

Тензор проводимости и частота релаксации импульса электронов при рассеянии на ионизованной примеси в магнитном поле: метод матрицы плотности

© В.Э. Каминский[¶]

Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники Российской академии наук,
117105 Москва, Россия

(Получена 21 июня 2004 г. Принята к печати 8 октября 2004 г.)

В однородном полупроводнике по теории возмущений получено решение уравнения Лиувилля для одноэлектронной матрицы плотности в магнитном поле. Получены выражения для тензора проводимости и скорости релаксации импульса электронов при рассеянии на ионизованной примеси. Полученные результаты позволяют достаточно точно описать наблюдавшиеся в ряде работ зависимости продольной проводимости невырожденного электронного газа от концентрации и магнитного поля в квантовом пределе. Эти зависимости не имеют объяснения в рамках современной теории магнетосопротивления. Дано объяснение температурных зависимостей компонент тензора проводимости вырожденного электронного газа в квантовом пределе по магнитному полю.

1. Введение

Известно, что магнитное поле квантует энергетический спектр электронов в полупроводнике. Однако при $\alpha = \hbar\omega/kT \ll 1$, где $\omega = qB/m$ — циклотронная частота, учет квантования в большинстве случаев оказывается несущественным и для описания электронного транспорта можно использовать кинетическое уравнение Больцмана. Из этого уравнения следует, что магнитное поле заметно влияет на поперечные относительно поля кинетические эффекты, если $\omega\tau = \mu B > 1$, где μ — подвижность электронов. В продольном направлении кинетические эффекты не зависят от магнитного поля.

В квантующем магнитном поле, при $\alpha \gg 1$, для описания поперечных (вектор напряженности магнитного поля \mathbf{B} перпендикулярен вектору плотности тока \mathbf{j} в образце) гальваномагнитных эффектов в полупроводниках метод кинетического уравнения для функции распределения электронов становится неприменимым. Ряд специфических эффектов, связанных с квантованием, такой подход не позволяет описать в принципе. Задача о поперечных гальваномагнитных эффектах была строго решена методом матрицы плотности в работе Адамса и Гольстейна [1]. Согласно результатам [1–3], характер проводимости в квантовом пределе по магнитному полю не отличается принципиально от случая классически сильных полей. Отличие состоит лишь в том, что плотность состояний на уровне Ферми и времена релаксации зависят от магнитного поля [4,5]. Продольная проводимость электронного газа σ_{zz} ($\mathbf{B} \parallel \mathbf{j} \parallel z$), согласно [1], не отличается от классического выражения.

Дальнейшие исследования, однако, показали, что в случае рассеяния на ионизованной примеси полученные в [1–3] выражения для σ_{xx} и σ_{zz} не совсем точны в квантовом пределе [4]. Считается, что это связано с необходимостью учета эффектов экранирования

и квазиодномерным характером движения электрона в поле заряженной примеси. Последовательный учет этих эффектов в рамках традиционного подхода [1] не позволяет, однако, описать некоторые особенности магнетотранспорта. Для невырожденного электронного газа при учете этих эффектов продольная проводимость $\sigma_{zz}(B_z)$ в ультраквантовом пределе, когда заполнен только нижний уровень Ландау, должна расти при увеличении магнитного поля за счет подавления малоуглового рассеяния [4], причем рост проводимости тем больше, чем меньше концентрация электронов. Экспериментально же в InSb такая зависимость $\sigma_{zz}(B_z)$ наблюдалась при температуре $T = 30$ К только для относительно высокой концентрации электронов $n \approx 10^{15}$ см⁻³. Для меньших концентраций электронов наблюдается противоположная зависимость от поля [6]. Причем при концентрации электронов $n \approx 10^{13}$ см⁻³ расхождение между теорией и экспериментом достигает 40 раз. В рамках существующих теорий это не имеет никакого объяснения. В вырожденном электронном газе легированных полупроводников в диапазоне температур от 0.05 до 15 К в ультраквантовом пределе экспериментально наблюдаются довольно сильные зависимости диагональных компонент проводимости от температуры (см. обзор [4] и ссылки в нем). Продольное сопротивление $\rho_{zz}(B_z)$ уменьшается при повышении температуры монотонно. Поперечные проводимость $\sigma_{xx}(B_z)$ и сопротивление $\rho_{xx}(B_z)$ ($\mathbf{j} \parallel x$, $\mathbf{B} \parallel z$) немонотонно зависят от температуры. В то же время холловская проводимость $\sigma_{xy}(B_z)$ изменяется с температурой очень слабо. Эти температурные зависимости нельзя объяснить в рамках теории [1].

