

Дипольное рассеяние электронов в компенсированных полупроводниковых квантовых ямах

© С.В. Ганцевич, В.Л. Гуревич, Е.М. Собко*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

* Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: sergei.elur@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 2 апреля 2007 г.)

Теоретически рассматривается рассеяние электронов проводимости системой диполей, образованных близкорасположенными положительно и отрицательно заряженными центрами в квантовой яме.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 06-02-16384), а также Фондом „Династия“.

PACS: 72.10.Fk, 72.15.Lh, 72.20.Dp, 73.63.Hs

Цель настоящей работы состоит в теоретическом изучении рассеяния носителей тока в квантовой яме системой диполей. Такие диполи могут существовать в сильно компенсированных легированных полупроводниках при наличии определенной корреляции в расположении положительных и отрицательных ионов. Таким образом, диполи образуются парами центров, из которых один заряжен положительно, а другой — отрицательно, или же аналогичным образом заряженными парами центр-вакансия (см., например, обзор [1]).

Дипольное рассеяние носителей тока в трехмерном полупроводнике рассматривалось в работе [2] (см. также [3–5]). Авторы предполагали, что размеры диполей определяются минимальным расстоянием порядка постоянной решетки. В [2] были получены оценки подвижности и ее температурная зависимость. В настоящей работе рассмотрим газ носителей тока (электронов) в квантовой яме достаточно малой ширины, так что этот газ можно считать двумерным электронным газом. Двумерные электроны рассеиваются диполями различной длины и произвольной ориентации, хаотически разбросанными в квантовой яме.

Пусть ось z перпендикулярна плоскости ямы. Уравнение Шредингера для электрона в приближении эффективных масс имеет вид

$$\hat{H}\psi \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z) \right] \psi = \epsilon\psi. \quad (1)$$

В дальнейшем нам понадобится только первый уровень поперечного квантования в достаточно узкой яме, с тем чтобы энергия следующего уровня была много больше энергии движения вдоль ямы, которое нас и будет интересовать. В этом случае ни один из высших уровней (минизон) не будет заполнен носителями тока, а форма потенциала для поперечного движения практически не скажется на результатах. Поэтому мы его выберем в

простейшем виде прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

$$V(x, y, z) \equiv V(z) = V[1 - \Theta(z) + \Theta(z - a)],$$

$V \rightarrow \infty$, $\Theta(z)$ — функция единичного скачка Хевисайда, равная единице для положительных значений аргумента и нулю для отрицательных.

Нормированные собственные функции электрона равны

$$\psi_{\mathbf{k},n} = \frac{1}{\sqrt{S}} \sqrt{\frac{2}{a}} e^{i(k_x x + k_y y)} \sin \frac{\pi n}{a} z. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{k} и $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ — двумерные волновой вектор и квазиимпульс электрона в плоскости квантовой ямы, n — номер квантового уровня поперечного (по оси z) квантования, a — ширина ямы. Соответствующие энергии равны

$$\epsilon_n(\mathbf{p}) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (3)$$

Энергетический спектр представляет собой набор параболических минизон, образованных из дискретных уровней поперечного квантования. Мы ограничимся, как сказано выше, случаем, когда заполнена только первая минизона. При ширине ямы $a \simeq 10^{-6}$ см характерная энергия поперечного квантования $\epsilon_1 \simeq \pi^2 \hbar^2 / 2Ma^2$ равна $5 \cdot 10^{-14}$ эрг при поперечной эффективной массе $M \simeq 0.1m_0 \simeq 10^{-28}$ г (m_0 — масса свободного электрона), или 30 meV, что соответствует температуре около 300 К. Газ носителей тока можно считать эффективно двумерным, если средняя кинетическая энергия носителей тока $\bar{\epsilon}$ много меньше этой величины. Для невырожденных электронов, где $\bar{\epsilon} \simeq T$, это есть условие на их температуру

$$\bar{\epsilon} \simeq T \ll \epsilon_1, \quad (4)$$

а в случае вырождения — на их двумерную концентрацию

$$n \equiv \frac{N}{S} = \frac{p_F^2}{2\pi\hbar^2} \ll \frac{m}{M} \frac{\pi^2}{a^2}, \quad (5)$$

$$\epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} \ll \epsilon_1 \simeq \frac{\pi^2\hbar^2}{Ma^2}.$$

Концентрация двумерных носителей, при которой уровень Ферми становится порядка энергии поперечного квантования для $a \sim 10^{-6}$ и $m \sim M \sim 0.1m_0 = 10^{-28}$ г, равна $n_s = 10^{-13}$ см $^{-2}$. Далее будем иметь в виду область меньших температур и концентраций.

