

Низкотемпературные аномалии подвижности и осцилляций Шубникова–де Гааза при резонансном рассеянии электронов на донорных примесях в полупроводниках. Объяснение на основе подхода Фриделя

В.И. Окулов, Л.Д. Сабирзянова, К.С. Сазонова

Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620219, Россия
E-mail: okulov@imp.uran.ru

С.Ю. Паранчич

Черновицкий национальный университет, ул. Коцюбинского, 2, г. Черновцы, 58012, Украина

Статья поступила в редакцию 26 ноября 2003 г.

Исследованы проявления резонансного рассеяния электронов на донорных примесях в низкотемпературной проводимости полупроводников в условиях, когда донорный резонансный уровень энергии примесей расположен в полосе проводимости. Показано, что на основе применения теории резонансного рассеяния в рамках подхода Фриделя можно объяснить стабилизацию концентрации электронов, максимум их подвижности и минимум температуры Дингла в зависимости от концентрации донорных примесей, а также связанные с резонансом аномальные температурные зависимости подвижности. Получены новые экспериментальные данные по концентрации, подвижности и температуре Дингла электронов в кристаллах селенида ртути с примесями железа и установлено, что они, как и уже известные результаты, вполне согласуются с закономерностями, предсказываемыми в развитом подходе. Обсуждается соотношение данного подхода с использовавшейся до сих пор интерпретацией концентрационного максимума подвижности и приведены аргументы в пользу его применимости.

Досліджено проявлення резонансного розсіяння електронів на донорних домішках у низькотемпературній провідності напівпровідників в умовах, коли донорний резонансний рівень енергії домішок розташований у смузі провідності. Показано, що на основі застосування теорії резонансного розсіяння у рамках підходу Фріделя можливо пояснити стабілізацію концентрації електронів, максимум їх рухливості та мінімум температури Дінгла в залежності від концентрації донорних домішок, а також зв'язані з резонансом аномальні температурні залежності рухливості. Отримано нові експериментальні дані з концентрації, рухливості та температури Дінгла електронів у кристалах селеніду ртуті з домішками заліза та установлено, що вони, як і вже відомі результати, цілком узгоджуються з закономірностями, що прогнозовано у розвинутому підході. Обговорюється співвідношення даного підходу з інтерпретацією концентраційного максимуму рухливості, що використано до цієї пори, та приведено аргументи на користь його застосування.

PACS: 72.10.Fk, 72.20.Dp, 72.80.Ey

Введение

Одна из интересных и сложных проблем физики электронных свойств полупроводников связана с

трактовкой проявлений энергетических уровней донорных примесей в зоне проводимости. Согласно существующим представлениям, взаимодействие элек-

тронов проводимости с примесными ионами при энергиях, близких к энергии донорного уровня, имеет резонансный характер и описывается квантово-механической теорией резонансного рассеяния. Эффекты, связанные с проявлениями таких резонансов, при низких температурах становятся заметными, когда с ростом концентрации примесей энергия Ферми достигает энергии примесного уровня. При дальнейшем росте концентрации примесей энергия Ферми и концентрация электронов стабилизируются, т.е. почти не изменяются с ростом концентрации доноров. Наблюдаемые в таких условиях закономерности до сих пор во многом не поняты. Это относится в особенности к бесцелевым полупроводниковым системам с примесями переходных элементов. Среди таких систем наибольшее внимание привлекал селенид ртути с примесями железа, в котором исследовали максимум электронной подвижности в зависимости от концентрации примесей и наблюдали другие необычные эффекты, связанные с влиянием ионов железа [1,2]. Исследователи, занимавшиеся объяснением наблюдавшихся аномалий, не увидели возможности объяснить их непосредственным проявлением резонансного рассеяния электронов, полагая, что оно может приводить лишь к падению подвижности. В связи с этим использовались модели, в основу которых было положено предположение о существовании связанных состояний электронов на примесных ионах и их пространственном упорядочении [3,4]. Однако обосновать такое предположение для систем, в которых примесные состояния сильно связаны с проводящими, затруднительно. В то же время следует принять во внимание тот факт, что в условиях стабилизации концентрации электронов с ростом числа примесей эффективный заряд отдельной примеси уменьшается, и это может привести к максимуму подвижности [5]. Таким образом, является актуальным детальное исследование эффектов резонансного рассеяния электронов в условиях стабилизации их концентрации в полупроводнике с донорными примесями. Решению этой задачи посвящена настоящая работа. На основе теории резонансного рассеяния в рамках подхода Фриделя дано описание стабилизации концентрации электронов и выяснено, какие предсказания относительно концентрационных и температурных зависимостей электронной подвижности вытекают из хорошо известных теоретических представлений. Затем приведены новые экспериментальные данные по концентрационным и температурным зависимостям электронной подвижности и температуре Дингла в осцилляциях Шубникова–де Гааза, полученные нами на селениде ртути с примесями железа, и показано их соответствие данным теоретическим предсказаниям.

