

УДК 621.315

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКОЙ ЩЕЛИ НА ПРИМЕСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ТИПА $A^{III}V$

С.Л. АРУТЮНЯН

Гюмрийский филиал государственного инженерного университета Армении

(Поступила в редакцию 5 мая 2008 г.)

Используя интерполяционную формулу, которая независимо от степени компенсации адекватно описывает структуру примесной зоны в широком интервале энергий, получено явное выражение коэффициента поглощения света, связанного с переходами примесная зона–зона проводимости. Показано, что при низких температурах коэффициент поглощения имеет четко выраженный частотный порог. Получена явная частотная зависимость коэффициента поглощения в широком интервале частот падающего излучения. Исследована также зависимость коэффициента поглощения от степени легирования полупроводника.

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, как в двумерных, так и в трехмерных слабо легированных и компенсированных полупроводниках. Популярность концепции кулоновской щели связана также с успехами ряда экспериментальных методик, к числу которых в первую очередь относятся VRH (variable range hopping) спектроскопия, изучение перехода металл-диэлектрик [1,2] и туннельная спектроскопия 2D-электронов в магнитном поле [3].

Несмотря на это, в настоящее время строгую аналитическую теорию структуры примесной зоны в слабо легированных и компенсированных полупроводниках удалось построить лишь в случаях предельно сильных и слабых компенсаций [4]. Это связано с тем, что в области промежуточной компенсации заведомо нет никаких малых параметров, и исследование состояния системы электронов в примесных центрах представляет крайне сложную многоэлектронную задачу, которую решить аналитически принципиально невозможно (см., напр., [4-6]).

Поэтому для исследования структуры примесной зоны широко применяются различные полуэмпирические методы [7-9], где для описания структуры примесной зоны выбирается определенная пробная функция, которая, как правило, справедлива в некотором узком интервале изменения степени компенсации и энергии электронов.

В отличие от указанных работ, в работе [10] предложена интерполяционная формула для функции плотности состояний $g(\varepsilon)$ примесной зоны, имеющая вид

$$g(\varepsilon) = \frac{4N_D(\varepsilon - \mu)^2}{\varepsilon_D^3} \exp \frac{\mu^2 - \varepsilon^2}{\gamma^2}, \quad (1)$$

которая адекватно описывает как особенности электронных состояний в примесной зоне, так и его эволюцию при плавном изменении степени компенсации образца в широком интервале энергий. В формуле (1) энергия ε отсчитывается от значения энергии основного состояния изолированного донора ($E_D = m_c e^4 / 2\chi^2 \hbar^2$, где m_c – эффективная масса электронов в зоне проводимости, χ – диэлектрическая проницаемость образца), 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.

Подгоночные параметры μ и γ (μ – уровень Ферми, а γ характеризует ширину побочных пиков) определяются из системы трансцендентных уравнений, которые получаются из условий нормировки $g(\varepsilon)$ и электронейтральности образца. В работе [10] приведены численные значения параметров μ и γ в широком интервале изменения степени компенсации $K = N_A / N_D$ (N_A – концентрация компенсирующих примесей-акцепторов).

В данной работе теоретически исследовано влияние кулоновской щели на частотную зависимость коэффициента поглощения электромагнитной волны в широком интервале частот, связанного с переходами электронов из примесной зоны в зону проводимости в слабо легированных и компенсированных полупроводниках. Данная задача представляет определенный практический интерес в связи с тем, что одним из эффективных методов зондирования примесных образцов с целью определения структуры и параметров примесной зоны является экспериментальное исследование частотной зависимости коэффициента примесного поглощения в широком частотном интервале падающего излучения.

