

УДК 537.311.322

© 1992

ПЕРЕХОД МОТТА—АНДЕРСОНА В СЛАБО КОМПЕНСИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ P-ТИПА

В. М. Михеев

В модели сильной связи с двухцентровым приближением вычислена плотность состояний примесных дырок в зоне Γ_8 . В качестве критерия перехода Мотта принято условие, при котором нижняя подзона Хаббарда начинает перекрываться с зоной проводимости. Получено алгебраическое уравнение для определения критической концентрации акцепторов, при которой происходит переход Мотта—Андерсона.

Хорошо известны трудности, с которыми сталкивается описание примесных состояний вблизи перехода Мотта, когда расстояние между примесными центрами сравнимо с длиной локализации волновой функции связанного состояния. Фактически все теории примесных состояний в области концентраций являются полуколичественными. Наиболее сложными для описания оказываются четырехкратно вырожденные состояния акцепторов в узкощелевых полупроводниках типа HgCdTe. (Подробное обсуждение проблем, связанных с описанием акцепторов в зоне Γ_8 , и соответствующие ссылки на литературу можно найти в монографии [1]). Для таких состояний трудно оценить даже критическую концентрацию N_m , при которой происходит переход металл—диэлектрик, так как не ясно, применимо ли в этом случае равенство $N_m^{1/3} a_b = 0.25$ и что понимать под боровским радиусом a_b .

В этой ситуации представляется целесообразным описывать влияние перекрытия волновых функций на плотность акцепторных состояний в модели сильной связи, поскольку эта теоретическая модель широко используется при описании примесных состояний донорного типа и по крайней мере в случае слабой компенсации приводит к весьма правдоподобным результатам.

В предлагаемой работе использована модифицированная автором модель сильной связи [2], в которой электрон-электронное взаимодействие включено непосредственно в гамильтониан задачи в приближении эффективного поля. Обычно в модели сильной связи электрон-электронное взаимодействие учитывается через экранирование ионных потенциалов. Этот эффект существен непосредственно в окрестности перехода металл—диэлектрик, когда достаточно велика концентрация свободных носителей. Однако, как показано в работе [2], учет электрон-электронного взаимодействия всегда необходим при расчете примесной зоны, поскольку вклад от этого взаимодействия в двухцентровом приближении полностью компенсирует взаимодействие электрона с ионом соседнего центра. Поэтому сдвиг примесного уровня, пропорциональный энергии электрон-ионного взаимодействия, обращается в нуль при учете электрон-электронного взаимодействия непосредственно в гамильтониане задачи. Таким образом, в нашей расчетной схеме перекрытие волновых функций примесных центров приводит лишь к уширению примесного уровня без сдвига.

1. Энергетический спектр дырок в примесной зоне

Запишем гамильтониан задачи в модели сильной связи [3]

$$H = H_0 + V(r), \quad (1)$$

$$V(r) = \sum_{l \neq 0} v_0(r-l) + \sum_{l \neq 0} \hat{v}_0(r-l).$$

Здесь H_0 — гамильтониан, описывающий одночастичные состояния, $v_0(r) = e^2/\chi r$ (e — заряд электрона, χ — диэлектрическая проницаемость), $v_0(r)$ — энергия электрон-электронного взаимодействия в приближении эффективного поля. В рассматриваемом случае зоны Γ_8 основное состояние акцептора четырехкратно вырождено и описывается уравнением

$$H_0 \varphi_j = E_a \varphi_j, \quad (j = 1, 2, 3, 4), \quad (2)$$

а энергия электрон-электронного взаимодействия аппроксимируется выражением

$$\hat{v}_0(r-l) = \frac{e^2}{\chi} \sum_j \int \frac{|\varphi_j(r'-l)|^2}{|r-r'|} dr'. \quad (3)$$

Акцепторные состояния в примесной полосе, обусловленной перекрытием волновых функций одночастичных состояний, описываются новыми волновыми функциями

$$\chi_{jk} = N^{-1/2} \sum_l e^{ikl} \varphi_j(r-l). \quad (4)$$

Энергия дырки в примесной полосе E_k определяется из секулярного уравнения [3]

$$|\langle \chi_{jk} | H - E_k | \chi_{j'k} \rangle| = 0, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \langle \chi_{jk} | H - E_k | \chi_{j'k} \rangle &= (E_a - E_k) \left[\delta_{jj'} + \sum_{\tau \neq 0} e^{-ik\tau} \hat{S}_{jj'} \right] + \\ &+ \hat{B}_{jj'} + \sum_{\tau \neq 0} e^{-ik\tau} \hat{A}_{jj'}, \end{aligned}$$

$$\hat{S}_{jj'} = \int \varphi_j^*(r) \varphi_{j'}(r+\tau) dr,$$

$$\hat{B}_{jj'} = \int \varphi_j^*(r) [V(r) - v_0(r)] \varphi_{j'}(r) dr,$$

$$\hat{A}_{jj'} = \int \varphi_j^*(r) [V(r) - v_0(r)] \varphi_{j'}(r+\tau) dr,$$

$$\tau = l - l'. \quad (6)$$

Все расчеты проводились в двухцентровом приближении. При этом в матричных элементах (6) в суммах по τ были оставлены лишь те члены,