Стабилизация концентрации и подвижность электронов при резонансном рассеянии

Рассмотрим слабо легированный полупроводник с однократно ионизованными примесями, имеющими в зоне проводимости резонансные уровни энергии ε_d . Среднюю электронную плотность $n(\varepsilon)$, зависящую от энергии электрона ε , можно записать в виде следующей суммы:

$$n(\varepsilon) = n_e(\varepsilon) + n_i z(\varepsilon), \quad (1)$$

в которую входит концентрация электронов в зоне проводимости $n_e(\varepsilon)$ и слагаемое, пропорциональное концентрации примесей n_i и описывающее вклад локализованной на примесях электронной плотности. Принимая изотропную модель для энергетического спектра электронов и рассеивающего потенциала, функцию $z(\varepsilon)$ можно выразить в виде линейной комбинации фаз рассеяния для определенных значений орбитального момента [6]. Вдали от резонанса при низких энергиях ($\varepsilon \ll \varepsilon_d$) величина $z(\varepsilon)$ равна нулю, поскольку локализованного вклада в $n(\varepsilon)$ нет, а при высоких энергиях ($\varepsilon \gg \varepsilon_d$) локализованный вклад в $n(\varepsilon)$ близок к максимальному и величина $z(\varepsilon)$ близка к единице. Эти условия приводят к известным правилам сумм Фриделя для фаз рассеяния [6]. В окрестности резонанса функция $z(\varepsilon)$ выражается через резонансную фазу рассеяния $\delta_d(\varepsilon)$ и имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} z(\varepsilon) &= (1/\pi)\delta_d(\varepsilon) = \\ &= 1/2 + (1/\pi) \operatorname{arctg} [(\varepsilon - \varepsilon_d) / \Delta], \\ &|\varepsilon - \varepsilon_d| \leq \Delta, \end{aligned} \quad (2)$$

где Δ — ширина резонанса, малая по сравнению с ε_d . Влияние резонанса проявляется в длине свободного пробега $\Lambda(\varepsilon)$, которая известным образом выражается через фазы рассеяния. В окрестности резонанса нерезонансные фазы малы по сравнению с резонансной, и для величины $\Lambda^{-1}(\varepsilon)$ можно получить следующую простую формулу:

$$\Lambda^{-1}(\varepsilon) = \Lambda_m^{-1} [a + \sin^2(\delta_d(\varepsilon) - \varphi)], \quad (3)$$

где параметры Λ_m , a и φ практически не изменяются с энергией на интервале порядка Δ . Малые константы a и φ описывают вклады нерезонансных фаз, причем фаза φ отражает отличие транспортного времени релаксации от времени жизни электронного состояния. При определении температуры Дингла в формуле, аналогичной (3), следует положить $\varphi = 0$ и учесть возможное отличие константы a .

