Письма в ЖЭТФ, том 123, вып. 1, с. 63 – 67

Обменное рассеяние в полупроводниках: эффективный механизм ориентации спинов электронов и ядер

Н. С. Аверкиев[1], *И. В. Рожанский*

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 30 сентября 2025 г.
После переработки 18 ноября 2025 г.
Принята к публикации 20 ноября 2025 г.

В работе исследуется обменное рассеяние электронов на нейтральных донорных примесях в полупроводниках. Показано, что различие сечений в разных спиновых конфигурациях существенно при реалистичных значениях параметров и может играть важную роль в транспортных свойствах полупроводниковых гетероструктур. Обсуждается возможность использования механизма обменного рассеяния для ориентации спинов локализованных электронов и ядер при оптической накачке, что представляет интерес как для фундаментальных исследований, так и для развития спинтроники.

DOI: 10.7868/S3034576626010085

1. Введение. Полупроводники и полупроводниковые структуры пониженной размерности из-за особенностей энергетической структуры открывают широкие возможности для изучения спин-зависимого рассеяния за счет обменного взаимодействия в условиях, когда оно может быть отделено от спин-орбитальных механизмов. Благоприятное соотношение параметров – малая эффективная масса, высокая диэлектрическая проницаемость и возможность варьировать концентрации как нейтральных, так и заряженных примесей – позволяет реализовывать режимы, в которых доминирует рассеяние либо на нейтральных, либо на заряженных центрах. Особенно показательной в этом контексте является фотопроводимость в полупроводниках n-типа проводимости, когда тепловая энергия фотовозбужденных электронов kT меньше энергии ионизации доноров. При таких низких температурах рассеяние электронов происходит преимущественно на нейтральных донорах, тогда как при более высоких температурах – на ионизованных центрах. Особенности в поведении подвижности свободных носителей заряда, обусловленные рассеянием на нейтральных примесях, рассматривались в работах [1–4]. В случае рассеяния электрона на нейтральном доноре в рассеянии участвуют тождественные частицы, одна из которых локализована, поэтому симметрия полной волновой функции существенно влияет на амплитуду рассеяния. Сечение рассеяния в триплетной и синглетной конфигурациях может отличаться существенно [5, 6], и это отличие потенциально чувствительно к спиновой поляризации как электронного газа, так и спиновой поляризации локализованных электронов.

В настоящей работе мы рассматриваем модель обменного рассеяния на нейтральной примеси, локализованное состояние которой описывается в приближении эффективной массы. Для кулоновского потенциала получены аналитические выражения для сечений рассеяния в триплетном и синглетном состоянии электронов. Численный расчет разности сечений рассеяния в различных спиновых каналах в зависимости от величины квазиимпульса налетающей частицы выполнен для кулоновского потенциала и в модели потенциала нулевого радиуса. Обсуждены возможные применения эффекта обменного рассеяния на нейтральных донорах для ориентации спинов ядер и локализованных электронов [7, 8].

2. Теория. Учет обменного взаимодействия при рассеянии электрона на нейтральном доноре соответствует учету симметрии волновой функции, являющейся решением уравнения Шредингера для двух электронов в поле заряженного иона с асимптотиками, соответствующими задаче рассеяния. Симметричная пространственная часть соответствует синглетному спиновому каналу, антисимметричная – триплетному. Соответствующие фазовые сдвиги для рассеяния электрона на атоме водорода были получены с помощью численных расчетов в ряде работ [9–11]. Введем поляризацию сечения, характеризующую относительную разность полных сечений рассеяния в синглетном и триплетном каналах:

$$P = \frac{\sigma^- - \sigma^+}{\sigma^- + \sigma^+}. \qquad (1)$$

[1]e-mail: averkiev.les@mail.ioffe.ru

На рисунке 1 приведены данные для поляризации при малых энергиях, полученные из работы [9]. Для

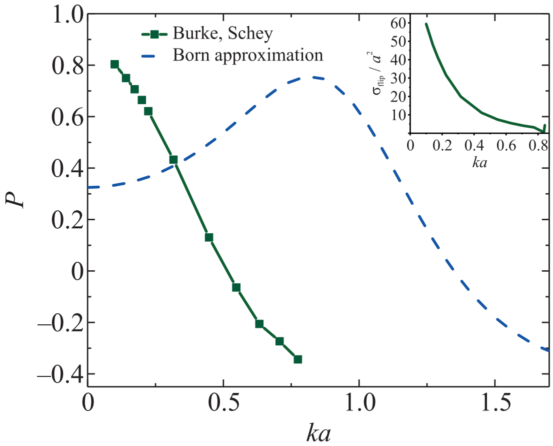

Рис. 1. (Цветной онлайн) Различие полных сечений упругого рассеяния электрона на нейтральном доноре. Штрихованная линия отвечает расчету в борновском приближении, зеленая сплошная линия с квадратами получена из пересчета фазовых сдвигов из работы [9]. На вставке показано сечение переворота спина, вычисленное по данным работы [9]