которые соответствуют значениям $\tau = R$, где R — расстояние между соседними примесными центрами. В суммах же, входящих в выражения для $V(r)$, оставлены лишь те атомные потенциалы, которые расположены именно на этих центрах. В указанном приближении матричные элементы (6) приобретают более простую форму

$$\langle \chi_{jk} | H - E_k | \chi_{j'k} \rangle = (E - E_k) [\delta_{jj'} + \Delta_k S_{jj'}] + B_{jj'} + \Delta_k A_{jj'}$$

$$S_{jj'} = \int \varphi_j^*(r_a) \varphi_{j'}(r_b) dr,$$

$$A_{jj'} = \int \varphi_j^*(r_a) \varphi_{j'}(r_b) v_0(r_a) dr,$$

$$B_{jj'} = \int \varphi_j^*(r_a) \varphi_{j'}(r_a) [v_0(r_b) + \hat{v}_0(r_b)] dr,$$

$$\Delta_k = \sum_{\tau=0} e^{-ik\tau}. \quad (7)$$

Здесь индексы a и b у аргументов r_a и r_b означают, что волновые функции центрированы на соседних примесных центрах a и b . Будем описывать одночастичные состояния акцепторов волновыми функциями Шехтера [4, 5]

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \begin{pmatrix} C_1 e^{-r/r_1} + \frac{1}{2} C_2 (3z^2 - r^2) e^{-r/r_2} \\ iC_3 z [x + iy] e^{-r/r_2} \\ - [(3^{1/2}/2) C_2 (x^2 - y^2) - iC_3 xy] e^{-r/r_2} \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \varphi_2 &= \begin{pmatrix} -iC_3 z [x - iy] e^{-r/r_2} \\ C_1 e^{-r/r_1} - \frac{1}{2} C_2 [3z^2 - r^2] e^{-r/r_2} \\ 0 \\ [- (3^{1/2}/2) C_2 [x^2 - y^2] + iC_3 xy] e^{-r/r_2} \end{pmatrix}, \\ \varphi_3 &= \begin{pmatrix} [- (3^{1/2}/2) C_2 [x^2 - y^2] - iC_3 xy] e^{-r/r_2} \\ 0 \\ C_1 e^{-r/r_1} - (1/2) C_2 [3z^2 - r^2] e^{-r/r_2} \\ -iC_3 z [x + iy] e^{-r/r_2} \end{pmatrix}, \\ \varphi_4 &= \begin{pmatrix} 0 \\ [- (3^{1/2}/2) C_2 [x^2 - y^2] - iC_3 xy] e^{-r/r_2} \\ iC_3 z [x - iy] e^{-r/r_2} \\ C_1 e^{-r/r_1} + (1/2) C_2 [3z^2 - r^2] e^{-r/r_2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8)$$

Волновые функции $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ преобразуются по представлениям проекции момента $j = +3/2, +1/2, -1/2, -3/2$. Параметры r_1, r_2, C_1, C_2, C_3 определяются с помощью вариационной процедуры. Волновые функции (8) ортонормированы при условии

$$\pi C_1^2 r_1^3 + 9\pi C_2^2 r_2^7 + (9/2) \pi C_3^2 r_2^7 = 1. \quad (9)$$

Волновые функции (8) выбраны с учетом гофрировки изоэнергетической поверхности. В сферическом приближении нормировочные коэффициенты связаны соотношением [6] $C_3^2 = 3 C_2^2$. Наши расчеты начнем с вычисления энергии электрон-электронного взаимодействия (3) на волновых функциях (8). В сферическом приближении

$$\frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 |\varphi_j|^2 = C_1^2 e^{-2r/r_1} + C_2^2 r^4 e^{-2r/r_2}.$$

Соответствующие интегралы, входящие в выражение (3), легко вычисляются стандартными методами теории атомных функций [7], и окончательный результат имеет вид

$$\hat{v}_0(r) = \frac{e^2}{\pi r} + \frac{e^2}{\pi} \left[C_1^2 \left(\frac{1}{r} \partial_{\gamma_1}^2 - \partial_{\gamma_1} \right) \frac{e^{\gamma_1 r}}{\gamma_1} + C_2^2 \left(\frac{1}{r} \partial_{\gamma_2}^6 - \partial_{\gamma_2}^5 \right) \frac{e^{\gamma_2 r}}{\gamma_2} \right],$$

$$\partial_x^n \equiv \frac{\partial^n}{\partial x^n}, \quad \gamma_1 = 1/r_1, \quad \gamma_2 = 1/r_2.$$

(10)

Выражение в квадратных скобках, на расстоянии R , равном междоузельному, пропорционально экспонентам $\exp(-2R/r_1) \ll 1$ и $\exp(-R/r_2) \ll 1$ и пренебрежимо мало по сравнению с коэффициентами $S_{jj'}$ и $A_{jj'}$, которые в двухцентровом приближении пропорциональны квадратным корням из этих экспонент. Поэтому в двухцентровом приближении можно положить все коэффициенты $B_{jj'} = 0$. Таким образом, при учете электрон-электронного взаимодействия перекрытие одночастичных функций приводит лишь к уширению примесного уровня. При этом сдвиг примесного уровня отсутствует, так как взаимодействие электрона с электронным облаком и положительным ионом соседнего узла взаимно компенсирует друг друга.