Рассматривая основное состояние (температура $T = 0$, энергия ε равна энергии Ферми ε_F) и считая,

что все электроны происходят от учитываемых доноров, в равенстве (1) следует положить $n(\epsilon_F) = n_i$. Тогда концентрация электронов проводимости $n_e(\epsilon_F)$ зависит от соотношения энергии Ферми ϵ_F и резонансной энергии ϵ_d . Вдали от резонанса при $\epsilon_F \ll \epsilon_d$ справедливо обычное равенство числа электронов числу доноров. С возрастанием концентрации примесей достигается равенство $\epsilon_F = \epsilon_d$, при выполнении которого в формуле (1) имеем $z(\epsilon_F) = 1/2$, так что $n_i = 2n_e(\epsilon_d)$. Резонансные значения энергии Ферми ϵ_d и концентрации проводящих электронов $n_e(\epsilon_d) = n_0$ мало отличаются от предельных значений, к которым медленно стремятся величины ϵ_F и $n_e(\epsilon_F)$ при дальнейшем росте концентрации доноров. Таким образом уравнение

$$n_i = n_e(\epsilon_F) + n_i \delta_d(\epsilon_F) / \pi \quad (4)$$

описывает эффект стабилизации концентрации электронов и энергии Ферми с ростом концентрации донорных примесей выше значения $2n_0$.

В пределах применимости формулы (2) в окрестности резонанса в формуле (4) можно положить $n_e(\epsilon_F) \approx n_0$, и резонансная фаза оказывается равной $\pi(1 - n_0/n_i)$. Используя это, с помощью формулы (3) можно получить электронную подвижность $\mu(T)$ при $T = 0$ в следующем виде:

$$\mu(0) = \mu_0(2n_0/n_i)[a + \sin^2(\pi n_0/n_i + \varphi)]^{-1}. \quad (5)$$

Это выражение описывает концентрационную зависимость подвижности, содержащую минимум вблизи резонанса $n_i \approx 2n_0$ (значение, близкое к константе μ_0) и максимум при существенно больших значениях концентрации примесей. Положение максимума и максимальное значение подвижности являются медленно меняющимися функциями параметров a и φ , причем изменение параметра φ не приводит к качественным особенностям, и поэтому обратное время жизни электронных состояний имеет подобную же зависимость.

Температурная зависимость подвижности $\mu(T)$ в области стабилизации концентрации электронов при низких температурах описывается следующей формулой:

$$\mu(T)/\mu(0) = \int d\epsilon [\Lambda(\epsilon)/\Lambda(\epsilon_F)] (-\partial f/\partial \epsilon), \quad (6)$$

где f — функция Ферми, а область интегрирования ограничивается окрестностью резонанса, в которой справедливы приведенные выше формулы (3)–(5). Характерная особенность данной температурной зависимости состоит в том, что подвижность вблизи концентрационного максимума выходит на постоянное значение $\mu(0)$ при значительно более низкой температуре, чем подвижность вне максимума. Мас-

штаб спадания подвижности с ростом температуры в основном определяется параметром $\Delta(\Lambda_m/\Lambda(\epsilon_F))$. Именно такое поведение подвижности и сам концентрационный максимум относятся к основным эффектам резонансного рассеяния электронов на донорных примесях.

Экспериментальные данные на селениде ртути с примесями железа

Закономерности, которые, как показано выше, предсказываются теорией резонансного рассеяния, известны и наблюдались в кристаллах селенида ртути с примесями железа. Подробное изложение экспериментальных данных и их обсуждение приведены в обзорных статьях [1,2]. Для проведения их количественного сопоставления с предлагаемой теорией нами выполнены новые измерения концентрации, холловской подвижности электронов и температуры Дингла шубниковских осцилляций в ряде кристаллов HgSe:Fe с различной концентрацией примесных атомов железа. При проведении измерений и приготовлении кристаллов использовались методики, описанные в предыдущих работах, цитированных в статье [2]. Полученные результаты приведены на рис. 1–4.

На рис. 1 показаны данные по концентрации электронов в окрестности предельного значения $n_0 = 4,6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, которое практически совпадает с полученным в ряде работ, цитируемых в статьях [1,2]. Подгоночная кривая построена по формуле (1) при $\epsilon = \epsilon_F$, $n(\epsilon_F) = n_i$ с учетом выражения (2) и отвечает $\Delta = 3 \text{ К}$.