2. Коэффициент поглощения, связанного с переходами примесная зона–зона проводимости и обсуждение результатов

При вычислении коэффициента поглощения электромагнитной волны, связанного с переходами примесная зона–зона проводимости будем предполагать, что в исходном состоянии (примесная зона) плотность электронных состояний дается формулой (1), а волновые функции исходного и конечного состояний имеют вид

$$\Psi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D) = U_{c0}(\mathbf{r}) F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D), \quad \Psi_f(\mathbf{r}) = (U_{cp}(\mathbf{r}) / \sqrt{V}) \exp i \mathbf{p} \mathbf{r} / \hbar, \quad (2)$$

где $U_{c0}(\mathbf{r})$, $U_{cp}(\mathbf{r})$ – бловские множители, соответствующие точкам $\mathbf{p} = 0$ и произвольного $\mathbf{p}$ зоны Бриллюэна, $F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D) = (\pi a_D)^{3/2} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{R}_D|/a_D)$ – волновая функция основного состояния донорного электрона, $a_D = \chi \hbar^2 / m_c e^2$ – боровский радиус донорного центра, $\mathbf{R}_D$ – радиус-вектор донора.

Для квадратичного и изотропного закона дисперсии электронов в зоне проводимости (конечное состояние) энергетический спектр и плотность состояний имеют вид

$$\varepsilon_f = E_D + \frac{p^2}{2m_c}, \quad (3)$$

$$g(\varepsilon_f) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon_f - E_D} \Theta(\varepsilon_f - E_D), \quad (4)$$

где $\Theta(x)$ – единичная ступенчатая функция.

Если слабое электромагнитное поле с частотой ω считать как возмущение, то для вычисления вероятности переходов можно использовать стандартную методику Кубо–Гринвуда (см., напр., [11]). Тогда, имея в виду, что в случае $T = 0$ К донорная зона заполнена до уровня Ферми, а зона проводимости полностью пуста, с учетом (1–4) для коэффициента поглощения $K(\omega)$, связанного с переходами “донорная зона–зона проводимости”, получается следующее выражение:

$$K(\omega) = \frac{2^9 \pi^3}{n_0} \alpha \frac{m_c}{m_0^2} \frac{\hbar N_D}{\omega} \left(\frac{E_D}{\varepsilon_D} \right)^3 F \left(\frac{\hbar\omega - I_0}{E_D} \right) \Theta \left(\frac{\hbar\omega - I_0}{E_D} \right). \quad (5)$$

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

$$I_0 = E_D - \mu \quad (6)$$

есть энергетический порог оптического поглощения. Функция $F(\Omega)$ имеет следующий вид:

$$F(\Omega) = \Omega^{\frac{9}{2}} \int_0^1 \frac{t^{\frac{3}{2}} (1-t)^2}{(\Omega t + 1)^4} \exp \left\{ - \left(\frac{E_D}{\gamma} \right)^2 \left(\Omega^2 (1-t)^2 - 2\Omega(1-t) \frac{\mu}{E_D} \right) \right\} dt, \quad (7)$$

где $\Omega = (\hbar\omega - I_0)/E_D$.

Из формулы (5) следует, что коэффициент поглощения имеет четкий порог, определяемый формулой (6). С увеличением степени компенсации энергия Ферми μ уменьшается (см. [10]) и, следовательно, увеличивается I_0 . Вследствие этого порог поглощения смещается в область коротких волн, а за порогом частотная зависимость определяется в основном только функцией $F(\Omega)$.

Как видно из формулы (7), функция $F(\Omega)$ зависит от параметров $(E_D/\gamma)^2 = (\chi^2 r_D^2 / 4a_D^2) \alpha$ и $\mu/E_D = (2a_D/\chi r_D) c$, где численные значения параметров α и c которые определяются соотношениями $\mu = c\varepsilon_D$, $\gamma = \varepsilon_D \alpha^{-1/2}$, при различных значениях степени компенсации приведены в работе [10].

