Известия НАН Армении, Физика, т.37, №5, с.297-302 (2002)

УДК 621.315

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКОЙ ЩЕЛИ НА ТОНКУЮ СТРУКТУРУ КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ТИПА $A^{III}B^{V}$ В УСЛОВИЯХ СЛАБОГО ЛЕГИРОВАНИЯ И СЛАБОЙ КОМПЕНСАЦИИ

С.Л. АРУТЮНЯН

Государственный инженерный университет Армении

Гюмрийский образовательный комплекс

(Поступила в редакцию 2 октября 2001 г.)

Предложена физически адекватная интерполяционная формула для плотности состояний носителей зарядов в слабо легированных и слабо компенсированных полупроводниках. Получено явное выражение коэффициента поглощения, обусловленного переходами электронов из валентной зоны в донорную зону. Исследовано влияние кулоновской щели на тонкую структуру края фундаментального поглощения.

1. Введение

Имеющиеся в настоящее время многочисленные теоретические работы доказывают, а экспериментальные факты прямо или косвенно подтверждают наличие кулоновской щели в плотности состояний носителей зарядов вблизи уровня Ферми в слабо легированных полупроводниках – как в двумерных, так и в трехмерных системах (см., напр., [1-8]).

В частности, в работе [3] показано, что благодаря дальнодействующему характеру кулоновского потенциала, плотность состояний $g(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми μ обращается в нуль по универсальному закону:

$$g(\varepsilon)=\frac{3}{\pi}\frac{\chi^3}{e^6}(\varepsilon-\mu)^2=\frac{4n_D(\varepsilon-\mu)^2}{\varepsilon_D^3}, \qquad (1)$$

где n_D – концентрация основных примесей – доноров, $\varepsilon_D=e^2/\chi R_D$ – энергия кулоновского взаимодействия на среднем расстоянии $R_D=(4\pi n_D/3)^{-1/3}$ между донорами, χ – диэлектрическая проницаемость образца.

Аналитическое исследование функции $g(\varepsilon)$ в широком интервале изменения ε связано со сложной многоэлектронной задачей, которую принципиально невозможно свести к одноэлектронной (см., напр., [4]). Поэтому для исследования структуры примесной зоны широко применяются различные приближенные методы, в том числе и метод численного моделирования (см. обзор [5]).

Исходя из результатов работ [1-3,5], можно утверждать, что в результате численных методов исследования структуры примесной зоны в настоящее время установлено:

1. Плотность состояний $g(\varepsilon)$ всегда имеет два пика. Высокоэнергетический пик (в области $\varepsilon > \mu$) связан с ионизированными донорами, а низкоэнергетический пик (в области $\varepsilon < \mu$) соответствует заполненным донорам.

2. Между этими пиками и расположена кулоновская щель, причем вблизи уровня Ферми $g(\varepsilon)$ стремится к нулю по закону (1).

3. В предельных случаях слабой $K \to 0$ и сильной $K \to 1$ компенсаций ширина кулоновской щели стремится к нулю ($K = n_A / n_D$, n_A – концентрация акцепторов).

2. Интерполяционная формула для функции плотности состояний

Очевидно, что в условиях отсутствия строгой теории структуры примесной зоны при исследовании тех физических свойств образцов, которые определяются структурой этой зоны, необходимо иметь хотя бы интерполяционную формулу, адекватно описывающую свойства функции $g(\varepsilon)$ в широком интервале изменения энергии ε.

В настоящей работе предлагается интерполяционная формула для функции $g(\varepsilon)$, пригодная для всей области изменения ε, которая далее применяется для исследования влияния кулоновской щели на тонкую структуру края фундаментального поглощения, возникающую из-за переходов электронов из валентной зоны в донорную зону.

Для изучения оптического поглощения в интересующей нас области частот (см. ниже) необходимо установить вид функция $g(\varepsilon)$ в области $\varepsilon \geq \mu$. Легко убедиться, что в условиях слабого легирования и слабой компенсации в области $\varepsilon \geq \mu$ удобно функцию $g(\varepsilon)$ представить следующей формулой:

$$g(\varepsilon) = \frac{4(\varepsilon-\mu)^2}{\varepsilon_D^3} N_D \exp\left\{-2\frac{K^{-\frac{1}{3}}}{\varepsilon_D}(\varepsilon-\mu)\right\}, \qquad (2)$$

где подгоночный параметр $2K^{-1/3}/\varepsilon_D$ подобран таким образом, чтобы удовлетворялось условие электронейтральности $\int_{\mu}^{\infty} g(\varepsilon)d\varepsilon = n_A$.