Найдем вероятность рассеяния электрона между состояниями с двумерными квазиимпульсами \mathbf{p} и \mathbf{p}' в борновском приближении на потенциале двух противоположно заряженных кулоновских центров, разнесенных на небольшое расстояние \mathbf{d} (именно такой потенциал в дальнейшем будем называть потенциалом диполя)

$$W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p} | V | \mathbf{p}' \rangle|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}'}), \quad (6)$$

где V — потенциал диполя. Диполь характеризуем вектором его центра \mathbf{R} и вектором проекции диполя на плоскость квантовой ямы \mathbf{d} , идущим от минуса (акцептора) к плюсу (донору). Таким образом, матричный элемент от потенциала диполя оказывается суммой матричных элементов кулоновского потенциала. Этот последний, зависящий от положения кулоновского центра $\mathbf{r} = \mathbf{R} \pm \mathbf{d}/2$, равен

$$V_{\mathbf{p}\mathbf{n}, \mathbf{p}'\mathbf{n}'}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{\psi_{\mathbf{p}\mathbf{n}}^*(\mathbf{r}') e^{2i\mathbf{p}'\mathbf{n}'\cdot\mathbf{r}'} \psi_{\mathbf{p}'\mathbf{n}'}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (7)$$

Заметим, что это выражение можно также прочесть как потенциальную энергию заряда e в электростатическом поле, создаваемом распределением зарядов $\rho = e\psi_1^*\psi_2$. Такую аналогию удобно использовать для вычисления матричного элемента и оценки его величины из физических соображений.

Учтем теперь, что квадрат модуля матричного элемента не зависит от положения центра диполя и что энергия поперечного квантования $\pi^2\hbar^2/Ma^2$ считается гораздо больше энергии движения в плоскости $p^2/2m$. Изменение квазиимпульса в плоскости при рассеянии по порядку величины равно ему самому $\hbar q \sim p$ или еще меньшему значению, так что из неравенства

$$q^2 a^2 \ll \frac{m}{M}$$

следует, что, за исключением необычного случая $M \gg m$ (который мы не рассматриваем), характерная величина изменения волнового вектора при рассеянии оказывается много меньше обратной ширины квантовой ямы $qa \ll 1$. В этих условиях при вычислении матричного элемента (7) зависимостью волновых функций от z внутри ямы можно пренебречь; кроме того, следует положить $n = n' = 1$. С учетом изложенного зависящий

от переданного волнового вектора q и координаты z интеграл по координатам x и y в (7) равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx dy \frac{e^{iq_x x + iq_y y}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{2\pi}{q} e^{-qz} \approx \frac{2\pi}{q}. \quad (8)$$

Для диполя рассеяние на составляющих его центрах когерентно, и в вероятности перехода появляется интерференционный член (в (8) мы положили $R = 0$). Для диполя в яме получим выражение

$$|V(q)e^{iq\mathbf{d}/2} + V(q)e^{-iq\mathbf{d}/2}|^2 = 4|V_q|^2 \sin^2(\mathbf{q}\mathbf{d}/2). \quad (9)$$

Здесь d — проекция диполя на плоскость x, y . Таким образом, вероятность перехода $\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}$ при рассеянии на диполе равна

$$W_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{16\pi^2}{q^2} \frac{e^4}{\epsilon_0^2 S^2} \sin^2(\mathbf{q}\mathbf{d}/2) \delta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}'}). \quad (10)$$

В знаменателе этого выражения введен множитель ϵ_0^2 , учитывающий диэлектрическую проницаемость кристаллической решетки. Для учета экранирования потенциала рассеяния (двумерными) свободными носителями следовало бы заменить в (9) и (10) Фурье-компоненту потенциала $V(q)$ на отношение

$$V(q) \rightarrow \frac{V(q)}{\epsilon_q} \sim \frac{V(q)}{1 + \kappa/q}. \quad (11)$$

Обратный дебаевский радиус κ в двумерном случае оказывается отношением коэффициентов диффузии и проводимости. В равновесии вследствие соотношения Эйнштейна он равен $\kappa = 2\pi e^2 \partial n / \partial \xi$ (ξ — химический потенциал). Будем считать концентрацию свободных носителей достаточной малой с тем, чтобы не учитывать экранирование ими потенциала рассеяния на малых длинах порядка длины столкновения $1/q \simeq \lambda_B$. Вклад от малых передач импульса $\hbar q$, т.е. вклад от рассеяния на больших расстояниях от рассеивающего центра, где экранирование свободными носителями играет важную роль для дальнедействующих потенциалов типа кулоновского, в нашем случае оказывается несущественным.

Итак, мы нашли вероятность перехода при рассеянии на одном выделенном диполе. Для расчета вклада в проводимость от рассеяния на всех диполях следует эту вероятность перехода подставить в оператор столкновений уравнения Больцмана двумерного газа в электрическом поле и просуммировать по всем диполям.