Например, для кристалла GaAs ($a_D = 104 \text{ \AA}$, $\chi = 13.18$) при концентрации основных примесей $N_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при $K = 0,1$ $(E_D/\gamma)^2 = 5.42 \times 10^3$,

$\mu/E_D = 6.563 \times 10^{-3}$; при $K = 0,5$ $(E_D/\gamma)^2 = 3.593 \times 10^3$, $\mu/E_D = 0$; при $K = 0,9$ $(E_D/\gamma)^2 = 5.42 \times 10^3$, $\mu/E_D = -6.563 \times 10^{-3}$.

На рис.1 с учетом вышеприведенных численных оценок приведены графики зависимости функции $F(\Omega)$ от безразмерной расстройки Ω для трех значений степени компенсации K . Как видно из рис.1, с увеличением степени компенсации значение функции $F(\Omega)$ уменьшается, что, очевидно, связано с уменьшением высоты низкоэнергетического пика функции $g(\epsilon)$, т.е. с уменьшением числа электронов в примесной зоне.

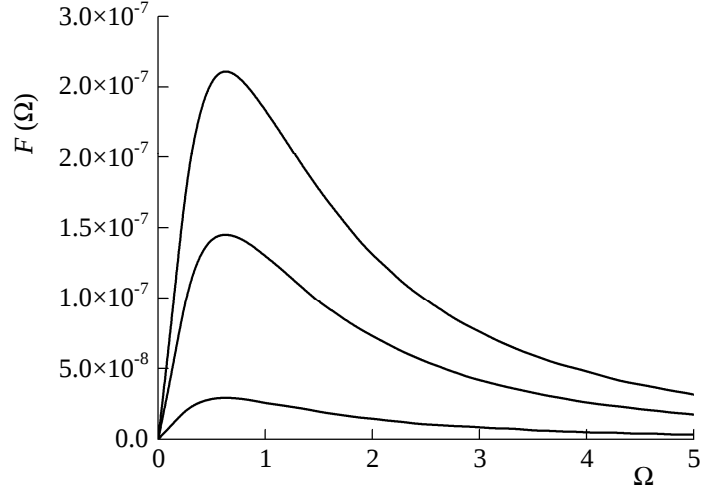


Рис.1. Зависимость функции $F(\Omega)$ от безразмерной расстройки Ω при разных степенях компенсации K ; 1 – $K = 0.9$; 2 – $K = 0.5$; 3 – $K = 0.1$.

Явную зависимость коэффициента поглощения от частоты излучения можно получить в следующих частных случаях, представляющих реальный практический интерес.

а) Вблизи порога поглощения $\hbar\omega \approx I_0$ т.е. $\Omega \ll 1$, $F(\Omega) \approx 16\Omega^{9/2}/15$. Если учесть, что $I_0 \approx E_D$ (т.к. $E_D \gg \mu$), то из формул (5)-(7) следует, что за порогом поглощения коэффициент поглощения имеет вид

$$K(\omega) = \frac{2^9 \pi^2}{3} \alpha \left(\frac{m_c}{m_0} \right)^2 \frac{\chi}{n_0 a_0} \left(\frac{\hbar\omega - E_D}{E_D} \right)^{\frac{9}{2}}, \quad (8)$$

где $a_0 = \hbar^2/m_0 e^2$ – боровский радиус. Как видно из формулы (8), 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) в окрестности уровня Ферми.

б) Вдали от порога $\Omega \gg 1$ и вычисление интеграла (7) по методу Лапласа дает результат $F(\Omega) = (\sqrt{\pi}/\sqrt{2}e)(\gamma/E_D)^2 \Omega^{-5/2}$, где e – число Эйлера. Следовательно, для $K(\omega)$ будем иметь

$$K(\omega) = \frac{2^9 \pi^3 \sqrt{2\pi}}{e} \alpha \frac{\chi^2}{n_0} a_0^2 N_D \left(\frac{\gamma}{\epsilon_D} \right)^3 \left(\frac{E_D}{\hbar\omega} \right)^{\frac{7}{2}} \quad (9)$$

Из формулы (9) следует, что частотная зависимость коэффициента поглощения примесной зоны определяется степенной зависимостью $\omega^{-3.5}$, что совпадает с законом спада коэффициента поглощения для случая водородоподобного изолированного донора. Это связано с тем, что при энергиях квантов, существенно превышающих порог фотоионизации, решающими будут являться переходы тех электронов, энергетические уровни которых находятся вблизи низкоэнергетического пика плотности состояний (1). В свою очередь энергия, соответствующая низкоэнергетическому пику, расположена вблизи уровня изолированного донорного центра E_D .