Легко убедиться, что функция типа (2) удовлетворяет всем требованиям пунктов 1-3, приведенных во введении.

Действительно, в области $\varepsilon \geq \mu$ функция (2) принимает максимальное значение (высокоэнергетический пик) в точке, которая расположена на расстоянии Δ_0 от уровня Ферми, причем

$$\Delta_0 = \varepsilon_D K^{\frac{1}{3}}, \quad g_{\max}(\Delta_0) = \frac{4}{e^2}\frac{n_D}{\varepsilon_D} K^{\frac{2}{3}}, \tag{3}$$

где $e = 2.7...$ – число Эйлера.

Вблизи уровня Ферми, в области $(\varepsilon - \mu)/\varepsilon_D << 1$ после разложения в ряд экспоненты в формуле (2), последняя с точностью до квадратичного члена переходит в формулу (1).

Согласно [4], в случае слабой компенсации, т.е. при $K << 1$, $\mu = 0.61\varepsilon_D$, а в области $\varepsilon < \mu$ низкоэнергетический пик расположен в точке $\varepsilon = E_D$ (E_D – энергия ионизации изолированного донора), причем

$$g_{\max}(E_D) = 4.17 \frac{N_D}{\sqrt{\pi}\varepsilon_D} K^{-\frac{1}{4}}. \tag{4}$$

Тогда из (3) и (4) следует, что $\mu >> \Delta_0$ и $g_{\max}(E_D) >> g(\Delta_0)$. Следовательно, можно утверждать, что величина Δ_0, определяющаяся формулой (3) есть полуширина кулоновской щели. Численные оценки Δ_0 при разных степенях компенсации приведены в столбце 2 таблицы 1.

Таблица 1. Численные значения параметров $\Delta_0, \Lambda, \Omega_{\max}, \hbar\omega - I_0$ при разных степенях компенсации K.

K	Δ_0 (мэВ)	Λ	$\Omega_{\max}$	$\hbar\omega_{\max} - I_0$ (мэВ)
0.1	0.928	0.135	1.125	$10 \cdot 10^{-4}$
0.01	0.43	0.292	1.25	$5.3 \cdot 10^{-4}$
0.001	0.2	0.629	1.475	$1.2 \cdot 10^{-4}$

Формула (3) и приведенные численные оценки Δ_0 свидетельствуют о том, что ширина щели в пределе слабой компенсации уменьшается. Кроме того, если учесть, что при таких предельных компенсациях высота пика $g_{\max}(\Delta_0)$ стремится к нулю (см. (3)), то можно утверждать, что в таких условиях кулоновской щелью можно пренебречь. Это вполне соответствует выводам, приведенным в работах [4,5].

Отметим, что в [4] для кулоновской щели приводится выражение $\Delta_0 = \varepsilon_D K^{1/2}$, которое не совпадает с нашим результатом (см. (3)). Причиной несоответствия является различие исходных предположений. Если в [4] предполагается, что вдали от уровня Ферми $g(\varepsilon) = \text{const}$, то в нашем случае результат (3) является следствием учета поведения функции $g(\varepsilon)$ в области $\varepsilon \geq \mu$ установленными численными методами.

3. Тонкая структура коэффициента поглощения при переходах "валентная зона – примесная зона"

Наряду с другими современными экспериментальными методами (туннельная спектроскопия 2D систем, VRH-спектроскопия [6-8]), одним из наиболее прямых способов обнаружения кулоновской щели является исследование тонкой структуры края фундаментального поглощения слабо легированных и слабо компенсированных полупроводников. Это связано с тем, что (как показано ниже) в предпороговой области частот частотная зависимость коэффициента поглощения определяется видом плотности состояний вблизи энергии Ферми.

Целью данного раздела является следующее: используя выражение плотности состояний (2), изучить тонкую структуру края фундаментального поглощения, которая формируется при переходах "валентная зона – примесная зона".