Недавно в работах [7,8] было показано, что в ряде случаев последовательный учет квантования в магнитном поле существен для адекватного описания гальваномагнитных эффектов. Однако в [7,8] очень важный с экспериментальной точки зрения случай рассеяния на ионизованной примеси не был проанализирован. В данной работе в предположении малой неравновесности

[¶] E-mail: kamin@zelnet.ru

решено кинетическое уравнение для матрицы плотности в произвольном магнитном поле при рассеянии на ионизированной примеси. Получены выражения для скорости релаксации импульса и проведено сравнение с доступными экспериментальными результатами.

2. Теория

Как известно, в магнитном поле матрицы перпендикулярных к полю компонент импульса электрона не имеют диагональных элементов. Вследствие того в квантующем магнитном поле электронный транспорт нельзя в принципе описать на основании кинетического уравнения Больцмана. В общем случае наиболее полным микроскопическим описанием состояния квантовой системы является описание с помощью статистического оператора (матрицы плотности) R . В представлении Шредингера он описывается уравнением Лиувилля

$$i\hbar \frac{\partial R}{\partial t} = [H, R]. \quad (1)$$

Все дальнейшее наше рассмотрение ограничим одноэлектронным приближением. Примем, что магнитное поле с индукцией B направлено вдоль оси z , $\mathbf{j} \parallel x$ и электрическое поле E_x измеряется также вдоль оси x .

Свойства рассматриваемой системы в одноэлектронном приближении описывает оператор Гамильтониана

$$H = H_0 + W + U = H_e + W + U, \quad (2)$$

где H_e — гамильтониан электрона в магнитном поле, W — оператор взаимодействия электронов с фонами или примесями, $U = -qE_x x$ — оператор потенциальной энергии. В общем случае плотность электрического тока может быть рассчитана из соотношения

$$\mathbf{j} = \text{Tr}(R\mathbf{J}), \quad (3)$$

где $\text{Tr}(\dots)$ обозначает след оператора, \mathbf{J} — оператор плотности тока в магнитном поле. Для расчета тока необходимо определить из уравнения (1) статистический оператор. Для решения этого уравнения будем рассматривать в соотношении (2) сумму $W + U$ как возмущение.

Если выбрать вектор-потенциал магнитного поля в калибровке $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, то волновые функции оператора H_0 и энергии электрона для однородного полупроводника описываются хорошо известными соотношениями в представлении Ландау [9]. В выбранном представлении состояние электрона $|i\rangle$ описывается набором квантовых чисел (n, k_y, k_z, s) .

Уравнение (1) будем решать методом последовательных приближений. Обоснование этого метода и процедура получения приближенного уравнения подробно изложены в работе [10]. Для стационарных условий в выбранном базисе волновых функций из соотношения (1) получаем

$$(E_1 - E_2)R_{12} + U_{13}R_{32} - R_{13}U_{32} + i\pi S_{12} = 0, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} S_{12} = & 2 \sum_3 \left\{ \delta(E_2 - E_3) [M_{14}^+(\delta_{43} - R_{43})M_{35}R_{52} \right. \\ & - (\delta_{14} - R_{14})M_{43}R_{35}M_{52}^+] + \delta(E_1 - E_3) \\ & \left. \times [R_{14}M_{45}^+(\delta_{53} - R_{53})M_{32} - M_{13}R_{34}M_{45}^+(\delta_{52} - R_{52})] \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь M_{ij} являются матричными элементами взаимодействия электронов с заряженной примесью. Их вид зависит от способа описания этого взаимодействия.

Хорошо известно, что, строго говоря, уравнение (1) не описывает необратимого поведения системы электронов. Чтобы получить необратимое поведение, надо привлечь дополнительные соображения [1]. Для этого можно либо модифицировать гамильтониан, либо воспользоваться каким-либо искусственным математическим приемом, отражающим взаимодействие системы со средой. Таким наиболее широко применяемым приемом является использование гипотезы о виде начального приближения для диагональной части матрицы плотности, т.е. функции распределения. Представим матрицу плотности в виде