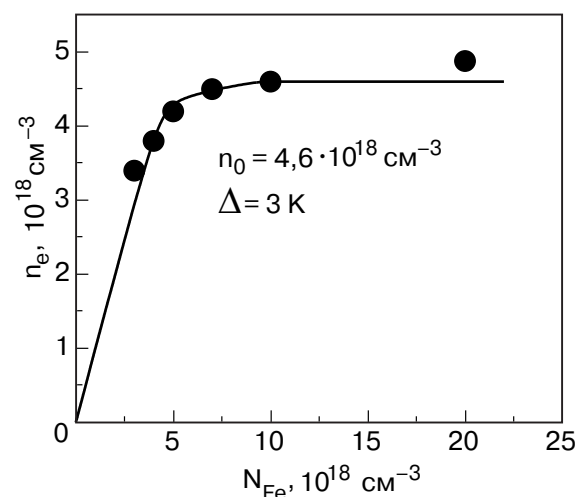


Рис. 1. Зависимость концентрации электронов n_e от концентрации примесей железа N_{Fe} в HgSe:Fe при $T = 4,2 \text{ К}$. Точки — экспериментальные данные, сплошная линия получена по формулам (1), (2) при $\epsilon = \epsilon_F$.

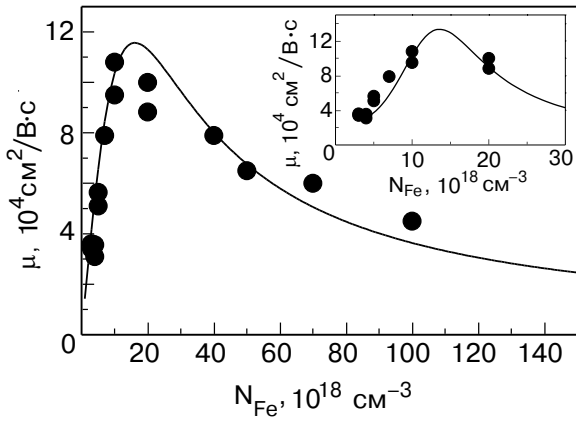


Рис. 2. Зависимость подвижности электронов μ от концентрации примесей железа N_{Fe} при $T = 4,2$ К. Точки — экспериментальные данные. Кривая получена по формуле (5) при $a = 0,2$, $\varphi = 0,1$ в приближении $n_0 / n_i \ll 1$, на вставке — подгонка области максимума при близких значениях параметров.

Данные по концентрационной и температурной зависимостям подвижности, приведенные на рис. 2, 3, также хорошо согласуются с известными. Их подгонка кривыми, построенными по формулам (3)–(6),

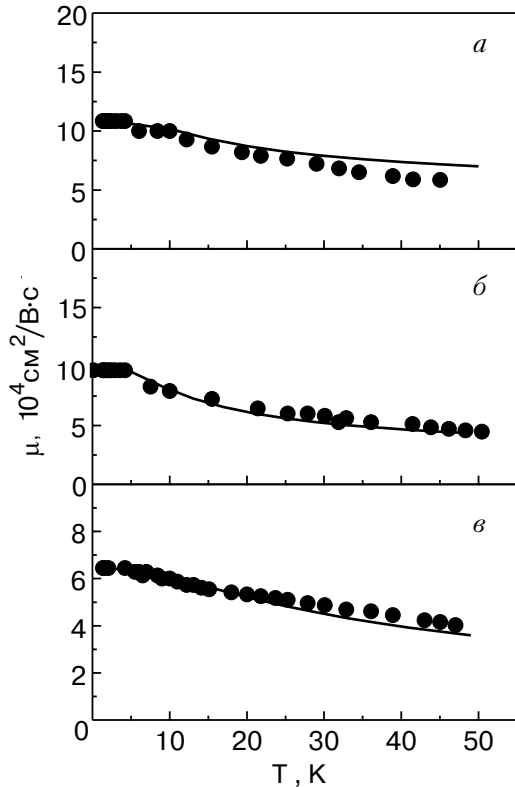


Рис. 3. Температурные зависимости подвижности электронов при $T = 4,2$ К для трех образцов HgSe:Fe при различной концентрации примесей железа N_{Fe} , 10^{19} см $^{-3}$: 1 (а); 2 (б); 5 (в). Точки — экспериментальные данные, кривые получены по формуле (6).