этого полученные в работе фазовые сдвиги $\delta_0^\pm$ для (преобладающего) s-рассеяния электрона на атоме водорода (с учетом $1s$, $2s$, $2p$ состояний) пересчитаны в сечения согласно выражению

$$\sigma^\pm(k) = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0^\pm(k).$$

Здесь верхние индексы соответствуют синглетному $(+)$ и триплетному $(-)$ каналам рассеяния. Видно, что при малых $ka \lesssim 1$ (k-волновой вектор налетающего электрона, a – эффективный боровский радиус) имеется значительное ($P \sim 0.4–0.8$) по абсолютной величине различие сечений для синглетного и триплетного каналов.

Расчет обменной поляризации сечений можно также провести в борновском приближении [6]. В этом приближении симметризованные волновые функции начального (i) и конечного (f) состояний имеют вид:

$$\Psi_i^\pm(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1}\,\phi(\mathbf{r}_2)\ \pm\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}\,\phi(\mathbf{r}_1)\right],$$
$$\Psi_f^\pm(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_1}\,\phi(\mathbf{r}_2)\ \pm\ e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_2}\,\phi(\mathbf{r}_1)\right],$$

где $\phi(\mathbf{r})$ – волновая функция связанного состояния. Элементы T-матрицы рассеяния даются выражениями [6]:

$$T^{(\pm)} = T_{\rm dir}\ \pm\ T_{\rm exc},$$
$$T_{\rm dir} = \int d^3r_1\,d^3r_2 e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}_1}\,|\phi(\mathbf{r}_2)|^2\,V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2),$$
$$T_{\rm exc} = \int d^3r_1\,d^3r_2 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}_2-\mathbf{k}'\mathbf{r}_1)}\phi(\mathbf{r}_1)\,\phi^*(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2),$$
$$V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = -\frac{e^2}{\varepsilon r_1} + \frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}. \tag{2}$$

Здесь индексы “dir” и “exc” означают прямой и обменный вклады соответственно. Для $1s$ связанного состояния можно получить следующие выражения для амплитуд рассеяния:

$$f_{\rm dir,exc} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}T_{\rm dir,exc},$$
$$f_{\rm dir}(\theta) = \frac{2}{aq^2}\left[1-\left(1+\frac{q^2a^2}{4}\right)^{-2}\right],$$
$$f_{\rm exc}(\theta) = -\frac{2}{a}\int\frac{d^3\mathbf{Q}}{(2\pi)^3Q^2}\ \phi(\mathbf{k}'-\mathbf{Q})\ \phi^*(\mathbf{k}-\mathbf{Q}),$$
$$q = |\mathbf{k}-\mathbf{k}'| = 2k\sin\frac{\theta}{2};\quad \cos\theta = \frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}'}{k^2},$$
$$\phi(q) = \frac{8\sqrt{\pi}a^{3/2}}{(1+a^2q^2)^2}. \tag{3}$$

Здесь $\phi(\mathbf{q})$ – Фурье-образ волновой функции локализованного $1s$ состояния, a – эффективный боровский радиус, где сечение рассеяния выражается обычным образом через амплитуду рассеяния

$$\sigma^\pm = \int d\Omega|f_{\rm dir}\pm f_{\rm exc}|^2. \tag{4}$$

Зависимость величины P от параметра ka представлена на рис. 1. Поляризация P находится в диапазоне $P \approx 0.4-0.8$ при $ka \lesssim 1$ и уменьшается по абсолютной величине до 0.1 при $ka \simeq 5$. Однако в области $ka \lesssim 1$, где поляризация максимальна, результаты такого расчета значительно отличаются от более точного расчета фазовых сдвигов. Потенциал нейтрального донора образует мелкое связанное состояние для дополнительного электрона (образуя D^- центр), поэтому рассеяние носит резонансный характер, что существенным образом влияет на интерференцию прямого и обменного рассеяния, и применимость борновского приближения нарушается. При больших энергиях $ka \sim 5$, где борновское приближение более точно, поляризация еще заметно отлична от нуля $|P| \approx 10\,\%$. В двумерном случае для тонкой пленки, в которой ее толщина много меньше эффективного боровского радиуса a, для экранированного кулоновского потенциала донора (с точностью до квадрата отношения толщины пленки к a) – аналогично объемному случаю, где трехмерный радиус-вектор $\mathbf{r}$ следует заменить на двумерный радиус-вектор в плоскости пленки ρ. Поляризация сечений рассеяния в триплетном и синглетном каналах в борновском приближении в ведущем порядке совпадает с трехмерным случаем, это согласуется с результатами работы [6].