$$R_{12} = F_1\delta_{12} + G_{12}\delta(k_{y1} - k_{y2}), \quad (6)$$

где $G_{12} = G_{n_1 n_2}(k_{z1}, k_{z2})$. Если электрическое поле не нарушает пространственной однородности электронной системы, то в качестве $F_1 = F(E_1)$ обычно берут функцию распределения Ферми–Дирака, зависящую от энергии и квазиуровня Ферми E_F . При таком выборе F_1 фактически исходят из широко используемого в теории полупроводников принципа локального равновесия. В области высоких температур это приближение является вполне удовлетворительным. Однако при низких температурах необходимо учитывать поправки для функции распределения, обусловленные совместным действием электрического поля и процессов релаксации. В первом неисчезающем порядке по рассеянию такая поправка получена в [1]. Однако она имеет смысл только в области сильных полей. Общая процедура получения поправок изложена в [10]. Суть ее заключается в разложении статистического оператора Гиббса по потенциалу взаимодействия как возмущению. В линейном по электрическому полю приближении функцию распределения можно представить в виде

$$F_1 + \frac{\partial F_1}{\partial E} U_{11}Z, \quad (7)$$

где U_{11} — матричный элемент потенциальной энергии, Z — функция, являющаяся результатом суммирования по всем порядкам рассеяния. В общем случае она зависит от магнитного поля, параметров релаксации и функции распределения и может быть определена из решения (1) для диагональных элементов матрицы

плотности. Тогда из (6) получаем

$$R_{12} = \left(F_1 + \frac{\partial F_1}{\partial E} U_{11} Z \right) \delta_{12} + G_{12} \delta(k_{y1} - k_{y2}). \quad (8)$$

В данной работе мы не будем анализировать точный вид функции Z . Ограничимся только первым приближением по магнитному полю. Из решения кинетического уравнения Больцмана для функции распределения известно [11], что неравновесная ее часть может быть представлена в виде

$$\Delta f = \frac{\mathbf{f}_1 \mathbf{k}}{k}.$$

В случае магнитного поля

$$\mathbf{f}_1 = -q \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial F}{\partial E} \frac{\omega[\mathbf{B}\mathbf{E}] + \nu \mathbf{B}\mathbf{E}}{B(\nu^2 + \omega^2)},$$

где ν — частота релаксации импульса. В дальнейшем слагаемое, пропорциональное \mathbf{E} , мы опускаем. Его учет повышает точность расчета функции P_{nm} , которая определена далее. Однако в данной работе мы не будем рассматривать этот вопрос. Тогда получаем

$$\begin{aligned} \Delta f &= -\frac{\hbar q}{m} \frac{\partial F}{\partial E} \frac{\omega(\mathbf{k}[\mathbf{B}\mathbf{E}])}{B(\nu^2 + \omega^2)} = -q k_y \lambda^2 E_x \frac{\partial F}{\partial E} \frac{\omega^2}{\nu^2 + \omega^2} \\ &= U_{11} \frac{\partial F}{\partial E} \frac{\omega^2}{\nu^2 + \omega^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Из сравнения этого выражения с (7) следует, что

$$Z = \frac{\omega^2}{\nu^2 + \omega^2}.$$

Отсюда видно, что при $B = 0$ получаем $Z = 0$, а в пределе больших полей $Z = 1$. В [1] фактически, хотя и не явно, функция распределения была представлена в виде (9) с $Z = 1$. Расходимость решений [1] в области слабых полей в основном связана именно с тем, что не была учтена зависимость Z от поля.

Будем искать линейное по G решение уравнения (4). Ограничим наше дальнейшее рассмотрение взаимодействия электронов с заряженной примесью экранированным кулоновским потенциалом. Тогда из (4), (5) и (8) получаем