Если считать закон дисперсии валентной зоны изотропным и квадратичным, то для исходного состояния будем иметь

$$\varepsilon_i = -\frac{\Delta}{2} - \frac{p^2}{2m_v}, \quad \Psi_i = U_{vp}(\mathbf{r})\exp\left(i\frac{\mathbf{pr}}{\hbar}\right),$$
$$g(\varepsilon_i) = \left(\frac{2m_v}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sqrt{-\varepsilon_i - \frac{\Delta}{2}}}{2\pi^2}\,\Theta\left(-\varepsilon_i - \frac{\Delta}{2}\right). \tag{5}$$

Здесь ε_i, p, m_v, Ψ_i, U_{pv} – энергия, импульс, эффективная масса, волновая функция, блоховская амплитуда валентного электрона, соответственно, Δ – ширина запрещенной зоны, $\Theta(x)$ – единичная ступенчатая функция.

Для конечных состояний плотность состояний определяется формулой (2), а для волновой функции будем иметь:

$$\Psi(\mathbf{r}) = U_{co}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D)F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D), \tag{6}$$

где $F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D) = (\pi a_D)^{-3/2}\exp(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_D|/a_D)$, a_D – боровский радиус донора, $\mathbf{R}_D$ – радиус-вектор донора.

Если слабое электромагнитное поле с частотой ω считать возмущением, то для вычисления вероятности переходов можно использовать стандартную методику Кубо–Гринвуда (см., напр., [9]).

Тогда, учитывая, что в случае $T = 0$ валентная зона полностью заполнена, а донорная зона заполнена до уровня Ферми, с учетом (2,5,6) для коэффициента поглощения $K(\omega)$ получается следующее выражение:

$$K(\omega) = 3\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{7}{6}} 2^{\frac{9}{2}} \frac{\alpha}{n_0\chi^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{m_C^2}{m_V m_0}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{\Delta}{\hbar\omega} \frac{G(\Omega, \Lambda)}{a_0^{\frac{3}{2}} N_A^{\frac{1}{6}}}\,\Theta(\hbar\omega - I_0). \tag{7}$$

Здесь $\alpha = e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры, n_0 – показатель преломления кристалла, m_0 – масса свободного электрона, a_0 – боровский радиус,

$$I_0 = \Delta - E_D - \mu \tag{8}$$

– энергетический порог оптического поглощения, а функция

$$G(\Omega, \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_0^1 \frac{x^2 e^{-2\Omega x} \sqrt{1-x}}{\left(1 + \frac{\Lambda}{\Omega} - x\right)^4} dx \ , \tag{9}$$

где $\Lambda = \frac{1}{2\chi}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{m_C{}^2}{m_V m_0}\right) \left(a_0 N_A^{\frac{1}{3}}\right)^{-1}$ – безразмерный параметр, характеризующий образец, а $\Omega = (\hbar\omega - I_0)/\Delta_0$ – относительный избыток энергии фотона.

Из формулы (7) следует, что коэффициент поглощения имеет четкий порог поглощения, определяемый формулой (8), а частотная зависимость $K(\omega)$ в основном определяется функцией $G(\Omega, \Lambda)$.

Путем численного интегрирования можно показать, что функция $G(\Omega, \Lambda)$ принимает максимальное значение в точке $\Omega_{\max}$. Численные значения $\Omega_{\max}$ приведены в третьем столбце таблицы. Как видно из таблицы, с уменьшением степени компенсации $\Omega_{\max}$ увеличивается. Однако с уменьшением степени компенсации из-за резкого спада ширины щели соответствующий пик коэффициента поглощения смещается в низкочастотную область (см. пятый столбец таблицы).

Отметим, что соотношение $\Delta_0 = (\hbar\omega_{\max} - I_0)/\Omega_{\max}$ дает возможность, экспериментально определив $\omega_{\max}$, вычислить ширину кулоновской щели.

Рассмотрим следующие частные случаи.

1. Вблизи порога поглощения: $\Omega << 1$.

В этом случае $G(\Omega, \Lambda) = \frac{2^4}{7!!} \frac{\Omega^{\frac{7}{2}}}{\Delta^4} F(3, \frac{9}{2}; -\frac{\Omega}{2}) \approx \frac{2^4}{7!!} \frac{\Omega^{\frac{7}{2}}}{\Delta^4}$, где $F(3, \frac{9}{2};\ 2\Omega)$ – вырожденная гипергеометрическая функция. Соответственно для $K(\omega)$ будем иметь:

$$K(\omega) = \frac{2^7 9}{7!! \pi} \frac{\alpha \chi^6}{n_0} \left(\frac{m_v m_c}{m_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\Delta}{I_0 a_0} \left(\frac{\hbar\omega - I_0}{E_0}\right)^{\frac{7}{2}} \ , \tag{10}$$

где E_0 – энергия ионизации атома водорода.