3. Обсуждение. Нейтральные примеси могут вносить значительный или даже главный вклад в подвижность в полупроводниковых гетероструктурах [3]. Приведенный выше расчет показывает, что чувствительность сечения рассеяния на нейтральном доноре к спиновому состоянию взаимодействующих при рассеянии электронов определяется величиной ka.

В таблице 1 приведены оценки параметров для объемного Si и двумерных структур из GaAs и MoS_2. Видно, что параметр $k_F a$ в расчете на одну долину в актуальных случаях оказывается порядка единицы, что указывает на эффективность предложенного обменного механизма рассеяния.

Таблица 1. Параметры материалов: размерность, долинное вырождение g_v, эффективный боровский радиус a, фермиволновой вектор k_F и произведение $k_F a$ при заданной концентрации электронов

Material	2D/3D	g_v	a (nm)	k_F (nm^{-1})	$k_F a$	Density
Si	3D	6	3.2	0.017	0.054	$10^{18}\ \mathrm{cm}^{-3}$
GaAs	2D	1	10.0	0.079	0.79	$10^{12}\ \mathrm{cm}^{-2}$
MoS_2	2D	2	1.05	0.056	0.059	$10^{12}\ \mathrm{cm}^{-2}$

Существенное различие сечения рассеяния для триплетной и синглетной конфигурации рассеиваемого и локализованного электронов также позволяет предложить механизм ориентации локализованных электронов и ядер. Действительно, T-матрицу рассеяния можно представить в виде

$$T = T^+ P^+ + T^- P^-, \tag{5}$$

$$P^+ = |0,0\rangle \langle 0,0| ; \quad P^- = \sum_{m_z=-1,0,1} |1, m_z\rangle \langle 1, m_z|,$$

где P^+ и P^- – проекторы на синглетное и триплетное состояние двух частиц, первый индекс обозначает суммарный спин состояния, а второй, m_z – проекцию спина на ось z. Рассеяние с переворотом спина описывается матричным элементом

$$T_{\text{flip}} = \langle \downarrow\uparrow | T^+ P^+ + T^- P^- | \uparrow\downarrow \rangle = \frac{T^- - T^+}{2}.$$

Таким образом, амплитуда и сечение рассеяния с переворотом спина локализованного электрона

$$f_{\text{flip}} = -f_{\text{exc}}; \quad \sigma_{\text{flip}} = \int d\Omega\, |f_{\text{exc}}|^2. \tag{6}$$

Можно ввести скорость переходов с переворотом спина γN, где N – концентрация доноров. Тогда

$$\gamma N = N \frac{2\pi m k}{\hbar^3} \int \frac{d\Omega}{(2\pi)^3} |T_{\text{flip}}|^2 = N v \sigma_{\text{flip}}, \tag{7}$$

где v – скорость рассеиваемых электронов. На вставке к рис. 1 показана зависимость сечения σ_{flip} (в единицах a^2) от параметра ka, вычисленная из данных работы [9]. При концентрации $N = 10^{16}\ \text{см}^{-3}$ и тепловой скорости при температуре $T = 2\,\text{К}$ для характерного значения $\sigma = 30a^2$ при $a = 10\,\text{нм}$ получим $\gamma N \sim 10^{12}\ \text{с}^{-1}$.

Рассмотрим легированный полупроводник при достаточно низкой температуре так, что примеси (доноры) в основном нейтральны. При межзонном оптическом возбуждении циркулярнополяризованным светом в кристалле возникают свободные электроны и дырки, приводящие к конечной проводимости образца. Если доля нейтральных доноров по-прежнему велика, то спин-зависимое обменное рассеяние будет способствовать передаче спина от электронов проводимости локализованным электронам и, вследствие сверхтонкого взаимодействия, в ядерную подсистему. Экспериментальное наблюдение этого эффекта представляется интересным как с фундаментальной точки зрения, так и для развития полупроводниковой спинтроники.