$$\begin{aligned} (E_n - E_m + i\hbar\nu_{nm}^{(0)})G_{nm} + U_{nm}(F_m - F_n) \\ - i\sqrt{2(n+1)}q\lambda E_x P_{nm} - i\hbar B_{nm} = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \nu_{nm}^{(0)} = \nu_0 \int_0^\infty dy \left\{ \sum_{l=0}^{l_m} [(1-F_m)K_{nl} + F_m K_{ml}] A_{ml} \right. \\ \left. + \sum_{l=0}^{l_n} [(1-F_n)K_{ml} + F_n K_{nl}] A_{nl} \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} P_{nm} &= \frac{\hbar\nu_i}{\sqrt{n+1}} Z \int_0^\infty \sqrt{y} dy \left[(1-F_n + F_m) \left(-\frac{\partial F_m}{\partial E_m} \right) \right. \\ &\quad \times \sum_{l=0}^{l_m} |C_{n,l}^{m,m-n+l}| A_{ml} + (1+F_n - F_m) \left(-\frac{\partial F_n}{\partial E_n} \right) \\ &\quad \times \sum_{l=0}^{l_n} |C_{m,l}^{n,n-m+l}| A_{ml} \left. \right] (\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1}), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} B_{nm} &= \nu_i \int_0^\infty dy \left\{ \sum_{l=0}^{l_m} [(1-F_n)C_{nl}^{m,m-n+l}] G_{l,m-n+l} \right. \\ &\quad + F_m C_{ml}^{n,n-m+l} G_{n-m+l,l} A_{ml} + \sum_{l=0}^{l_n} [(1-F_m)C_{ml}^{n,n-m+l}] G_{l,n-m+l} \\ &\quad \left. + F_n C_{nl}^{m,m-n+l} G_{m-n+l,l} A_{nl} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{nl} &= \frac{1}{2b_{nl}} \left\{ [2y + a^2 + (x + b_{nl})^2]^{-2} \right. \\ &\quad \left. + [2y + a^2 + (x - b_{nl})^2]^{-2} \right\}, \end{aligned}$$

$$x = k_z \lambda, \quad a = k_s \lambda, \quad l_n = n + \left[\frac{x^2}{2} \right], \quad b_{nl}^2 = x^2 + 2(n-l),$$

$$\nu_i = \frac{mq^4 N^+ \lambda^3}{2\pi^2 \kappa^2 \hbar^3},$$

N^+ — концентрация ионизованной примеси, $k_s = 1/r_s$, r_s — радиус экранирования, κ — диэлектрическая проницаемость полупроводника. Функции $K_{nl}(y)$, $C_{n,l}^{m,p}(y)$ и метод интегрирования матричных элементов определены в *Приложении*. Как видно, искомая функция G входит в (10) в виде суммы. Поэтому в отличие от рассеяния на фонах [7,8] получить простое решение для нее нельзя. Однако решение уравнения (10) всегда можно представить в виде

$$G_{nm} = \frac{U_{nm}(F_n - F_m) + i\sqrt{2(n+1)}qE_x \lambda P_{nm}}{E_n - E_m + i\hbar\nu_{nm}}. \quad (13)$$

Точность расчета ν_{nm} зависит от ряда параметров и выбранной процедуры решения уравнения (10). Используя полученные в *Приложении* результаты, можно показать, что $\nu_{nm}^{(0)} G_{nm} > B_{nm}$. Исходя из этого неравенства, уравнение (10) можно, например, решать методом последовательных приближений. В первом приближении можно принять $B_{nm} = 0$. Более подробно эти вопросы будут рассмотрены далее. В итоге для компонент тензора проводимости получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{q^2 \omega}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{s,n} (n+1) \\ &\quad \times \int dk_z \left[\frac{\nu_{n,n+1}(F_n - F_{n+1}) + \omega P_{n,n+1}}{\omega^2 + \nu_{n,n+1}^2} \right], \end{aligned} \quad (14)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{q^2 \omega}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{s,n} (n+1) \times \int dk_z \left[\frac{\omega(F_n - F_{n+1}) - v_{n,n+1} P_{n,n+1}}{\omega^2 + v_{n,n+1}^2} \right], \quad (15)$$

где $F_n \equiv F(E_n)$. Как видно, эти уравнения совпадают по структуре с уравнениями [7,8] для рассеяния на фонах. Поэтому для учета одновременного действия разных механизмов релаксации необходимо v и P представить в виде сумм по этим механизмам. Кроме того, из полученных выражений можно предположить, что функция Z также зависит от номера магнитного уровня n и более правильно ее представить в виде

$$Z_{n,n+1} = \frac{\omega^2}{\omega^2 + v_{n,n+1}^2}.$$

Используя полученные результаты, несложно показать, что продольная проводимость $\sigma_{zz}(B_z)$ описывается обычным выражением [11].

В сильных магнитных полях, когда $\omega \gg v$, уравнение (13) формально переходит в выражение, полученное в [1]. Существенное отличие заключается в том, что в отличие от [1] в пределе слабых полей они переходят известные выражения для тензора проводимости в полупроводниках [11]. Кроме того, в данной работе получено (см. далее) более точное выражение (11) для частоты рассеяния на ионизованной примеси ν_{nm} в сильных магнитных полях.