Отметим, что, строго говоря, для двумерного газа недостаточно обычного критерия применимости уравнения Больцмана — малости времени столкновения по сравнению со временем свободного пробега

$$(\Delta t)_{\text{coll}} \simeq \frac{\hbar}{\epsilon} \ll \tau_{\text{coll}}.$$

Следует дополнительно потребовать малости корреляции частица-рассеиватель, которая этим уравнением

не учитывается. Корреляционные поправки связаны с повторными столкновениями или, что то же самое, самопересечением траектории частицы. Хотя при движении на плоскости пересечения траекторий, вообще говоря, избежать невозможно, возникающие вследствие этого корреляционные поправки малы по параметру кинетического уравнения и становятся существенными только в определенных случаях. В нашей задаче будем предполагать, что такие корреляционные поправки малы.

Уравнение Больцмана для задачи о проводимости имеет вид

$$\left[e\mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + I_p \right] F_p = 0. \tag{12}$$

Считаем, что электрическое поле \mathbf{E} лежит в плоскости квантовой ямы.

Действие оператора столкновений I_p на функцию от квазиимпульса F_p определяется следующим образом:

$$I_p F_p \equiv \sum_{p'} (W_{p'p} F_p - W_{pp'} F_{p'}). \tag{13}$$

Записывая решение уравнения (13) в символическом виде через обратный оператор столкновений, получим для пропорциональной электрическому полю части функции распределения

$$\Delta F_p = I_p^{-1} e\mathbf{E} \frac{\partial F^{(0)}}{\partial \mathbf{p}}, \tag{14}$$

где $F^{(0)}$ — равновесная функция распределения. Суммируя это выражение со скоростью, найдем омический ток, пропорциональный внешнему полю

$$j_a = -e^2 \sum_p v_a I_p^{-1} \frac{\partial F^{(0)}}{\partial p_\beta} E_\beta \equiv \sigma_{\alpha\beta} E_\beta. \tag{15}$$

Для простоты считаем здесь и далее $S = 1$ и не различаем двумерную концентрацию и число частиц. Индексы α и β — тензорные значки с суммированием по повторяющимся индексам. Для релаксации вносимого полем направленного квазиимпульса достаточно упругих процессов, поэтому в операторе столкновений в формуле (15) можно оставить только их. Поскольку упругое рассеяние энергии не меняет, то, учитывая равенство

$$\frac{\partial F^{(0)}(\epsilon)}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} \frac{\partial F^{(0)}}{\partial \epsilon}, \tag{16}$$

можно представить проводимость (16) в виде

$$\sigma_{\alpha\beta} = \int_0^\infty d\epsilon D_{\alpha\beta}(\epsilon) \frac{\partial F^{(0)}}{\partial \epsilon}, \tag{17}$$

где парциальная проводимость $D_{\alpha\beta}(\epsilon)$ равна

$$D_{\alpha\beta}(\epsilon) = -e^2 \sum_p v_\alpha I_p^{-1} v_\beta \delta(\epsilon - \epsilon_p). \tag{18}$$

Зная $D_{\alpha\beta}(\epsilon)$, можно найти проводимость при любой форме функции распределения по энергиям.

Перейдем к расчету парциальной проводимости (17) для рассеяния на диполях. Для этого найдем в упругом приближении $\mathbf{x}_p = I_p^{-1} \mathbf{v}$, т.е. решим на изоэнергетической поверхности уравнение

$$I_p \mathbf{x}_p \equiv \sum_{(dpl)} \sum_{p'} W_{p'p}^{(dpl)} (\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'}) = \mathbf{v}. \tag{19}$$

Суммирование по всем диполям в (19) эквивалентно усреднению по всем ориентациям диполей и по всем расстояниям между центрами зарядов диполя. Рассмотрим сначала рассеяние на диполях фиксированной длины. Поскольку направление дипольного момента в плоскости ямы никак не выделено, усреднение по ориентациям диполей сводится к интегрированию вероятности перехода (10) по углу φ между дипольным моментом и направлением переданного при столкновении импульса $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ в пределах от 0 до π

$$W_{pp'} = \frac{2\pi}{\hbar} n_d \left[\frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\varphi \sin^2(\cos \varphi q d / 2) \right] \frac{16\pi^3 e^4}{\epsilon_0^2 q^2} \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'}). \tag{20}$$

Здесь n_d — число диполей длины d . Мы видим, что, несмотря на то что рассеяние на одном диполе существенно анизотропно по отношению к передаче импульса, из-за усреднения по направлению дипольного момента рассеяние на системе диполей оказывается изотропным. При этом в уравнении (19) оказывается возможным ввести обратное время релаксации вместо оператора столкновений. Причина в том, что при изотропном рассеянии вклад в релаксацию направленного импульса (решение уравнения (20)) вносит только проекция $p \cos \theta$ приходного импульса \mathbf{p}' на импульс \mathbf{p} наблюдаемого состояния. Вклад от перпендикулярной компоненты приходного импульса $p \sin \theta$ сокращается при суммировании по всем направлениям приходного импульса из-за антисимметрии этой части по углу θ . Таким образом,

$$I_p \mathbf{x}_p \equiv \sum_{p'} W_{pp'} [\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'}] = \frac{\mathbf{x}_p}{\tau_p^{(d)}}, \tag{21}$$

