpha_2}\hat{L}_{\alpha_1\alpha}\hat{L}_{\alpha_2\alpha_1})^s\times$$
$$\times\left\{\frac{1}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_{\alpha_2}+i\eta}\left[\frac{f_{\alpha_1}-f_\alpha}{\varepsilon_\alpha-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}-\frac{f_{\alpha_2}-f_{\alpha_1}}{\varepsilon_{\alpha_1}-\varepsilon_{\alpha_2}+i\eta}\right]-\frac{1}{\varepsilon_{\alpha_1}-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}\times\right.$$
$$\left.\times\left[\frac{f_{\alpha_2}-f_{\alpha_1}}{\varepsilon_{\alpha_1}-\varepsilon_{\alpha_2}+i\eta}-\frac{f_{\alpha'}-f_{\alpha_2}}{\varepsilon_{\alpha_2}-\varepsilon_{\alpha'}+i\eta}\right]\right\}, \tag{5}$$

где f_α — число электронов в состоянии α в отсутствие полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$: $f_\alpha=\langle a^+_\alpha a_\alpha\rangle$. Запись $(\ldots)^s$ означает симметризованную сумму, например

$$(x_{\alpha'\alpha_2}\hat{L}_{\alpha_1\alpha}\hat{L}_{\alpha_2\alpha_1})^s=x_{\alpha'\alpha_2}\hat{L}_{\alpha_1\alpha}\hat{L}_{\alpha_2\alpha_1}+\hat{L}_{\alpha'\alpha_2}\hat{L}_{\alpha_1\alpha}x_{\alpha_2\alpha_1}+\hat{L}_{\alpha'\alpha_2}x_{\alpha_1\alpha}\hat{L}_{\alpha_2\alpha_1}.$$

Подставляя (3) в (1) и используя тождество

$$x_{\alpha\alpha'}=-i\hbar\dot{x}_{\alpha\alpha'}/(\varepsilon_\alpha-\varepsilon_{\alpha'}),$$

получим известное [5] выражение для проводимости вдоль поля $\mathbf{E}$

$$\sigma_{xx}=-\frac{\pi\hbar e^2}{V}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\frac{df_\varepsilon}{d\varepsilon}\,\mathrm{sp}\,[\dot{x}\delta(\varepsilon-\mathscr{H})\,\dot{x}\delta(\varepsilon-\mathscr{H})] \tag{6}$$

(V — объем кристалла, $\mathscr{H}$ — гамильтониан электрона в поле примесей), которое является одной из разновидностей формулы Кубо. При получении (6) учтен тот факт, что в равновесии функция f_α зависит только от энергии ε_α.

Функции $f^2_{\alpha\alpha'}$ и $f^3_{\alpha\alpha'}$ определяют холловский ток и квадратичное магнитосопротивление. Учитывая уже упоминавшуюся добавку к оператору скорости $\dot{\mathbf{r}}$, связанную с магнитным полем и равную $-(e/mc)\,\mathbf{A}$, после некоторых преобразований получим

$$\sigma_{yx}=-\frac{i\hbar e^3H}{2\pi cV}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\frac{df_\varepsilon}{d\varepsilon}\,\mathrm{sp}\,[\dot{y}G^\varepsilon\,(\hat{L}G^\varepsilon\dot{x}-\dot{x}G^\varepsilon\hat{L})\,G^\varepsilon], \tag{7}$$

где $G^\varepsilon=\pi\delta\,(\varepsilon-\mathscr{H})$, G^ε — мнимая часть одноэлектронной функции Грина.

Заметим, что формула (7) может быть исходной для расчета эффекта Холла в различных системах, в том числе в неупорядоченных.[1] Мы же для решения поставленной задачи примем, что размеры кристалла настолько большие, что σ_{yx} не зависит от конкретной реализации хаотического расположения примесей. Тогда правую часть (7) без потери точности можно усреднить по конфигурации

[1] Последняя задача до сих пор не решена [5].

