

Влияние частичного упорядочения двумерной системы рассеивателей на анизотропию кинетических коэффициентов

© Н.С. Аверкиев, А.М. Монахов, А.Я. Шик, Р.М. Кoenraad*

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

*COBRA Interuniversity Research Institute, Eindhoven University of Technology, Netherlands

(Получена 3 марта 1998 г. Принята к печати 3 апреля 1998 г.)

Рассмотрено влияние частичного упорядочения примесей (коррелированное вдоль одного направления и некоррелированное вдоль другого) на кинетические коэффициенты. Показано, что геометрия расположения примесей сама по себе при рассеянии на сферически симметричном потенциале не сказывается на коэффициенте диффузии и проводимости, и они остаются такими же, как и для некоррелированной системы примесей.

Хорошо известно, как влияет на проводимость рассеяние на хаотически расположенных примесях и примесях, случайно заполняющих узлы периодической решетки. Выращиваемые в настоящее время δ -легированные слои на vicинальных поверхностях полупроводников представляют собой отличный от предыдущих класс структур с частичным упорядочением рассеивающих центров [1]. На их поверхности имеется периодическая структура монокристаллических ступеней, и при легировании примеси осаждаются преимущественно на них, образуя систему параллельных цепочек. Вдоль такой цепочки положения примесей можно считать совершенно некоррелированными. При этом сами цепочки образуют периодическую решетку, период которой зависит от угла разориентации поверхности относительно главной кристаллической плоскости. Эта система по своей геометрии отличается от изученных ранее. Экспериментальные исследования показали [2], что такие слои имеют анизотропные электрические свойства. В данной работе мы рассмотрим влияние геометрии системы рассеивателей на анизотропию кинетических коэффициентов.

Рассмотрим рассеяние электрона, локализованного в δ -слое и свободно двигающегося только в плоскости слоя. В этом случае интеграл столкновений в уравнении Больцмана для определения поправки f_1 к равновесной функции распределения f_0 может быть записан в виде

$$I_{st}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^2\mathbf{k}'}{2\pi} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [f_1(\mathbf{k}') - f_1(\mathbf{k})] \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}), \quad (1)$$

где $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'})$ — вероятность перехода электрона из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' в результате упругого рассеяния. Мы будем интересоваться лишь изменением функции распределения, связанным с пространственной корреляцией в расположении примесей, не принимая во внимание изменение электронной плотности вблизи примеси, что, вообще говоря, необходимо для расчета кинетических коэффициентов. Предполагая, что волновая функция электрона в плоскости слоя представляет собой плоскую волну, вероятность

$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ можно записать в виде

$$W(\mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int dx dy dz e^{iq_x x} e^{iq_y y} V(\mathbf{r}) \varphi^2(z) \right|^2, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}',$$

где $\varphi(z)$ — волновая функция размерного квантования вдоль направления z , а

$$V(\mathbf{r}) = \sum_j^N v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$$

— потенциал примесей (\mathbf{R}_j — координата j -й примеси). Легко показать [3], что

$$W(\mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} |v(\mathbf{q})|^2 S(\mathbf{q}),$$

где $v(\mathbf{q})$ — фурье-образ эффективного двумерного потенциала примесей, для кулоновского потенциала

$$v(q) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon q} \int \exp(-q|z|) \varphi^2(z) dz,$$

а $S(\mathbf{q})$ — так называемый структурный фактор

$$S(\mathbf{q}) = \left| \sum_j^N e^{iq\mathbf{R}_j} \right|^2, \quad (2)$$

содержащий всю информацию о геометрии системы. Считая положение примесей совершенно не коррелированным вдоль цепочек (направление x), а сами цепочки уложенными в периодическую решетку (направление y), получаем для усредненного по положению примесей структурного фактора

$$\langle S(\mathbf{q}) \rangle = N \left[1 + \frac{(2\pi)^2}{a} \nu \delta(q_x) \sum_n \delta\left(q_y - \frac{2\pi}{a} n\right) \right], \quad (3)$$

где N — полное число примесей на всей плоскости, а ν — среднее число примесей на единицу длины цепочки. Величина $\langle S(\mathbf{q}) \rangle$ отличается от структурного фактора для совершенно не коррелированных примесей только

для $q_x = 0$. Качественно такое поведение $S(\mathbf{q})$ связано с тем, что при $q_x \neq 0$ среднее число примесей на фронте плоской волны постоянно, и лишь при $q_x = 0$ среднее число примесей на таком фронте начинает осциллировать.

