ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЯХ ТИПА $A^{III}B^V$

А. П. ДЖОТЯН

Теоретически рассмотрена плотность электронных состояний в полупроводниковых соединениях со сложным законом дисперсии с учетом взаимодействия носителей заряда с примесью. Общая формула исследована для двух частных значений энергии: у уровня Ферми и дна зоны проводимости. Полученные результаты применимы к полупроводниковым соединениям типа $A^{III}B^V$, например, к антимониду индия InSb .

Хорошо известно [1], что одна из особенностей сильно легированного полупроводника состоит в возможном отсутствии закона дисперсии. С другой стороны, такая характеристика как плотность состояний сохраняет свой точный смысл и для неупорядоченных систем.

Именно в таком аспекте рассмотрена плотность состояний в работе [1], где и вычислена последняя для стандартного (затравочного) закона дисперсии. Между тем, как это следует из результатов строгих теоретических и экспериментальных исследований, вид закона дисперсии может значительно отклониться от параболического [1] в полупроводниковых соединениях типа $A^{III}B^V$. Соответственно представляет интерес определение плотности состояний для сложного закона дисперсии электронов проводимости [2] с учетом взаимодействия носителей с примесью (нетрудно обобщение результатов для случая дырочной проводимости [1]). Полупроводник предполагается сильно легированным в смысле работы [1],

$$\lambda = (a_0 n^{1/2})^{-1} \ll 1, \quad (1)$$

где a_0 — боровский радиус в кристалле, n — концентрация электронов. Условие (1) выполняется для ограниченного числа полупроводников. Для InSb (1) удовлетворяется из-за малости эффективной массы электрона ($m_n^* = 0,03 m_0$, $\epsilon = 17$, $n = 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $\lambda = 0,07$).

Возьмем закон дисперсии в следующем виде:

$$\vec{W}(\vec{k}) = \alpha k^2 - \beta k^4. \quad (2)$$

Согласно [2] α и β даются выражениями

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m(0)}, \quad \beta = \frac{1}{4} \frac{\hbar^4}{m^2(0)} E_g, \quad m(0) = \frac{3\hbar^2 E_g}{4P^2}. \quad (3)$$

Плотность состояний определяется по [1] как шпур усредненной функции Грина „однозонного“ приближения,

$$\rho(E) = \frac{2}{\pi} \int d\vec{k} \text{Im} G(\vec{k}, E). \quad (4)$$

где

$$G(\vec{k}, E) = i \int_0^{\infty} ds \exp \{ -\varepsilon s + is [E - W(\vec{k})] + \alpha_1(s) \} \quad (5)$$

и

$$\alpha_1(s) = n \int d\vec{r} \{ \exp[-is V(\vec{r})] - 1 + is V(\vec{r}) \}. \quad (6)$$

Потенциал взаимодействия с примесью берется дебаевским,

$$V(r) = \frac{Ze}{\varepsilon r} e^{-r/r_0}. \quad (7)$$

Учитывая аппроксимацию (2), функцию Грина для сложного закона дисперсии представим в виде

$$G(\vec{k}, E) = G_1(\vec{k}, E) + G_2(\vec{k}, E), \quad (8)$$

где $G_1(k, E)$ совпадает с функцией Грина для квадратичного закона дисперсии, а

$$G_2(\vec{k}, E) = -\beta \int_0^{\infty} s k^4 \exp \{ -\varepsilon s + is [E - \alpha k^2] + \alpha_1(s) \} ds. \quad (9)$$

Соответственно для плотности состояний получаем

$$\rho(E) = \rho_1(E) + \rho_2(E), \quad (10)$$

где $\rho_1(E)$ есть плотность состояний для параболического закона дисперсии, а член $\rho_2(E)$ обусловлен вторым членом (2),

$$\rho_2(E) = -\frac{2\beta}{\pi} \int d\vec{k} \operatorname{Im} \int_0^{\infty} s k^4 \exp \{ -\varepsilon s + is [E - \alpha k^2] + \alpha_1(s) \} ds. \quad (11)$$

Так как в подинтегральном выражении существенны малые s , то удовлетворительна аппроксимация

$$\alpha_1(s) = -\alpha^2 s^2, \quad \alpha = \left(\frac{\pi n z^2 e^4}{\varepsilon^2} r_0 \right)^{1/2}. \quad (12)$$

С учетом (12) при $E > 0$ для $\rho_2(E)$ находим

$$\begin{aligned} \rho_2(E) = \frac{5\pi^{3/2} \beta \alpha^{3/2}}{2 \alpha^{7/2}} e^{-E^2/8\alpha^2} & \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{E}{\alpha} \right)^{5/2} \left[I_{1/4}(x) + I_{3/4}(x) + I_{-1/4}(x) + I_{-3/4}(x) \right] + \right. \\ & \left. + \left(\frac{E}{\alpha} \right)^{1/2} \left[I_{1/4}(x) + I_{-1/4}(x) \right] \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

где $x = E^2/8\alpha^2$, а $I_{1/4} \dots$ — бесселевы функции мнимого аргумента.