примесей. Расчет существенно упростится, если заменить в (7) среднее значение произведения операторов на произведение средних:

$$\overline{G^\varepsilon \dot{y} G^\varepsilon (\hat{L} G^\varepsilon \dot{x} - \dot{x} G^\varepsilon \hat{L})} \approx \dot{y} \overline{G^\varepsilon} (\hat{L} \overline{G^\varepsilon} \dot{x} - \dot{x} \overline{G^\varepsilon} \hat{L}) \overline{G^\varepsilon}.$$

Такое приближение оправдано в случае, когда волновые функции электронов, захваченных примесями, почти не перекрываются. Тогда для решения поставленной задачи достаточно знать среднее значение функции Грина $\overline{G^\varepsilon}$. Будем вычислять sp $\{\ldots\}$ на базисе волновых функций зонных электронов. Мы считаем, что энергия Ферми находится в зоне проводимости, а также пренебрегаем прыжковой проводимостью по акцепторам, следовательно, вклад в ток дадут лишь те матричные элементы, которые вычислены на состояниях электронов зоны проводимости. В этом случае применима простая аппроксимация [6] $\overline{G^\varepsilon}$, которая с учетом пространственной однородности имеет вид

$$\overline{G^\varepsilon_{\mathbf{pp}'}} \equiv \delta_{\mathbf{p},\,\mathbf{p}'} \overline{G^\varepsilon_{\mathbf{p}}} \equiv \operatorname{Im} [\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}} - A^2/(\varepsilon - \varepsilon_A - i\Gamma)]^{-1}, \tag{8}$$

где зависимостью энергии от импульса ($\varepsilon_{\mathbf{p}}$) определяется невозмущенный спектр электронов проводимости, $A^2 = N_A \Gamma / \pi g_0 (\varepsilon_A)$, g_0 — невозмущенная плотность состояний. Имеются и более сложные аппроксимации $\overline{G^\varepsilon}$. Случай, когда на длине волны электрона могут находиться два центра захвата, рассмотрен в [7].

В приближении эффективной массы из (7) легко получим

$$\sigma_{yx} = \frac{\hbar^2 e^3 H}{\pi c m^3} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \int d\varepsilon \frac{df_\varepsilon}{d\varepsilon} p_y^2 (\overline{G^\varepsilon_{\mathbf{p}}})^3. \tag{9}$$

Здесь мы учли $[\hat{L}, \dot{x}] = i\hbar \dot{y}/m$.

Обозначим через $i\gamma$ мнимую часть выражения в квадратных скобках (8): $\gamma(\varepsilon) = A^2 \Gamma / [(\varepsilon - \varepsilon_A)^2 + \Gamma^2]$. Тогда в случае $\gamma(\varepsilon_A) \ll \varepsilon_F$ правую часть (9) можно просуммировать по $\mathbf{p}$, в результате чего получим

$$\sigma_{yx} = \frac{\sqrt{2}\, e^3 H}{8\hbar \sqrt{m}\, \pi^2 c} \int d\varepsilon \frac{df_\varepsilon}{d\varepsilon} \varepsilon^{3/2} \gamma^{-2}(\varepsilon). \tag{10}$$

Такое же выражение (с точностью до коэффициента 3/4) получается из обычного кинетического уравнения, если аппроксимировать входящий в него интеграл столкновений резонансной частотой ν_r, равной $\nu_r(\varepsilon) = 2\gamma(\varepsilon)/\hbar$.

Когда неравенство $\gamma(\varepsilon_A) \ll \varepsilon_F$ не выполняется, для нахождения $\hat{\sigma}_{yx}$ необходимо использовать более общее выражение (9) [или же (7)], которое в этом случае не сводится к (10). Поэтому можно считать, что вышеупомянутое неравенство определяет область применимости аппроксимации резонансного рассеяния с помощью эффективной частоты $2\gamma(\varepsilon)/\hbar$.

Вычислим изменение проводимости σ_{xx} под влиянием магнитного поля. Для этого необходимо подставить (5) в x-ю компоненту тока (1). В результате получим

$$\delta\sigma_{xx} = -\frac{\hbar e^4 H^2}{4\pi c^2 V} \int d\varepsilon \frac{df_\varepsilon}{d\varepsilon} \operatorname{sp} [G^\varepsilon (\hat{L} G^\varepsilon \dot{x} - \dot{x} G^\varepsilon \hat{L})]^2. \tag{11}$$

Итерациями по $\mathbf{H}$ можно вычислять и следующие поправки к тензору $\hat{\sigma}$. Предложенный метод имеет преимущество по сравнению с методом, использовавшимся в теории подвижности поляронов малого радиуса и при исследовании неупорядоченных систем [2, 8] справедливым лишь в линейном по $\mathbf{H}$ приближении.