где обратное время релаксации равно

$$\frac{1}{\tau_p^{(d)}} = \int_0^{2\pi} d\theta w(p, \theta) (1 - \cos \theta). \tag{22}$$

Здесь вероятность перехода $W_{pp'} \simeq w(p, \theta)$ записана как функция импульса частицы p (или ее энергии ϵ) и угла рассеяния θ (угла между векторами \mathbf{p} и \mathbf{p}'). Через этот угол выражается и передаваемый при столкновении импульс $\hbar q = 2p \sin \theta / 2$. Для диполей различной длины величину (22) следует усреднить по всем d

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \left\langle \frac{1}{\tau_p^{(d)}} \right\rangle_{(d)}. \tag{23}$$

Угловые скобки здесь обозначают такое усреднение. Подставляя (23) в (22), получим парциальную проводимость в виде

$$D_{\text{эф}}(\epsilon) = -\frac{e^2\epsilon}{\pi\hbar^2m} \tau(\epsilon)\delta_{\text{эф}}, \quad (24)$$

где $\delta_{\text{эф}}$ — символ Кронекера. Определим теперь явный вид зависимости времени релаксации от энергии.

При расчете обратного времени релаксации по формулам (21) и (22) от суммирования по \mathbf{p}' остается интегрирование по углу рассеяния, причем вероятность перехода $w(p, \theta)$ в (22) записывается в виде

$$w(p, \theta) = \frac{2\pi}{\hbar} n_d \left[\frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\varphi \sin^2(\cos\varphi kd \sin(\theta/2)) \right] \times \frac{16\pi^3 e^4}{4p^2 \sin^2(\theta/2) \epsilon_0^2} \left(\frac{m}{4\pi^2} \right). \quad (25)$$

В этом выражении мы не сокращали коэффициенты, чтобы было яснее видно происхождение величин, входящих в него. Окончательно для диполей фиксированного размера d получим

$$\frac{1}{\tau(\epsilon, d)} = n_d \frac{\pi e^4}{\epsilon_0^2 \hbar \epsilon} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\pi d\varphi \sin^2(kd \sin(\theta/2) \cos\varphi) \equiv \nu(\epsilon) f(d) \Phi(kd). \quad (26)$$

Справа в (26) для удобства мы ввели три величины: относительное число диполей с данной длиной $f(d) = n_d/N_d$ ($0 < f \leq 1$), функцию $\Phi(kd)$, описывающую особенности дипольного рассеяния и частоту столкновений ν при $f = 1$, $\Phi = 1$ (N_d — полное число (концентрация) всех диполей). Для $\nu(\epsilon)$ имеем

$$\nu(\epsilon) \equiv 1/\tau(\epsilon) = N_d 2\pi^2 e^4 / \epsilon_0^2 \hbar \epsilon. \quad (27)$$

Эта величина соответствует рассеянию на двух независимых зарядах диполя, поскольку при $\Phi = 1$ интерференционные эффекты отсутствуют, и складываются вероятности рассеяния на центрах диполя, а не амплитуды рассеяния. Заметим, что в формуле (26) зависимость от угла рассеяния θ знаменателя вероятности перехода $w(p, \theta)$ компенсирована такой же зависимостью числителя в формуле для транспортного времени релаксации (22). В результате вклад всех угловых зависимостей при дипольном рассеянии определяется поведением функции $\Phi(\xi)$, где $\xi = kd = 2\pi d/\lambda_B$ — отношение размера диполя и длины волны де Бройля набегающей частицы:

$$\Phi(\xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi d\theta d\varphi \sin^2(\xi \sin\theta \cos\varphi) = 1 - \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\varphi J_0(2\xi \cos\varphi) = 1 - J_0^2(\xi). \quad (28)$$

Именно эта функция описывает специфику дипольного рассеяния. При $\xi \geq 1$ (большие диполи) $\Phi(\xi)$ достаточно хорошо аппроксимируется выражением

$$\Phi(\xi) \simeq 1 - \frac{2}{\pi\xi} \cos^2(\xi - \pi/4), \quad (29)$$

а при $\xi \leq 1$ (малые диполи) — первыми членами разложения

$$\Phi(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{(k+1)} \frac{\xi^{2k}}{k!k!} \frac{(2k-1)!!}{(2k)!!} = \frac{\xi^2}{2} - \frac{3\xi^4}{32} + \dots \quad (30)$$

При $\xi = 1$ значения $\Phi(1)$ по приближенным формулам незначительно отличается от точного $\Phi(1) = 0.41447\dots$: $\Phi \simeq 0.39225\dots$ для асимптотического представления (29) и $\Phi \simeq 0.40625\dots$ для двух членов ряда (30).