3. Расчет частоты рассеяния электронов

Уравнение (10) является уравнением Фредгольма второго рода, которое удовлетворяет всем условиям абсолютной сходимости. Поэтому для расчета используем метод последовательных приближений. В первом приближении примем $B_{nm} = 0$. Чтобы получить следующее приближение, учтем, что G_{nm} является обобщенной (символьной) функцией. В уравнении (10) $\nu_{nm}^{(0)}$ заменим на μ_{nm} и отбросим пропорциональное P_{nm} слагаемое. Учет этого слагаемого соответствует учету квадратичных по частоте рассеяния эффектов. Это может быть существенным для анализа магнетотранспорта в полупроводниках с малой подвижностью носителей тока. Если учесть δ -функции в интеграле столкновений, то из (10) под знаком интеграла следует равенство

$$G_{l,m-n+l}(k_{z3}; k_{z4}) = G_{nm} \frac{\partial k_{z2}}{\partial k_{z3}} = G_{nm} \frac{k_{z3}}{k_{z2}}.$$

Используя это равенство в интеграле столкновений, получаем следующее приближение для частоты рассеяния:

$$\nu_{nm} = \frac{q^4 \hbar \omega N^+}{16\pi \kappa^2 \sqrt{2m}} \times \int_0^\infty dy \left[\sum_{l=0}^{l_m} \frac{K_{nl}}{b_{ml}(p_2)} D_{nml}(p_2) + \sum_{l=0}^{l_n} \frac{K_{ml}}{b_{nl}(p_1)} D_{nml}(p_1) \right], \quad (16)$$

где

$$b_{nm}^2(p_i) = \hbar \omega (n - m) + p_i^2, \quad i = 1, 2, \\ p_i^2 = \frac{\hbar^2 k_{zi}^2}{2m}, \quad l_n = n + \left[\frac{p_1^2}{\hbar \omega} \right], \quad E_s = \frac{\hbar^2 k_s^2}{2m}, \\ D_{nml}(p_i) = \left[\frac{[p_i - b_{nl}(p_i)](1 + F_n - F_m)}{p_i [\hbar \omega y + (b_{nl} - p_i)^2 + E_s]^2} + \frac{[p_i + b_{nl}(p_i)](1 + F_n - F_m)}{p_i [\hbar \omega y + (b_{nl} + p_i)^2 + E_s]^2} \right].$$

В пределе нулевого магнитного поля, заменяя суммирование интегрированием, из соотношения (16) для невырожденного электронного газа получаем

$$\nu = \frac{q^4 N^+}{8\pi \kappa^2 \sqrt{2m} p} \left[\frac{1}{(\sqrt{E} - p)^2 + E_s} - \frac{1}{(\sqrt{E} + p)^2 + E_s} \right], \quad (17)$$

где $p = p_1 = p_2$.

Рассчитаем теперь частоту рассеяния без магнитного поля непосредственно из уравнения (5). Состояние электрона $|i\rangle$ в данном случае описывается набором квантовых чисел (k_x, k_y, k_z, s) . Из уравнения (5) получается уравнение, аналогичное (10). Без магнитного поля частота релаксации импульса зависит только от полной энергии электрона. Итерационная процедура решения хорошо сходится, и во втором приближении получается известная формула Брукса–Херринга для частоты релаксации импульса ν_{BH} . Отметим здесь, что следующие итерации незначительно повышают точность расчета.

Как видно, частота (16) зависит от энергии и k_z . В то же время частота ν_{BH} зависит только от энергии. Это является следствием различного набора квантовых чисел при анализе без магнитного поля и с магнитным полем. Чтобы из (16) получить эквивалентное ν_{BH} выражение для частоты рассеяния, необходимо учесть, что $p = \sqrt{E} \cos \Theta$, и усреднить по углу. Средняя частота получается из соотношения

$$\bar{\nu} = \left(\int_0^\pi d\Theta \frac{\sin \Theta}{\nu(\Theta)} \right)^{-1}.$$

После несложных вычислений из (16) получаем

$$\bar{\nu} = \frac{60x}{15 + 40x^2 + 8x^4} \nu_0, \quad (18)$$

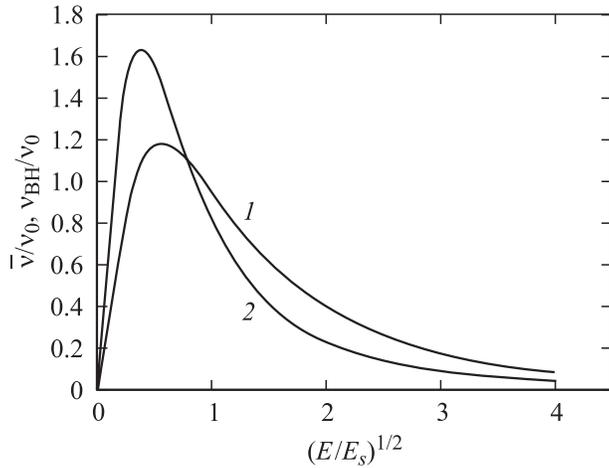


Рис. 1. Зависимости скоростей релаксации импульса на ионизированной примеси от энергии. 1 — расчет по формуле (18), 2 — расчет по теории Брукса–Херринга.