Рассмотрим простейшую ситуацию, характерную для полупроводниковых структур на основе GaAs. Пусть имеется легированный полупроводник n-типа, с концентрацией доноров меньшей концентрации перехода Мотта, при низких температурах таких, что в равновесии все электроны локализованы на донорах, примеси нейтральны и их ядра обладают спином. Между спином локализованного электрона и спином ядра имеется контактное взаимодействие так, что ориентация электронного спина будет передаваться спину ядра. Поскольку при низких температурах взаимодействие спина ядра с решеткой неэффективно, можно считать, что спин ядра не релаксирует, и спиновая ориентация локализованного электрона полностью передается спину ядра. (Заметим, что это справедливо и для спинов ядер основной решетки, находящихся на расстоянии порядка эффективного боровского радиуса от примеси).

Пусть на образец падает излучение, поляризованное по кругу и приводящее к возникновению свободных электронов и дырок. Тогда фотовозбужденные носители окажутся поляризованными по спину, но у дырок, в силу особенностей валентной зоны время спиновой релаксации короткое, поэтому эффекты спин-зависимого рассеяния дырок ниже рассматриваться не будут. Электроны будут рекомбинировать с дырками и рассеиваться на нейтральных донорах. За счет рассмотренного механизма спин-зависимого рассеяния, спин фотовозбужденных электронов будет передаваться спину локализованного электрона. Соответствующие кинетические уравнения для плотности проекции спина на единицу объема свободных электронов, S, и локализованных электронов, J, имеют вид

$$\frac{dn}{dt} = g - n^2\alpha => n = \sqrt{g/\alpha}; \quad g = g_\downarrow + g_\uparrow, \tag{8}$$

$$\frac{dS}{dt} = \Delta g - \frac{S}{\tau_s} - n\alpha S + \gamma\left(nJ - NS\right), \tag{9}$$

$$\frac{dJ}{dt} = -\frac{J}{\tau_0} - \gamma(nJ - NS); \ N = \text{const}; \ n = \sqrt{\frac{g}{\alpha}}. \tag{10}$$

Здесь $S = n_\uparrow - n_\downarrow$, $n_\uparrow$ и $n_\downarrow$ – концентрации фотовозбужденных электронов со спином вверх и вниз, $J = N_\uparrow - N_\downarrow$, $N_\uparrow$ и $N_\downarrow$ – концентрации нейтральных доноров с электронами со спином вверх и вниз, $N = N_\uparrow + N_\downarrow$, $n = n_\uparrow + n_\downarrow$, $g_\uparrow$ и $g_\downarrow$ – скорость генерации свободных электронов со спином вверх и вниз, считается, что $N \gg n$. Параметр γ, связанный с сечением спин-флип рассеяния (6), определяет эффективность рассмотренного механизма, и считается, что спин локализованного и свободного электрона равны $1/2$, α – коэффициент межзонной излучательной рекомбинации, τ_0 и τ_s – времена спиновой релаксации локализованного электрона и свободного электрона, не обусловленные обменным взаимодействием. Δg – разность темпов генерации свободных электронов со спинами вверх и вниз, $n^2 = g/\alpha$, g – суммарный темп генерации электрон-дырочных пар. Эти уравнения в стационарном случае легко решаются, ниже, для наглядности, проанализирован случай $\tau_s^{-1} = 0$. Это предположение означает, что основным механизмом релаксации спина свободных электронов будет обменное рассеяние, определяемое параметром $g\gamma N$. Эффективность механизма спиновой релаксации Дьяконова–Переля может быть подавлена как малостью спин-орбитального взаимодействия, так и относительно малой энергией свободных электронов при низких температурах. Тогда

$$S = \frac{\Delta g\left(1 + \tau_0\gamma n\right)}{\gamma N + n\alpha\left(1 + \gamma n\tau_0\right)};$$
$$J = \frac{\gamma N\tau_0\Delta g}{\gamma N + n\alpha\left(1 + \gamma n\tau_0\right)}. \tag{11}$$

При разумных значения g условие $N \gg n$ выполняется, и поскольку параметр γ не имеет малостей, то величина γN по порядку величины предсталяет собой обратное время релаксации импульса, которое является самым коротким. Тогда $\gamma N \gg n\alpha$, $\gamma n\tau_0 \sim 1$ и выражения для S и J примут вид:

$$S = \frac{\Delta g\left(1 + \tau_0\gamma n\right)}{\gamma N}; \quad J = \tau_0\Delta g; \quad J \gg S. \tag{12}$$