Как видно из формул (28) и (29), эффект интерференции при рассеянии на центрах диполя сохраняется, несмотря на усреднение по направлениям. Этот несколько неожиданный эффект представляет собой важное отличие дипольного рассеяния в двумерном случае. Посмотрим теперь, что дает дальнейшее усреднение — по длинам диполей d и по энергиям участвующих в рассеянии частиц. Для малых диполей $\xi \ll 1$ в выражении для частоты столкновений появляется множитель ξ^2 , указывающий на подавление рассеяния из-за взаимной компенсации действия положительного и отрицательного зарядов диполя на малых расстояниях. При этом результат усреднения с таким весом зависит от конкретного вида функции распределения диполей $f(d)$, но, вообще говоря, должен дать только небольшой числовой множитель, не меняя монотонного характера зависимости

$$\frac{1}{\tau_\epsilon} = \nu(\epsilon) \int_0^d f(u) \Phi(ku) du \simeq \nu(\epsilon) \frac{k^2 d_0^2}{2}, \quad (31)$$

где

$$d_0^2 \equiv \int_0^d f(u) u^2 du \approx d^2. \quad (32)$$

Заметим, что максимальная длина диполя d в этих формулах не должна превышать длину свободного пробега.

Вероятность образования диполей длины $d \sim \lambda_B$ при случайном равномерном распределении зарядов в тонком слое толщиной $a \ll \lambda_B$ пропорциональна d . Поэтому функция распределения диполей должна содержать этот фазовый множитель: $f(d) \propto d$. Если пренебречь на интересующих нас масштабах зависимостью $f(d)$ от d из-за других причин, например из-за взаимного притяжения зарядов при образовании диполей, и учесть

только этот множитель, то усреднение можно выполнить точно для диполей любой длины

$$\int_0^d f(u)\Phi(ku)du = 1 - [J_0^2(kd) + J_1^2(kd)] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^{n+1}(kd)^{2n}(2n-1)!!}{n!(n+1)!(2n)!!}. \quad (33)$$

Для малых диполей $kd \equiv \xi \ll 1$ это выражение мало отличается от выражения (30) без усреднения, но при $\xi \gg 1$ из-за наложения максимумов и минимумов двух бесселевых функций в (33) интерференционные эффекты подавляются

$$J_0^2(\xi) + J_1^2(\xi) \simeq (2/\pi\xi) [\cos^2(\xi - \pi/4) + \cos^2(\xi - \pi/2 - \pi/4)] = 2/\pi\xi. \quad (34)$$

Тот же результат получится и при усреднении по длинам диполей в интервале $c < u < d$ (c считаем порядка d):

$$\int_c^d f(u)\Phi(ku)du = 1 - \frac{d^2 [J_0^2(kd) + J_1^2(kd)] - d^2 [J_0^2(kc) + J_1^2(kc)]}{d^2 - c^2}. \quad (35)$$

При $kd \gg 1$ и $kc \gg 1$ получаем

$$\int_c^d f(u)\Phi(ku)du = 1 - \frac{2}{\pi k(d+c)}. \quad (36)$$

Теперь остается подставить полученное выражение для времени релаксации в выражение для парциальной проводимости (24) и проинтегрировать его с производной от функции распределения по формуле (17). В равновесии для статистики Ферми такая производная при достаточно низких температурах близка к дельта-функции, и интегрирование сводится просто к замене в (24) энергии выделенного слоя на энергию Ферми (с переменной знака перед всем выражением)

$$\sigma = -D(\epsilon_F) = \frac{d^2 n_F \tau_F}{m}. \quad (37)$$

Время релаксации τ_F здесь определяется по формулам (26) и (27). При этом, очевидно, интерференционные эффекты для диполей фиксированной длины могут проявиться и в проводимости.

Для случая малых диполей фиксированного размера $\Phi(kd) \simeq (kd)^2/2 \propto \epsilon$, что компенсирует соответствующую зависимость $\nu(\epsilon)$ в (27) от энергии. В результате время релаксации в формуле (37) для проводимости оказывается функцией не импульса Ферми электрона $p_F = \hbar k_F$, а величины $p_d = \hbar/d$ (или соответствующей

энергии $\epsilon_d = p_d^2/2m$): $\tau_F \rightarrow \tau_d = 2\tau(\epsilon_d)$. Это весьма любопытная особенность дипольного рассеяния в двумерном случае. Для малых диполей, распределенных по длинам от нуля до некоторого d , получается ввиду (33) вдвое большее время релаксации $\tau_F \rightarrow \tau_d = 4\tau(\epsilon_d)$.