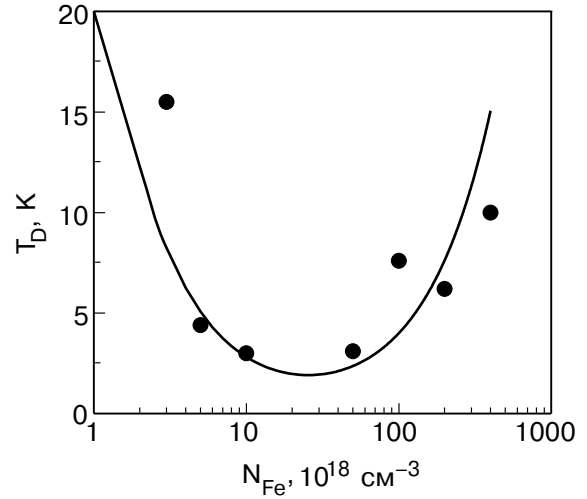


Рис. 4. Зависимость температуры Дингла T_D от концентрации примесей железа N_{Fe} для образцов HgSe:Fe. Точки — экспериментальные данные, сплошная линия получена по формуле (3) при $\varphi = 0$, $a = 0,06$.

проводилась одним набором параметров, в который, кроме величин μ_0 , a и φ , входила содержащаяся в n_0 концентрация электронов с неконтролируемых доноров, которая была принята равной $2 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$, что соответствует известным оценкам. Параметры $a = 0,2$ и $\varphi = 0,1$ найдены подгонкой данных на рис. 2 кривой, полученной по формуле (5) в предположении о малости величины n_0 / n_i . Вставка на рис. 2 иллюстрирует несущественное изменение положения и высоты максимума подвижности при более точной подгонке.

Осцилляции Шубникова–де Гааза были исследованы в магнитных полях напряженностью до 50 кЭ в интервале температур $1,3 \text{ К} \leq T \leq 4,2 \text{ К}$ на тех же образцах HgSe:Fe с различным содержанием железа, на которых изучали подвижность электронов. Из зависимостей амплитуд осцилляций от магнитного поля были найдены температуры Дингла T_D . В соответствии с поставленной в настоящей работе задачей мы не обсуждаем возможную зависимость от рассеяния электронов других параметров осцилляций (периодов, спинового расщепления и др.), поскольку для этого требуются дополнительные исследования. Для определения T_D проводили обработку данных на таких кристаллах, у которых зависимость амплитуд осцилляций от поля была только монотонно возрастающей, что свидетельствовало об отсутствии узлов биений в осцилляционной картине при выбранном направлении поля и тока через образец. На рис. 4 приведены значения температуры Дингла, показывающие ее зависимость от концентрации примесей. Подгоночная кривая проведена по формуле вида (3) при $\varepsilon = \varepsilon_F$, $\varphi = 0$, $a = 0,06$.

Положение минимума концентрационной зависимости T_D коррелирует с максимумом подвижности.