Формула (3) имеет до некоторой степени символический смысл, поскольку при подстановке ее в (1) получается произведение трех δ -функций, которое после интегрирования дает формально неопределенное выражение $\delta(0)$. чтобы придать такому выражению смысл, следует вспомнить, что оно получено из суммы (2), в которой полное число примесей N следует считать большим, но конечным числом. Тогда

$$2\pi\nu\delta(0) = \bar{N}_x^2 - \bar{N}_x, \quad (4)$$

где \bar{N}_x — среднее число примесей на одной цепочке.

Подставив выражение (3) в (1), получаем

$$I_{st} = N \int \frac{d^2k'}{2\pi} |v(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 (f_1(\mathbf{k}') - f_1(\mathbf{k})) \delta(k - k') \frac{m}{k'} + \frac{2\pi\nu}{a} \delta(k_x - k'_x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(k_y - k'_y - \frac{2\pi n}{a}\right) \times |v(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 (f_1(\mathbf{k}') - f_1(\mathbf{k})) \delta(k - k') \frac{m}{k'}. \quad (5)$$

Первый член в правой части (5) соответствует интегралу столкновений на некоррелированных примесях, и весь вклад от пространственных корреляций содержится во втором (сингулярном) члене.

Далее мы будем рассматривать рассеяние на потенциале, имеющем круговую симметрию, т.е. $v(\mathbf{k}) = v(k)$. Тогда поправки к функции распределения удобно представить в виде суммы:

$$f_1(k, \varphi) = f_1^+(k, \varphi) + f_1^-(k, \varphi),$$

где

$$f_1^+(k, \varphi) = f_1^+(k, -\varphi),$$

а

$$f_1^-(k, \varphi) = -f_1^-(k, -\varphi).$$

После подстановки в (5) величин f_1^+ , f_1^- и интегрирования выражение для интеграла столкновений примет вид

$$I_{st} = N \int \frac{d\varphi'}{2\pi} |v(k, \varphi - \varphi')|^2 (f_1^+(k, \varphi') + f_1^-(k, \varphi') - f_1^+(k, \varphi) - f_1^-(k, \varphi)) + \frac{|v(2k|\sin\varphi)|^2}{k|\sin\varphi|} 2f_1^-(k, \varphi) \times \sum_{n=1}^{\infty} \delta\left(2k|\sin\varphi| - \frac{2\pi n}{a}\right). \quad (6)$$

Если полевая часть уравнения Больцмана является четной функцией угла (например, пропорциональна $\cos\varphi$, как при вычислении проводимости в однородном электрическом поле), то уравнения для f_1^+ и f_1^- расцепляются. Это можно увидеть, например, если заменить

φ на $-\varphi$ в уравнении Больцмана, затем сложить и вычесть получившиеся уравнения. В результате получим, что функция f_1^+ подчиняется уравнению Больцмана без сингулярного слагаемого в интеграле столкновений, а f_1^- — однородному уравнению:

$$\int \frac{d\varphi'}{2\pi} |v(k, \varphi - \varphi')|^2 (f_1^-(k', \varphi') - f_1^-(k, \varphi)) + \frac{|v(2k|\sin\varphi)|^2}{k|\sin\varphi|} 2f_1^-(k, \varphi) \times \sum_{n=1}^{\infty} \delta\left(2k|\sin\varphi| - \frac{2\pi n}{a}\right) = 0. \quad (7)$$

Подчеркнем, что такое разделение уравнений для f_1^+ и f_1^- непосредственно связано с тем, что для потенциала справедливо равенство $v(k, \varphi) = v(k, -\varphi)$. Поскольку f_1 представляет собой поправку к функции распределения, обусловленную внешним возмущением, а уравнение (7) его не содержит, следует считать, что $f_1^- \equiv 0$.