В тех же приближениях, что и (9), формула (11) принимает вид

$$\delta\sigma_{xx} = \frac{\hbar^3 e^4 H^2}{2\pi m^4 c^2 V} \sum_{\mathbf{p}} \int d\varepsilon \frac{df_\varepsilon}{d\varepsilon} p_x^2 (\overline{G^\varepsilon_{\mathbf{p}}})^4. \tag{12}$$

Нетрудно убедиться в том, что выражение (12), как и следовало ожидать, по порядку величины равно $\sigma_{xx}(H=0)\,[\hbar\omega_{\text{ц}}/\gamma(\varepsilon_F)]^2$, где $\omega_{\text{ц}} = eH/mc$. Отсюда, а также из аналогичной оценки (9) следует, что формальное разложение тензора проводимости по $\mathbf{H}$ соответствует разложению по физическому параметру

$\hbar\omega_{\text{ц}}/\gamma$, причем величина γ в отличие от случая слабого взаимодействия может быть сравнима с ε_F.

Рассмотрим теперь случай переменного электрического поля ($\mathbf{E} \sim e^{i\omega t}$). Так же, как и раньше, получим следующее выражение для $\operatorname{Re}\sigma_{yx}(\omega)=\sigma'_{yx}(\omega)$:

$$\sigma'_{yx} = -\frac{i\hbar e^3 H}{2\pi c V}\left\{\int d\varepsilon \frac{f_\varepsilon - f_{\varepsilon-\hbar\omega}}{\hbar\omega} \operatorname{sp}\left[\dot{x}G^\varepsilon \dot{y}\hat{L}^{\varepsilon-\hbar\omega} - G^\varepsilon \dot{x}\hat{L}^{\varepsilon-\hbar\omega}\dot{y} + \dot{x}G^{\varepsilon-\hbar\omega}\dot{y}\hat{L}^\varepsilon - G^{\varepsilon-\hbar\omega}\dot{x}\hat{L}^\varepsilon \dot{y}\right] + \right.$$

$$\left. + \frac{2}{\pi^2}\int \frac{d\varepsilon d\varepsilon' d\varepsilon_1 (f_\varepsilon - f_{\varepsilon'})}{(\varepsilon' - \varepsilon_1)\left[(\varepsilon-\varepsilon')^2 - \omega^2\right]} \operatorname{sp}\left[(\dot{x}G^{\varepsilon_1}\hat{L} - \hat{L}G^{\varepsilon_1}\dot{x})(G^\varepsilon \dot{y}G^{\varepsilon'} + G^{\varepsilon'}\dot{y}G^\varepsilon) - (\dot{x}\leftrightarrow\dot{y})\right]\right\}, \quad (13)$$

где $\hat{L}^\varepsilon = G^\varepsilon \hat{L} G^\varepsilon$.

Легко видеть, что второе слагаемое в фигурных скобках равно нулю при $\omega=0$. Кроме того, им можно пренебречь, если $(\gamma/\varepsilon_F) \ll 1$. Оставшаяся часть σ'_{yx} в тех же приближениях, что и раньше, может быть записана в виде, похожем на (9):

$$\sigma'_{yx}(\omega) = \frac{\hbar^2 e^3 H}{2\pi c m^3}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}}\int d\varepsilon \frac{f_\varepsilon - f_{\varepsilon-\hbar\omega}}{\hbar\omega} p_y^2 \overline{G^\varepsilon_{\mathbf{p}}}\,\overline{G^{\varepsilon-\hbar\omega}_{\mathbf{p}}}\left(\overline{G^\varepsilon_{\mathbf{p}}} + \overline{G^{\varepsilon-\hbar\omega}_{\mathbf{p}}}\right). \quad (14)$$

Наличие смещения на $\hbar\omega$ в энергетических зависимостях подынтегрального выражения (14) может существенно сказаться на величине σ'_{yx}. Очевидно, что частотная зависимость в (14) может быть существенной при $\hbar\omega \gtrsim T$, Γ. Рассмотрим случай $\varepsilon_F \gg \gamma$. Тогда, суммируя (14) по $\mathbf{p}$, получим следующее выражение:

$$\sigma'_{yx}(\omega) = \frac{\sqrt{2}\, e^3 H}{12\sqrt{m}\, c\pi^2}\int d\varepsilon \frac{f_\varepsilon - f_{\varepsilon-\hbar\omega}}{\hbar^2\omega}\left[\frac{\gamma(\varepsilon)}{\gamma(\varepsilon-\hbar\omega)} + \frac{\gamma(\varepsilon-\hbar\omega)}{\gamma(\varepsilon)}\right]\times$$