В случае статистики Больцмана получаем обычную формулу для проводимости

$$\sigma = \frac{e^2 n_B \tau_B}{m},$$

где n_B — двумерная концентрация невырожденных электронов, а τ_B — усредненное по всем энергиям время релаксации, которое зависит от температуры T и длины диполя d (фиксированной или максимальной),

$$\tau_B = \tau(T) \int_0^{\infty} dx e^{-x} x^2 / \Phi(\sqrt{x/x_d}) \equiv \tau(T) K(x_d), \quad (38)$$

где $\tau(T)$ дается формулой (27) при $\epsilon = T$, а $x_d = \epsilon_d/T$. В качестве функции Φ следует брать выражения (28) или (33) и (35) соответственно. Коэффициент $K(x)$ можно переписать несколько иначе, меняя переменную интегрирования

$$K(x) = 2x^3 \int_0^{\infty} \frac{t^5 e^{-xt^2} dx}{\Phi(t)}. \quad (39)$$

Несмотря на внушительный вид формул (38) и (39) для коэффициента $K(x)$, его зависимость от x весьма проста (рис. 1 и 2). Как видно из рисунков, за исключением небольшой области малых x , она близка к линейной. По существу, это случай малых диполей, для которых время релаксации определяется не энергией частицы, а энергией ϵ_d , как и в случае статистики Ферми: $\tau_B = 2\tau(\epsilon_d)$ (d — фиксированная длина) или $\tau_B = 4\tau(\epsilon_d)$ (d — максимальная длина). Малые значения x (десять доли единицы) в $K(x)$ соответствуют большим диполям. В этой области коэффициент $K(x)$ стремится к пределу $k = 2$ и перестает зависеть от x_d , что дает $\tau_B = 2\tau(T)$ безразлично по отношению к дипольным параметрам. Зависимость от температуры существенна только в области больших диполей и в пределе имеет простой вид $\tau \propto T$. Переход между этими случаями (функция $K(x)$, пересчитанная на зависимость от $1/x \equiv T/\epsilon_d$) изображен на рис. 2.

Отметим, что усреднение по энергии частицы в случае статистики Больцмана даже без усреднения по длинам диполей подавляет интерференционные эффекты.

Рассмотрим теперь специальный случай очень маленьких трехмерных диполей. Такие диполи могут образоваться как молекулярные соединения донора и акцептора [6–8]. В данном случае размер диполя может быть меньше толщины ямы; при этом необходимо учесть, что распределение диполей по длинам изначально трехмерное. При фиксированной длине такого диполя его проекция на плоскость может иметь различную величину.

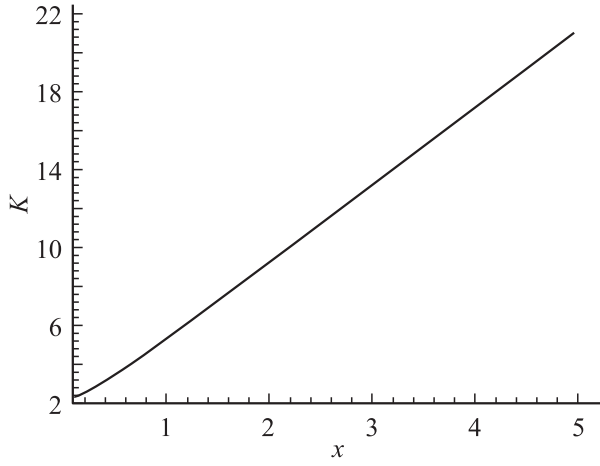


Рис. 1. Время релаксации при рассеянии на диполях для невырожденных электронов.

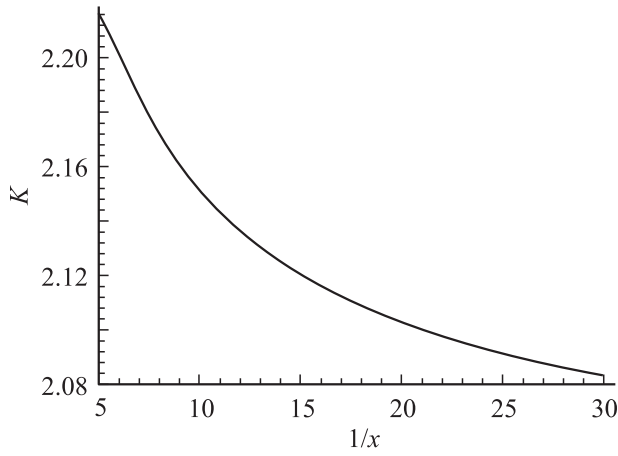


Рис. 2. Зависимость времени релаксации от температуры для больших диполей.

Поскольку именно эта проекция входит в формулы для вероятности перехода в нашем приближении, следует найти распределение для нее. Для трехмерного диполя длины D , лежащего внутри ямы под углом θ к ее плоскости x, y , она равна $d = D \cos \theta$. Проекция диполя на ось z (его „высота“) равна $d_z = D \sin \theta$. Она не должна превышать толщину ямы a : $d_z^{\max} = D \sin \theta_m \leq a$. При $D \leq a$ максимальный угол $\theta_m = \pi/2$, а максимальная высота диполя $d_z^{\max} = D$. При $D > a$ этот угол равен $\theta_m = \arcsin(a/D)$, а максимальная высота диполя равна a . Соответственно при $D < a$ проекция диполя на плоскость ямы d меняется от $d = D$ до 0 , а при $D > a$ — от $d = D$ до некоторого минимального значения $d_{\min} = D \cos \theta_m = \sqrt{D^2 - a^2}$. В остальном все положения диполей в яме эквивалентны и вносят одинаковый вклад. Он пропорционален, следовательно, произведению $2\pi d$ (это учет всех возможных поворотов вокруг оси z) на величину свободного места по оси z , пропорциональную $a - d_z$. Поскольку для рассеяния на малых диполях функция $\Phi(kd)$ пропорциональна d^2 ,