где

$$x^2 = \frac{E}{E_s}, \quad \nu_0 = \frac{q^4 N^+}{16\pi\kappa^2 \sqrt{2m} E_s^{3/2}}.$$

Полученное выражение отличается от формулы Брукса–Херринга. Это обусловлено различной сходимостью итерационной процедуры при расчете с различными наборами квантовых чисел. На рис. 1 приведены результаты расчета частот релаксации $\bar{\nu}$ и ν_{BH} . Как видно, результаты тем не менее не сильно отличаются друг от друга.

4. Расчет проводимости электронного газа и сравнение с экспериментальными результатами

Рассмотрим сначала температурные зависимости проводимости вырожденного электронного газа в ультраквантовом пределе. В этом случае $\omega \gg \nu$ и для поперечной проводимости из (13) получаем

$$\sigma_{xx} = \frac{q^2}{(2\pi)^2 \hbar} \int dk_z P_{01}. \quad (19)$$

При расчете по этой формуле необходимо учесть, что в вырожденном электронном газе полупроводников в сильном магнитном поле энергия Ферми невелика. Так, при $B = 5$ Тл и InSb с концентрацией электронов $n = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ энергия Ферми $E_F = 1.5$ мэВ и при очень низких температурах отношение E_F/kT невелико. Поэтому замена производной от функции распределения δ -функцией не совсем точна. Если учесть это, то для функции $P_{n,n+1}$ из (12) приблизительно получаем

$$P_{01} = (1 + F_0) \left(-\frac{\partial F_0}{\partial E} \right) V_{01}(E_F),$$

где

$$V_{01} = \frac{\hbar\omega q^4 N^+}{8\pi^2 \kappa^2 \sqrt{2m}} \int_0^\infty \sqrt{y} C_{00}^{11} dy \times \left[\frac{1}{(\hbar\omega y + 4E_F + E_s)^2} + \frac{1}{(\hbar\omega y + E_s)^2} \right].$$

Подставляя это выражение в (19), после интегрирования получаем, что проводимость σ_{xx} в ультраквантовом пределе равна

$$\sigma_{xx} = \frac{\sigma_{xx0}}{\left[1 + \exp\left(-\frac{E_F}{kT}\right) \right]^2},$$

где σ_{xx0} — проводимость при нулевой температуре. Отсюда следует, что для $n = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при изменении температуры от 3 до 10 К σ_{xx} уменьшается в 1.4 раза. А так как σ_{xy} от температуры практически не зависит и в ультраквантовом пределе $\sigma_{xy} \gg \sigma_{xx}$, то также уменьшается с температурой и ρ_{xx} . Это хорошо согласуется с экспериментальными результатами [4]. Используя (16), можно получить подобную зависимость для σ_{zz} .

Из этого анализа видно, что для вырожденного электронного газа полупроводников поправки, обусловленные учетом температурных зависимостей, для диагональных компонент тензора проводимости не велики и не меняют принципиальный вид зависимостей от магнитного поля. В то же время полученные результаты позволяют объяснить экспериментально наблюдаемые зависимости.

Для невырожденных полупроводников ситуация иная. Как уже отмечалось во Введении, современная теория не может объяснить экспериментально наблюдаемые зависимости продольного сопротивления ρ_{zz} от концентрации электронов n и напряженности магнитного поля B_z . Поэтому проанализируем этот случай более подробно. Необходимые зависимости могут быть рассчитаны, если использовать (16). Однако для улучшения точности расчетов необходимо учесть некоторые факторы, которые выше не обсуждались.