Исследуем формулу (13) для некоторых частных случаев, представляющих наибольший интерес.

1) При $E = 0$ (13) принимает вид

$$\rho_2(E) = \frac{5\beta\pi^{1/2}a^{3/2}(\Gamma(1/4))}{\sqrt{2}a^{7/2}} \left\{ 1 + \frac{2E\Gamma(3/4)}{a\Gamma(1/4)} \right\}. \quad (14)$$

2) У уровня Ферми, учитывая, что $\mu \gg a$ [14], получаем

$$\rho_2(E) = \frac{10\pi\beta E^{7/2}}{a^{7/2}} \left(1 - \frac{a^2}{4E^2} \right). \quad (15)$$

Для вычисления $\rho_2(E)$ при $E < 0$ и $|E|$ большом по сравнению с характерной энергией в поле примеси воспользуемся аппроксимацией, рассмотренной в работе [1]. А именно, представим потенциал взаимодействия носителей с примесью в виде

$$V(r) = \pm g\theta(r_c - r) \quad g > 0. \quad (16)$$

Тогда для $\rho_2(E)$ получаем

$$\rho_2(E) = \frac{15\pi^{1/2}\beta}{2a^{7/2}} e^{-nv_0} \sum_l \frac{(nv_0)^l}{l!} (E \mp lg \pm nv_0g)^{3/2} \theta(E \mp lg \pm nv_0g). \quad (17)$$

В случае притяжения носителя к примеси при $E < 0$ и $|E| \rightarrow \infty$ $\rho_2(E)$ имеет асимптотику

$$\rho_2(E) \approx \frac{15g^{3/2}y^{3/2}}{2(2nv_0)^{1/2}} \frac{\beta}{a^{7/2}} \exp\left(\frac{|E|}{g} + y - (l_m + 1/2) \ln \frac{(l_m + 1/2)}{nv_0g}\right), \quad (18)$$

где l_m — целое число, ближайшее сверху к $\frac{E + nv_0g}{g}$,

$$0 \leq y = l_m - \frac{|E| + nv_0g}{g} \leq 1. \quad (19)$$

Таким образом, как это следует из (15), взаимодействие с примесью изменяет плотность состояний у уровня Ферми очень незначительно. Как и следовало ожидать, в этой области энергий возможен предельный переход к невозмущенной плотности состояний. В то же время у дна зоны проводимости взаимодействие коренным образом перестраивает $\rho(E)$, образуя сколь угодно глубокий „хвост“ состояний там, где плотность состояний ничтожно мала. Непараболичность закона дисперсии вносит в $\rho(E)$ строго положительный вклад, существенный там, где плотность состояний особенно велика, то есть при $E \approx \mu$.

Действительно,

$$\frac{\rho_2(E)}{\rho_1(E)} \Big|_{E \approx \mu} \approx \frac{\mu}{E_g}; \quad \frac{\rho_2(E)}{\rho_1(E)} \Big|_{E \approx 0} \approx \frac{a}{E_g}, \quad \mu \gg a, \quad (20)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны, μ — уровень Ферми.

При $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ для InSb соответственно имеем

$$\frac{\rho_2(E)}{\rho_1(E)} \Big|_{E \approx \mu} \approx 0,3; \quad \frac{\rho_2(E)}{\rho_1(E)} \Big|_{E \approx 0} \approx 0,03. \quad (21)$$

В заключение выражаю благодарность Э. М. Казаряну за предложенную тему, руководство работой и постоянное к ней внимание.

Ереванский государственный
университет

Поступила 12.II.1970

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. В. Л. Бонч-Бруевич, Физ. твердого тела, Изд. АН СССР, М., 1965.
2. Е. О. Кане, Phys. Chem. Sol. 1, 249 (1957).

ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ԽՏՈՒԹՅՈՒՆԸ $A^{III}B^V$ ՏԻՊԻ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ՄԻԱՅՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐՈՒՄ

Ա. Պ. ԶՈԹՅԱՆ

Տեսականորեն դիտարկված է էլեկտրոնային վիճակների խտությունը բարդ դիսպերսիայի օրենքով կիսահաղորդչային միացություններում՝ լիցքակիրների և խառնուրդի փոխադրեցության դեպքում: Ընդհանուր բանաձևը հետազոտված է էներգիայի երկու մասնավոր դեպքերի համար՝ ֆերմիի մակարդակի մոտ և հաղորդականության զոնայի հատակում: Ստացված արդյունքը կիրառելի է $A^{III}B^V$ տիպի կիսահաղորդչային միացություններում:

THE DENSITY OF STATES FUNCTION OF $A^{III}B^V$ SEMICONDUCTOR COMPOUNDS

A. P. JOTIAN

The density of electronic states of semiconductor compounds with a complicated law of dispersion is considered, taking into account interaction between the charge carriers and impurities. The general formula is analyzed for two particular values of energy: near the Fermi level, and the bottom of conduction band.