нам нужно провести усреднение этой величины с весом $d(a - d_z)$ (постоянные множители при усреднении несущественны)

$$\overline{d^2} = \frac{\int_0^{\theta_m} d\theta d^3(a - d_z)}{\int_0^{\theta_m} d\theta d(a - d_z)}. \quad (40)$$

Это выражение удобно вычислить в переменных $d_z = D \sin \theta \equiv z$, где оно имеет самый простой вид

$$\begin{aligned} \overline{d^2} &= \frac{\int_0^Z dz (D^2 - z^2)(a - z)}{\int_0^Z dz (a - z)} \\ &= D^2 - \frac{aZ^3/3 - Z^4/4}{aZ - Z^2/2}. \end{aligned} \quad (41)$$

Для очень маленьких диполей при $D < a$ максимальная высота диполя $Z = D$ и средний квадрат проекции диполя на плоскость ямы, согласно (41), равен

$$\overline{d^2} = \frac{2}{3}D^2 \frac{1 - 3D/8a}{1 - D/2a} \equiv D^2 \gamma_1(D/a). \quad (42)$$

При $D/a \rightarrow 0$ величина $\overline{d^2} = (2/3)D^2$, что соответствует обычной трехмерной формуле усреднения для векторов: $\overline{d^2} = \overline{d_x^2} + \overline{d_y^2}$.

Для диполей, больших толщины ямы, $D > a$, $Z = a$ и

$$\overline{d^2} = D^2 - a^2/6 = D^2(1 - a^2/6D^2) \equiv D^2 \gamma_2(a/D). \quad (43)$$

При $a/D \ll 1$ диполи становятся эффективно двумерными. При $D = a$ обе формулы дают $\overline{d^2} = (5/6)D^2$. Если трехмерный диполь имеет разброс длин D , то при усреднении по D следует иметь в виду различие случаев $D > a$ и $D < a$, которое, впрочем, не очень велико.

В заключение приведем формулу для проводимости при рассеянии на малых диполях, выраженную через $\overline{d^2} = D^2 \gamma$, где γ — один из коэффициентов γ_1 или γ_2 :

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m} = \frac{\varepsilon_0^2 n \hbar^3}{2\pi^2 N_d e^2 m^2 D^2 \gamma}. \quad (44)$$

Время релаксации в (44) не зависит от энергии частицы, и эта формула пригодна как для вырожденного, так и для невырожденного газа носителей тока. Отметим малость вклада от рассеяния на малые углы, что делает излишним учет экранирования потенциала рассеяния свободными носителями.

Выше мы не учитывали вклад в проводимость от других механизмов рассеяния. Поскольку оказалось, что рассеяние на диполях адекватно описывается в приближении времени релаксации, то и в случае смешанного рассеяния на диполях и других рассеивателях, для которых также существует время релаксации, приведенные формулы для проводимости имеют место при замене $1/\tau \rightarrow 1/\tau_d + 1/\tau_{sc}$.

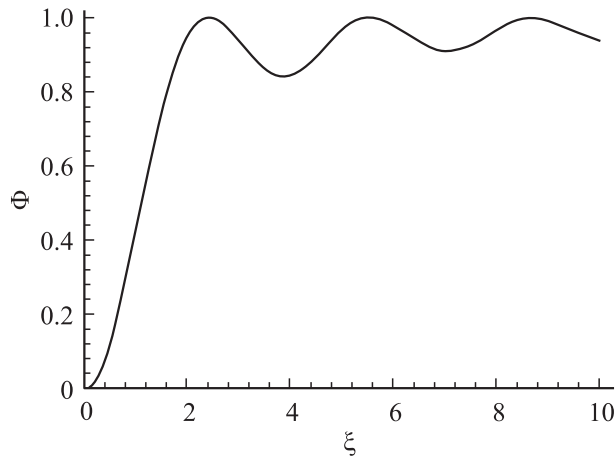


Рис. 3. Интерференционный эффект при рассеянии на диполях.

Обсудим теперь возможность наблюдения эффектов дипольного рассеяния. Характерным признаком дипольного рассеяния является, во-первых, подавление рассеяния для малых диполей из-за компенсации действующего потенциала, и, во-вторых, интерференционный эффект для средних и больших диполей. Наблюдение и того и другого, по-видимому, окажется сложной задачей и потребует тонких экспериментов. Например, измеряя подвижность для одинаковых по своим свойствам образцов с диполями фиксированного размера d , но с различной концентрацией вырожденных носителей n (соответственно с граничными энергией $\epsilon_F \propto n$ и импульсом $p_F = \hbar k_F \propto \sqrt{n}$), можно выделить функцию рассеяния $\Phi(k_F d)$ согласно (26) и (37) по отношению

$$n^2/\sigma \propto \Phi(k_F d). \tag{45}$$

Оно растет с ростом $k_F d \equiv \xi$ и при $\xi \simeq 2.4$ достигает первого максимума $\Phi = 1$, а затем убывает до $\xi \simeq 3.83$ (первый минимум, соответствующий $\Phi \simeq 0.84$) (рис. 3). Изменение аргумента между этими точками $\simeq 1.43$ близко к $\pi/2 \simeq 1.57$, что примерно соответствует добавке дополнительной четверти волны де Бройля на длине диполя.