Во-первых, необходимо учесть зависимость концентрации активированной примеси и соответственно электронов от напряженности магнитного поля. Во-вторых, если не все примесные атомы ионизованы или полупроводник компенсированный, то концентрация электронов n_{eff} , которая используется для расчета радиуса экранирования, может отличаться от концентрации свободных носителей $n = N^+$. В этом случае экранирование может осуществляться и связанными носителями, перемещающимися по центрам [12]. Например, если в полупроводнике n -типа с концентрацией доноров N_D имеется некоторое количество акцепторов $N_A \ll N_D$, то

$$n_{\text{eff}} = n + (N_D - N_A - n)(N_A + n)/N_D.$$

Отсюда следует, что в нашем случае для расчета радиуса Дебая r_s нужно брать n_{eff} вместо n . Отметим здесь, что учет этого факта не сильно изменяет

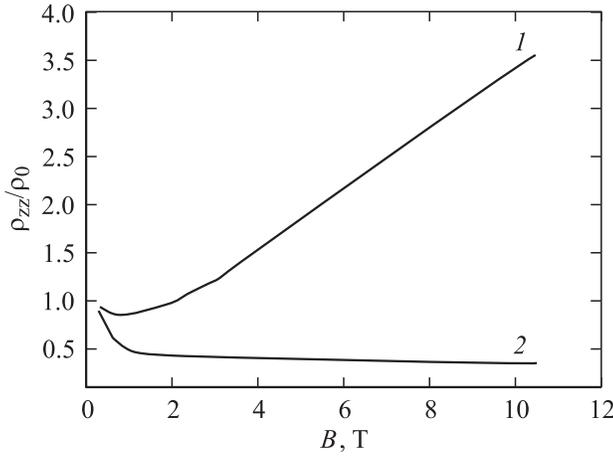


Рис. 2. Зависимости продольного сопротивления от магнитного поля при $T = 30$ К для полупроводников с концентрацией электронов n , см^{-3} : 1 — 10^{13} , 2 — 10^{15} .

расчетные зависимости. В-третьих, необходимо учесть относительно слабое рассеяние на деформационном потенциале акустических фононов (ДА), для которых частота релаксации импульса в магнитном поле была рассчитана в [7,8].

На рис. 2 приведены рассчитанные с учетом выше указанных факторов зависимости продольного магнетосопротивления $\rho_{zz}(B_z)$, легированного InSb (для двух различных концентраций электронов), которые должны наблюдаться при измерении в пределе слабого поля. Для расчетов из работы [5] были взяты: фактор Ланде $g = -40$ и время релаксации импульса $\tau_{\text{ДА}}(300 \text{ К}) = 40$ пс. Энергия ионизации примесного уровня была принята равной $E_d = 5$ мэВ. Расчет показывает, что вид зависимостей относительного продольного магнетосопротивления слабо зависит от величины E_d в достаточно широких пределах. Рассчитанные зависимости с точностью не хуже 20% повторяют экспериментальные результаты [13] во всем диапазоне изменения поля. Отметим здесь, что на экспериментальной зависимости для $n = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ уменьшения сопротивления в области слабых полей не наблюдалось. В рассматриваемых условиях параметр $(E/E_s)^{1/2}$ на рис. 1 при средней тепловой энергии равен 1.1 для большей концентрации электронов и 11 — для меньшей. Как видно из рис. 1 частоты рассеяния, рассчитанные по обеим формулам приблизительно равны. Поэтому наличие участка уменьшения сопротивления на расчетной зависимости может указывать на необходимость учета иных механизмов рассеяния в слабом магнитном поле.

5. Заключение

Таким образом, полученные в данной работе результаты позволяют значительно точнее описать частоту релаксации импульса электронов на ионизированной при-

меси в произвольном магнитном поле. Они позволяют без учета локализационных эффектов описать температурные зависимости диагональных компонент σ_{xx} и σ_{zz} тензора проводимости вырожденного электронного газа в ультраквантовом пределе. В невырожденном электронном газе полученные выражения достаточно точно описывают зависимости продольной проводимости σ_{zz} от концентрации электронов и магнитного поля в широких пределах изменения этих параметров.

Приложение

Интегрирование матричных элементов и ортогональные полиномы

Если воспользоваться равенством $k_{y1} = k_{y2}$, то экранированный кулоновский потенциал можно представить в виде

$$\frac{\exp(-k_s r)}{4\pi r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{q^2 + k_s^2} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}).$$