Из этих выражений видно, что даже при относительно небольшой величине спиновой поляризации фотовозбужденных электронов S (Δg делится на большую величину γN), можно достичь значительной спиновой ориентации локализованных электронов J, и, следовательно, эффективность поляризации спинов ядер посредством такого механизма будет высокой. Количественно степень поляризации локализованных электронов для n-GaAs при температуре $T = 2$ К можно оценить, используя данные из [12]. Согласно [12], при мощности возбуждающего света $W = 0.2$ Вт/см^2 число генерируемых пар в секунду в единице объема $g \approx 10^{21}$ с$^{-1}$ см$^{-3}$, $\Delta g = g$, концентрации нейтральных доноров $N = 10^{16}$ см$^{-3}$. Тогда при энергии ионизации примеси 5 мэВ концентрации свободных электронов и заряженных доноров будут 10^9 см$^{-3}$, концентрация фотовозбужденных электронов при $\alpha = 10^{-7}$ см^3 с$^{-1}$ будет $n = 10^{14}$ см$^{-3}$. Параметр $(\gamma N)^{-1}$ определяет как эффективность обменного рассеяния, так и время упругого рассеяния электрона на нейтральной примеси, которое, согласно (7), равно 10^{-12} с. Это дает для средней плотности спина $S = 2 \cdot 10^{13}$ см$^{-3}$, для среднего спина на один электрон $S/n = 2 \cdot 10^{-1}$, для среднего спина локализованного электрона $\tau_0 = 10^{-7}$ с, $J/N = 0.2$, где τ_0 – время спиновой релаксации локализованного электрона за счет других механизмов. Параметры GaAs, использованные выше, соответствуют их значениям из литературных данных и демонстрируют эффективность обменного рассеяния в ориентации спина локализованных носителей заряда.

Изученный здесь механизм обменного рассеяния имеет кулоновскую природу и, в отличие от спин-орбитальных эффектов, не содержит релятивистской малости. Это открывает возможности ориентации не только электронов, локализованных на доноре, но и возможности стационарной ориентации спина ядра примеси или атомов основной решетки. Экспериментальное наблюдение позволит устанавливать времена релаксации спинов электронов и ядер без введения дополнительных параметров, связанных с механизмом рассеяния.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе. Моделирование спиновой поляризации выполнено Н. С. Аверкиевым в рамках проекта Российского научного фонда # 25-12-0093.

Конфликт интересов Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. N. Sclar, "Neutral impurity scattering in semiconductors", Phys. Rev. **104**, 1559 (1956).
2. C. Erginsoy, "Neutral impurity scattering in semiconductors", Phys. Rev. **79**, 1013 (1950).
3. H. Mei, G.-J.Wang, G. Yang, and D.-M. Mei, "The impact of neutral impurity concentration on charge drift mobility in n-type germanium", J. Instrum. **12**, P07003 (2017).
4. T. C. McGill and R. Baron, "Neutral impurity scattering in semiconductors", Phys. Rev. B **11**, 5208 (1975).
5. H. S. W. Massey and B. L. Moiseiwitsch, "The scattering of electrons by hydrogen atoms", Phys. Rev. **78**, 180 (1950).
6. G. D. Mahan and R. Woodworth, "Spin-exchange scattering in semiconductors", Phys. Rev. B **78**, 075205 (2008).
7. L. Qing, J. Li, I. Appelbaum, and H. Dery, "Spin relaxation via exchange with donor impurity-bound electrons", Phys. Rev. B **91**, 241405 (2015).
8. K. V. Kavokin, "Spin relaxation of localized electrons in n-type semiconductors", Semicond. Sci. Technol. **23**, 114009 (2008).
9. P. G. Burke and H. M. Schey, "Elastic scattering of low-energy electrons by atomic hydrogen", Phys. Rev. **126**, 147 (1962).
10. A. Temkin, "Nonadiabatic theory of electron-hydrogen scattering", Phys. Rev. **126**, 130 (1962).
11. P. G. Burke and K. Smith, "The low-energy scattering of electrons and positrons by hydrogen atoms", Rev. Mod. Phys. **34**, 458 (1962).
12. M. D. Ragoza, N. V. Kozyrev, S. V. Nekrasov, B. R. Namozov, Y. G. Kusrayev, N. Bart, A. Ludwig, and A. D. Wieck, "Electrical resistance associated with the scattering of optically oriented spin-polarized electrons in n-GaAs", Phys. Rev. B **109**, L121203 (2024).