$$\times\left\{\hbar^2\omega^2 + \left[\gamma(\varepsilon)+\gamma(\varepsilon-\hbar\omega)\right]^2\left[1 + \frac{4\gamma(\varepsilon)\gamma(\varepsilon-\hbar\omega)}{\gamma^2(\varepsilon)+\gamma^2(\varepsilon-\hbar\omega)}\right]\right\}\times$$

$$\times\left[\hbar^2\omega^2 + (\gamma(\varepsilon)+\gamma(\varepsilon-\hbar\omega))^2\right]^{-2}\varepsilon^{3/2}. \quad (15)$$

При $\hbar\omega \ll \gamma$ подынтегральное выражение в правой части (15) равно

$$\int d\varepsilon \frac{f_\varepsilon - f_{\varepsilon-\hbar\omega}}{\hbar^2\omega}\left[\frac{1}{\gamma(\varepsilon)\gamma(\varepsilon-\hbar\omega)} + \frac{2}{(\gamma(\varepsilon)+\gamma(\varepsilon-\hbar\omega))^2}\right]. \quad (16)$$

Если при этом $\hbar\omega \gg \Gamma$, то основной вклад в интеграл внесет область вне резонанса, где более существенно затухание за счет обычных столкновительных механизмов, которыми мы пока пренебрегали. Их качественный учет возможен путем замены $\gamma(\varepsilon)$ на $\gamma(\varepsilon)+\hbar/2\nu(\varepsilon)$. Тогда выражение (16) равно $-6\hbar^{-2}\nu^{-2}(\varepsilon_F)$ и резонансное рассеяние не влияет на σ'_{yx}, хотя резонансный уровень и находится близко к ε_F. Таким образом, σ'_{yx} отличается от своего статического значения в $[2\gamma(\varepsilon_F)/\hbar\nu(\varepsilon_F)]^2$ раз.[2] Физическая причина этого явления заключается в том, что в высокочастотном случае эффективный вклад в электропроводность дают электроны в слое вблизи ε_F толщиной $\hbar\omega$, а не T, как в статическом случае. Если при этом $\hbar\omega \gg \Gamma$, то бóльшая часть таких электронов находится за пределами резонанса. Для наблюдения зависимости $\sigma'_{yx}(\omega)$ при изменении $\hbar\omega$ от нуля до нескольких единиц Γ необходимы исследования при низких температурах ($T \lesssim \Gamma$). Так, например, если резонансный уровень связан с вакансиями Hg в бесщелевом полупроводнике HgTe, то, поскольку $\Gamma/\varepsilon_A \sim (m_e/m_h)^{3/2} \ll 1$ ($m_{e,h}$ — электронная и дырочная массы), требуются температуры $T \lesssim 1$ К.

В заключение отметим, что полученные общие выражения (7), (11), (13) могут быть использованы для корректного учета резонансного рассеяния при расчете электропроводности в магнитном поле в различных конкретных случаях.

---

[2] Указанная особенность не может быть получена на основе кинетического уравнения, в котором релаксационный член равен $\nu(\varepsilon)+2\gamma(\varepsilon)/\hbar$.

Список литературы

[1] Гельмонт Б. Л., Иванов-Омский В. И., Цидильковский И. М. // УФН. 1976. Т. 120. В. 3. С. 337—362.
[2] Поляроны / Под ред. Ю. А. Фирсова. М., 1975. 423 с.
[3] Tsidilkovski I. M., Harus G. I., Shelushinina N. G. // Adv. Phys. 1985. V. 34. N 1. P. 43—174.
[4] Тарасенко А. А., Чумак А. А. // ЖЭТФ. 1987. Т. 92. В. 5. С. 1745—1753.
[5] Займан Дж. Модели беспорядка. М., 1982. 591 с.
[6] Gosar P. // Phys. Semicond. 1978. N 43. Ch. 8. P. 269—272.
[7] Bastard G. // Phys. St. Sol. (b). 1977. V. 80. N 2. P. 641—647.
[8] Fischuk I. I., Rudko V. N. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 89. N 1. P. 61—68.

Институт физики АН УССР
Киев

Получена 20.07.1989
Принята к печати 18.06.1990