Обсуждение результатов

Согласно полученным нами результатам, можно считать, что экспериментальные данные по аномалиям подвижности и температуры Дингла в кристаллах HgSe:Fe хорошо описываются в рамках изложенных выше теоретических представлений, отвечающих обобщенному подходу Фриделя. В проводившихся до сих пор исследованиях, отраженных в обзорных статьях [1,2], интерпретация наблюдаемого максимума подвижности основывалась на другом подходе, основы которого сформулированы в работе [3]. Его главное предположение состояло в допущении одновременного существования при резонансе $\varepsilon_F = \varepsilon_d$ ионизованных и не ионизованных донорных состояний. Такое предположение по существу означает, что состояние электрона на доноре считается не резонансным, а связанным, подобно состояниям в запрещенной зоне кристалла. При применении подхода для описания наблюдаемого максимума подвижности дополнительно с помощью модельных расчетов обосновывалось существование упорядочения ионизованных доноров [3,1,4] и других предположений о структуре примесной системы. В целом при детальном анализе можно убедиться, что такая интерпретация максимума подвижности содержит модельные допущения, достаточное обоснование которых получить трудно. В то же время оказывается, что экспериментальным фактам скорее всего отвечает представление о резонансном (в обычном понимании этого термина квантово-механической теории рассеяния) состоянии электрона на примеси и соответственно одинаковом частично ионизованном состоянии всех доноров. На таком представлении основан подход, изложенный в настоящей работе. В его рамках для объяснения поведения подвижности нет необходимости предполагать упорядочение доноров, существование которого в кристаллах HgSe:Fe на настоящий момент вряд ли может считаться доказанным. Но, конечно, для того, чтобы достичь строго обоснованного определения применимости одного из двух подходов для какой-либо системы, следовало бы обратиться к данным таких экспериментов, при интерпретации которых можно однозначно различить эффекты резонансных и связанных состояний. Сложность этой проблемы состоит в том, что для качественной интерпретации отдельных, например, локальных экспериментов упомянутое различие не имеет значения и исследователи его не учитывают. Поэтому и для системы HgSe:Fe такой способ пока применить затруднительно, поскольку в проведен-

ных экспериментальных исследованиях подобные задачи практически не ставились.

Заключение

Мы показали, что рассеяние электронов на донорных примесях, обладающих резонансным уровнем энергии в зоне проводимости полупроводника, приводит к стабилизации концентрации электронов, максимуму их подвижности и минимуму температуры Дингла в зависимости от концентрации примесей, а также к характерным аномалиям подвижности в зависимости от температуры. Эти эффекты предсказываются теорией резонансного рассеяния при использовании подхода Фриделя. Имеющиеся экспериментальные данные, полученные на кристаллах селенида ртути с примесями железа, как уже известные, так и полученные нами в настоящей работе, хорошо согласуются с упомянутыми предсказаниями.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант №03-02-16246.

1. Z. Wilamowski, *Acta Phys. Pol.* **A77**, 133 (1990).
2. И.М. Цидильковский, *УФН* **35**, 85 (1992).
3. J. Mycielski, *Solid State Commun.* **60**, 165 (1986).
4. I.M. Tsidilkovski and I.G. Kuleev, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 625 (1996).
5. G.A. Alshanskii, V.L. Konstantinov, A.V. Korolyov, E.A. Neifeld, V.I. Okulov, S.U. Paranchich, and L.D. Sabirzyanova, *Phys. Met. Metallogr.* **93**, Suppl. 1, 142 (2002).
6. J. Friedel, *Nuovo Cimento*, Suppl. 2, 287 (1958).

Low temperature anomalies of mobility and Shubnikov–de Haas oscillations at electron resonance scattering by donor impurities in semiconductors. Interpretation on the basis of Friedel's approach

V.I. Okulov, L.D. Sabirzyanova, K.S. Sazonova, and S.Yu. Paranchich

The anomalies of electron mobility in a semiconductor doped with impurities, the donor resonant energy level of which lies in the conduction band are studied. The use of the resonance scattering theory in the framework of Friedel's approach allowed us to describe the stabilization of conduction electron concentration, the maximum of their mobility and the minimum of the Dingle temperature depending on impurity concentration as well as the anomalous temperature dependences of mobility related to the resonance.

It is shown that the experimental data on concentration, mobility and Dingle temperature of electrons in mercury selenide with iron impurities (both already known and those obtained in the present work) are in good agreement with the dependences predicted in the approach deve-

loped. The correlation between the given approach and the interpretation of concentration maximum of mobility used before is made, and the arguments in favour of the former are given.