Если учитывать, что в нашем случае $I_0 \approx \Delta$, то из (10) следует, что коэффициент поглощения зависит только от характеристик матрицы и не зависит от степени легирования и компенсации. Это, очевидно, связано с универсальным характером функции плотности состояний (1).

2. Вдали от порога: $\Omega >> 1$. Вычисление интеграла (9) по методу Лапласа дает результат $G(\Omega, \Lambda) = \sqrt{\pi/2}(1/e\Omega^{7/2})$ и для $K(\omega)$ будем иметь

$$K(\omega)=\frac{2^{13}3\sqrt{2\pi}}{e}\frac{\alpha}{n_0\chi^5}\left(\frac{m_0^{\,2}}{m_c m_v}\right)^{\frac{5}{2}}\frac{\Delta}{\hbar\omega}a_0N_A\left(\frac{E_0}{\hbar\omega-I_0}\right)^{\frac{7}{2}}. \qquad (11)$$

Из формулы (11) следует, что в этой области частот коэффициент поглощения $K(\omega)$ быстро уменьшается с увеличением частоты и зависит от концентрации акцепторов.

Исходя из качественных соображений, можно утверждать, что при температурах, близких к абсолютному нулю, коэффициент поглощения, в общих чертах повторяя вышеописанное поведение, имеет следующие особенности: во-первых, в результате термических эффектов должен исчезнуть четкий порог, а во-вторых, пик поглощения, уменьшаясь по высоте, перемещается в сторону высоких частот.

ЛИТЕРАТУРА

1. **M.L.Knotek, M.Pollak**. Phys. Rev., **B9**, 664 (1974).
2. **T.Kurosava, H.Sugimoto**. Prog. Theor. Phys. (Suppl.), **57**, 217 (1975).
3. **A.L.Efros, B.I.Shklovskii**. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **8**, L49 (1975).
4. **Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос**. Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979.
5. **Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос**. ФТП, **14**, 925 (1980).
6. **Э.В.Девятов, А.А.Шашкин, В.Т.Долгополов, В.Ханзен, М.Холланд**. УФН, **170**, 327 (2000).
7. **А.Г.Андреев, А.Г.Забродский, И.П.Взягин, С.В.Егоров**. ФТП. **31**, 1174 (1997).
8. **А.Г.Забродский**. УФН, **168**, 804 (1998).
9. **N.F.Mott, E.A.Devis**. Electron Processes in Non-Crystalline Materials. Clarendon Press, Oxford, 1979.

ԿՈՒԼՈՆՅԱՆ ՃԵՂՔԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ $A^{III}B^{V}$ ՏԻՊԻ ԹՈՒՅԼ ԼԵԳԻՐՎԱԾ ԵՎ ԹՈՒՅԼ ՀԱՄԱԿՇՌՎԱԾ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԻ ՀԻՄՆԱՐԱՐ ԿԼԱՆՄԱՆ ԵԶՐԻ ՆՈՒՐԲ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԻ ՎՐԱ

Ս.Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Առաջարկված է ներմուտարկման բանաձև թույլ լեգիրված և թույլ համակշռված կիսահաղորդչի լիցքակիրների վիճակների խտության համար: Կլանման գործակցի համար ստացված է «արժեքական գոտի – դոնորային գոտի» անցումներով պայմանավորված կլանման գործակցի բացահայտ արտահայտություն: Ուսումնասիրվել է կուլոնյան ճեղքի ազդեցությունը կլանման եզրի նուրբ կառուցվածքի վրա:

INFLUENCE OF A COULOMB GAP ON THE FINE STRUCTURE OF THE FUNDAMENTAL ABSORPTION EDGE IN LOW-DOPED AND LOW-COMPENSATED $A^{III}B^{V}$ SEMICONDUCTORS

S.L. HAROUTUNIAN

An interpolation formula for the state densities of charge carriers in low-doped and low-compensated semiconductors is proposed. An explicit expression for the absorption coefficient caused by transitions from the valence band to the donor band is obtained. The influence of the Coulomb gap on the fine structure of the absorption is studied.