Таким образом, при расчете проводимости или коэффициента диффузии для любого сферически симметричного потенциала вклад от сингулярной части интеграла столкновений равен нулю и коррелированное расположение примесей само по себе не сказывается на этих коэффициентах.

Из вышеизложенного, конечно, не следует, что кинетические коэффициенты в рассматриваемой системе не отличаются от коэффициентов в некоррелированной системе. Для точного расчета, скажем, проводимости необходимо учесть неоднородность плотности распределения электронов, что сразу приведет к анизотропии кинетических коэффициентов.

Отметим, что вероятность рассеяния, как и следовало ожидать, имеет сингулярный вклад. Если вычислить уходящее время для упругого рассеяния на рассматриваемой системе примесей,

$$\tau^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |V(\mathbf{q})|^2 \delta[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} - \mathbf{q})],$$

как это было сделано в [4] для трехмерной периодической решетки со случайно заполненными узлами, то согласно (3) получим

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \frac{1}{\tau_r(\mathbf{k})} + \frac{1}{\tau_c(\mathbf{k})}.$$

Величина τ_r определяется рассеянием на случайно расположенных примесях, а τ_c — рассеянием на "брэгговские" углы на коррелированных цепочках:

$$\frac{1}{\tau_c} = \frac{N}{a\hbar} \sum_{n \neq 0, \frac{2\pi n}{a} \in [k_y - |k|, k_y + |k|]} \frac{m}{|k_x|} v\left(0, \frac{2\pi n}{a}\right) 2\pi\nu\delta(0). \quad (8)$$

Выражение (8) означает, что при $k_y = (2\pi/a)n$ возникает дополнительное рассеяние, усиленное в $(\bar{N}_x^2 - \bar{N}_x)/N_x$ раз

по сравнению с некогерентным. Ситуация в этом смысле аналогична рассеянию на кристаллической решетке, где для внешнего пучка (плоской волны) видны брэгговские пики (аналог (8)), однако для электрона внутри кристалла, имеющего импульс много меньший, чем размер зоны Бриллюэна, рассеяния на решетке как бы не существует, поскольку электронные состояния на границах зон Бриллюэна, из которых и происходит рассеяние, не заселены из-за относительно малой концентрации носителей в таких состояниях.

Таким образом, геометрия расположения примесей на δ -легированных вицинальных поверхностях сама по себе не сказывается на кинетических коэффициентах. Частичное упорядочение в такой системе может проявляться в рассеянии внешнего пучка частиц (например, в электронографии поверхности).

Работа частично поддержана проектами РФФИ № 96-15-96955, ФТНС № 97-1039 и Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek (NWO).

Список литературы

- [1] R. Nötzel, L. Däweritz, K. Ploog. Phys. Rev. B, **46**, 4736 (1992).
- [2] А.Д. Виссер, В.И. Кадушкин, В.А. Кульбачинский, В.Г. Китин, А.П. Сеничкин, Е.Л. Шангина. Письма ЖЭТФ, **59**, 339 (1994).
- [3] Д. Займан. *Принципы теории твердого тела* (М., Мир, 1974).
- [4] A.F.J. Levi, S.L. McCall, P.M. Platzman. Appl. Phys. Lett., **54** (10), 940 (1989).

Редактор Т.А. Полянская

Effect of partial ordering of a two-dimensional system of scatters on anisotropy of kinetic coefficients

N.S. Averkiev, A.M. Monakhov, A.Yu. Shil, P.M. Koenraad*

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

*COBRA Interuniversity Research Institute,
Eindhoven University of Technology, the Netherlands