Тогда произведение матричных элементов в (5) может быть сведено к интегралу

$$\begin{aligned} M_{14}^+ M_{32} &= 2\pi \left(\frac{q^2}{\kappa}\right)^2 N^+ \int \frac{d^3 q}{(q^2 + k_s^2)^2} \delta(k_{y3} - k_{y1} + q_y) \\ &\quad \times \delta(k_{z3} - k_{z1} + q_z) \delta(k_{y2} - k_{y4} + k_{y3} - k_{y1}) \\ &\quad \times \delta(k_{z2} - k_{z4} + k_{z3} - k_{z1}) I_s, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} I_s &= \int dx_1 dx_2 f_n \left(x_2 - \frac{q_y}{2} \lambda^2\right) f_p \left(x_2 + \frac{q_y}{2} \lambda^2\right) \\ &\quad \times f_l \left(x_2 + \frac{q_y}{2} \lambda^2\right) f_m \left(x_1 - \frac{q_y}{2} \lambda^2\right) \exp[iq_x(x_1 - x_2)]. \end{aligned}$$

Если ввести определение

$$\begin{aligned} I_{nl} &= \int_{-\infty}^{\infty} dy f_n \left(y - \frac{q_y}{2} \lambda^2\right) f_l \left(y + \frac{q_y}{2} \lambda^2\right) \exp(iq_x y) \\ &= \exp\left(-\frac{x}{2}\right) z_{nl}, \end{aligned}$$

то тогда получаем

$$I_s = \exp(-x) z_{nl} z_{np}^*,$$

где

$$\begin{aligned} q_r &= \sqrt{q_x^2 + q_y^2}, \quad x = (q_r \lambda)^2 / 2, \\ z_{nl} &= \frac{1}{\sqrt{\pi n! l! 2^{n+l}}} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-y^2) H_n \left(y + \frac{z_{10}}{\sqrt{2}}\right) H_l \left(y + \frac{z_{01}}{\sqrt{2}}\right). \end{aligned}$$

Используя эти соотношения, несложно показать, что

$$\int_0^{\pi} d\varphi I_{lm} I_{pn} = 2\pi \delta_{p,n-m+l} C_{m,l}^{n,n-m+l},$$

$$C_{m,l}^{n,n-m+l} = \exp(-x) z_{ml} z_{n,n-m+l}^*,$$

$$C_{m,l}^{m,l} = K_{ml} = K_{ln} = \exp(-x) z_{ml} z_{ml}^*,$$

$$\int_0^{\infty} C_{ml}^{n,n-m+l} dx = \delta_{nm}.$$

Список литературы

- [1] E.N. Adams, T.D. Holstein. J. Phys. Chem., **10**, 254 (1959). [Русск. пер. Э.Н. Адамс, Т.Д. Гольштейн, в сб.: *Вопросы квантовой теории необратимых процессов* (М., ИЛ, 1961) с. 255].
- [2] R. Kubo, N. Hasegawa, N. Hashitdume. J. Phys. Soc. Japan, **14**, 56 (1959). [Русск. пер. Р. Кубо, Х. Хасегава, Н. Хашитдуме, в сб.: *Вопросы квантовой теории необратимых процессов* (М., ИЛ, 1961) с. 89].
- [3] P.N. Agyes, L.M. Roth. Phys. Chem. Sol., **12**, 89 (1959).
- [4] С.С. Мурзин. УФН, **180**, 387 (2000).
- [5] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984) гл. 14.
- [6] С.С. Мурзин, П.В. Попов. Письма ЖЭТФ, **58**, 280 (1993).
- [7] В.Э. Каминский. ФТП, **36**, 1360 (2002).
- [8] V.E. Kaminskii. Phys. Rev. B, **67**, 085 201 (2003).
- [9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1989) гл. 15, с. 747.
- [10] А.И. Ахиезер, С.В. Пелетминский. *Методы статистической физики* (М., Наука, 1977) гл. 3–5.
- [11] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1977) гл. 7.
- [12] L.M. Falicov, M. Quevas. Phys. Rev., **164**, 1025 (1967).

Редактор Т.А. Полянская

Conductivity tensor and electron momentum relaxation frequency on the ionized impurity in a magnetic field: density matrix method

V.E. Kaminskii

Institute of UHF Semiconductor Electronics,
Russian Academy of Sciences,
117105 Moscow, Russia

Abstract In a homogeneous semiconductor, using perturbation theory, the Liouville equation solution for one-electron density matrix is obtained in a magnetic field. The expressions for conductivity tensor and momentum relaxation rate of the ionized impurity are obtained. The obtained results provide quite accurate description of the observed in a number of works the non-degenerate electron gas dependences on a concentration and a magnetic field in the quantum limit. These dependences found no explanation in the framework of the modern theory of magnetoresistance. The explanation of degenerate electron gas conductivity tensor components temperature dependences is given in the quantum limit by a magnetic field.