Исходя из полученных результатов, можно утверждать, что при температурах, близких к абсолютному нулю, коэффициент поглощения в общих чертах повторяет вышеописанное поведение и имеет следующие особенности: во-первых, в результате термических эффектов с увеличением энергии Ферми порог поглощения смещается в сторону низких частот, а во-вторых, пик поглощения уменьшается по высоте.

Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Республики Армения “Полупроводниковая наноэлектроника”.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.Г.Забродский. УФН, **168**, 804 (1998).
2. А.Г.Андреев, А.Г.Забродский, И.П.Вязгин, С.В.Егоров. ФТП, **31**, 1174 (1997).
3. Э.В.Девятов, А.А.Шашкин, В.Т.Долгополов, В.Ханзен, М.Холланд. УФН, **170**, 327 (2000).
4. Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979.
5. В.Л.Бонч-Бруевич и др. Электронная теория неупорядоченных полупроводников, М., Наука, 1981.
6. B.I.Shklovskii, A.L.Efros. Electronic properties of doped semiconductors. Berlin, Springer-Verlag, 1984.
7. Д.В.Николенков, В.И.Архипов, В.Р.Никитенко. ФТП, **34**, 682 (2000).
8. Н.А.Поклонский, С.Ю.Лопатин, А.Г.Забродский. ФТП, **42**, 432 (2000).
9. С.Л.Арутюнян. Изв. НАН Армении, Физика, **37**, 297 (2002).
10. С.Л.Арутюнян. ФТТ, **47**, 581 (2005).
11. Н.Мотт, Э.Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах, т. 1, М., Мир, 1982.

ԿՈՒԼՈՆՅԱՆ ՃԵՂՔԻ ԱԶԴՅՈՒԹՅՈՒՆԸ $A^{III}B^V$ ՏԻՊԻ

ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐԻ ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ԿԼԱՆՄԱՆ ՎՐԱ

Ս.Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Վիճակների խտության համար ներմոտարկման բանաձևի օգնությամբ, որը համարժեքորեն նկարագրում է խառնուրդային գոտու կառուցվածքը լայն էներգիական տիրույթում, ստացված է «խառնուրդային գոտի-հաղորդական գոտի» անցումներով պայմանավորված կլանման գործակցի արտահայտությունը: Ցույց է տրված, որ ցածր ջերմաստիճաններում գոյություն ունի հստակ արտահայտված կլանման շեմ: Ստացված է կլանման գործակցի հաճախական կախումն ընկնող լույսի հաճախությունների լայն տիրույթում: Ուսումնասիրված է նաև կլանման գործակցի կախումը կիսահաղորդչի լեգիրացման աստիճանից:

INFLUENCE OF THE COULOMB GAP ON THE IMPURITY ABSORPTION IN $A^{III}B^V$ SEMICONDUCTORS

S.L. HARUTYUNYAN

Using the interpolation formula, an explicit expression is obtained for the light absorption coefficient related to the transitions from the impurity band to the conductivity band is obtained. The interpolation formula adequately describes the impurity band structure in a broad energy range regardless of the degree of compensation. It is shown that at low temperatures the absorption coefficient shows a clearly expressed threshold of absorption. The explicit frequency dependence of the absorption coefficient is obtained in a broad frequency range of the incident radiation. The dependence of the absorption coefficient on the doping degree of a semiconductor is also investigated.