Конечно, формула (45) будет работать только при условии, что рассеяние на диполях с фиксированной длиной будет доминирующим механизмом рассеяния.

Формула (45) и иллюстрирующий ее рис. 3 относятся к рассеянию на диполе (т. е. на паре зарядов разного знака). Легко увидеть, что интерференционный эффект будет наблюдаться также и при рассеянии на паре зарядов одного знака при фиксированном расстоянии между ними. Функция рассеяния при этом будет отличаться только знаком при квадрате функции Бесселя

$$\Phi_+(kd) = 1 + J^2(kd).$$

При этом в противоположность рассеянию на диполях при $kd \rightarrow 0$ функция рассеяния не уменьшается, а увеличивается до $\Phi_+(0) = 2$, что соответствует рассеянию

на одном заряде удвоенной величины. При увеличении расстояния между зарядами переход к рассеянию независимыми центрами происходит не плавно, а, как и при рассеянии на диполях, сопровождается интерференционными колебаниями. Подчеркнем, что это особенность именно рассеяния в двумерном случае, для трехмерного случая при усреднении по направлениям интерференция пропадает. Заметим, что формула (42) получена в борновском приближении. Как показывают расчеты и оценки дипольного рассеяния для трехмерного случая [2–5], борновское приближение дает достаточную точность для полярных полупроводников типа GaAs. Критерий применимости борновского приближения для кулоновского потенциала можно записать в виде малости отношения $e^2/\hbar v \equiv v_c/v \ll 1$ или в эквивалентном требовании малости размера рассеивателя по сравнению с дебройлевской длиной волны λ_B . Для больших диполей при $kd \geq 1$ второе условие формально нарушается, если рассматривать диполь целиком в виде одного рассеивателя в формуле для вероятности перехода (6). Эту трудность можно обойти, рассматривая соответствующие выражения в виде произведения потенциалов от близких кулоновских центров как поправки к уравнению Больцмана на масштабах, малых по сравнению с длиной свободного пробега.

Следует отметить, что система рассеивающих дипольных центров в отличие от системы одиночных рассеивающих центров чувствительна к перемещению этих центров в образце, поскольку при этом изменяется дипольный момент. Перемещение центров из-за теплового движения делает число диполей с данным дипольным моментом переменной величиной с некоторым средним значением. Процесс этот достаточно медленный, и он должен влиять главным образом на низкочастотные избыточные токовые шумы, поскольку сам ток (или проводимость) определяется средним значением функции распределения диполей. Таким образом, образец с преобладающим дипольным рассеянием, в принципе, должен обладать повышенным избыточным шумом (пропорциональным, как обычно, квадрату тока или приложенного напряжения). Спектр таких избыточных шумов должен иметь близкий к фликкерному характер, поскольку систему диполей можно рассматривать как неупорядоченную систему флуктуаторов с широким разбросом времен релаксации [9,10].

Другая возможность выделения дипольного рассеяния может быть связана с принудительной ориентацией диполей, например, при отжиге образца в сильном электрическом поле. В этом случае рассеяние всей системы диполей должно быть существенно анизотропным, что скажется на анизотропности проводимости. Из-за возможности принудительной ориентации в сильном электрическом поле и последующей релаксации такой ориентации к хаотической проводимости в сильном поле должна обнаруживаться в определенной степени гистерезисные явления.

Список литературы

- [1] Н.В. Агринская, Т.В. Машовец. ФТП **28**, 1505 (1994).
- [2] D. Chatoradhyaya, A. Ghosal. Phys. Rev. B **25**, 6538 (1982).
- [3] D. Chatoradhyaya, H.J. Queisser. Rev. Mod. Phys. **53**, 745 (1981).
- [4] R. Stratton. J. Phys. Chem. Sol. **23**, 1011 (1962).
- [5] J.R. Meyer, F.J. Bartoli. Phys. Rev. B **23**, 5413 (1981).
- [6] W.G. Spitzer, M.B. Panish. J. Appl. Phys. **40**, 4200 (1969).
- [7] J.D. Wiley. J. Phys. Chem. Sol. **32**, 2053 (1971).
- [8] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский. ФТП **40**, 400 (2006).
- [9] В.И. Козуб. ФТТ **26**, 1186 (1984).
- [10] Ш.М. Коган. УФН **145**, 285 (1985).