Интегралы $S_{jj'}$ и $A_{jj'}$ легко вычисляются в сфероидальных координатах. Причем в двухцентровом приближении все недиагональные матричные элементы секулярного уравнения (5) обращаются в нуль при интегрировании по углам. При этом секулярное уравнение распадается на четыре независимых уравнения и закон дисперсии дырок в примесной полосе принимает вид

$$E_{jk} = E_a + \frac{A_{jj'} \Delta_k}{1 + S_{jj'} \Delta_k},$$

$$S_{jj} = S^\pm = S_0 \pm S_1,$$

$$A_{jj} = A^\pm = A_0 \pm A_1,$$

(11)

знак «+» соответствует значениям индекса $j = 1, 4$, а знак «-» соответствует значениям индекса $j = 2, 3$

$$S_0 = \frac{a_1^2 \alpha_1^3}{2} \left[\partial_{a_1}^2 - \frac{1}{3} \right] \frac{e^{-\alpha_1}}{\alpha_1} + \frac{\alpha_2^7}{16} \left\{ \frac{1}{45} (a_2^2 + a_3^2) \partial_{a_2}^6 - \right. \\ \left. - \frac{1}{9} (a_2^2 + a_3^2) \partial_{a_2}^4 + \frac{1}{7} \left(a_3^2 + \frac{11}{15} a_3^2 \right) \partial_{a_2}^2 - \frac{1}{7} \left(\frac{1}{5} a_2^2 + \frac{1}{9} a_3^2 \right) \right\}$$

$$S_1 = a_1 a_2 \frac{\alpha_1^{3/2} \alpha_2^{7/2}}{48} \{ \partial_a^4 (1 - 3\partial_a^2 +) + 4\partial_a^3 - \partial_a + 3\partial_a^2 - (\partial_a^4 - 1) - \\ - 4\partial_a - \partial_a^3 + (3\partial_a^2 - \partial_a^4) \} \frac{(e^{a^-} - e^{-a^-}) e^{-a^+}}{\alpha^- \alpha^+},$$

$$A_0 = \left[-\frac{e^2}{\pi r_1} \right] \left\{ -a_1^2 \alpha_1^2 \partial_{a_1} \frac{e^{-\alpha_1}}{\alpha_1} + \frac{\alpha_2^7}{\alpha_1} \frac{1}{72} \left[\frac{1}{5} (a_2^2 + a_3^2) \partial_{a_2}^5 - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{14}{15} \partial_{a_2}^3 (a_2^2 + a_3^2) + \left(a_2^2 + \frac{11}{15} a_3^2 \right) \partial_{a_2} \right] \frac{e^{-a_2}}{\alpha_2} \right\},$$

$$A_1 = \left[-\frac{e^2}{\pi r_1} \right] \frac{a_1 a_2}{24} \alpha_1^{1/2} \alpha_2^{7/2} \{ \partial_a^2 - (3\partial_a^3 + - \partial_a^+) + 4\partial_a - \partial_a^2 + \\ + 3\partial_a^+ - \partial_a^3 \} \frac{(e^{a^-} - e^{-a^-}) e^{-a^+}}{\alpha^- \alpha^+}.$$

В формулах (11) приняты обозначения

$$a_1^2 = C_1^2 \pi r_1^3, \quad a_2^2 = C_2^2 \cdot 9\pi r_2^7, \quad a_3^2 = C_3^2 \cdot 9\pi r_2^7/2, \quad \alpha_1 = \frac{R}{r_1}, \\ \alpha_2 = \frac{R}{r_2}, \quad \alpha^\pm = (\alpha_1 \pm \alpha_2)/2.$$

Поскольку в двухцентровом приближении сохраняется осевая симметрия, то в рамках этого приближения перекрытие волновых функций снимает вырождение основного акцепторного уровня лишь частично. При этом образуются две двукратно вырожденные примесные полосы, соответствующих значениям $j=1, 4$ и $j=2, 3$.

При вычислении сумм Δ_k , входящих в закон дисперсии (11), будем считать распределение примесных центров однородным. Тогда, согласно [1],

$$\Delta_k = Z \frac{\sin kr}{kr}, \quad (12)$$

где Z — число ближайших соседей. В наших расчетах мы примем $Z=6$.

2. Структура примесной полосы в окрестности перехода Мотта—Андерсона

Формулы (11), (12) полностью описывают структуру примесной полосы. Для численных расчетов необходимо знать значения вариационных параметров r_1, r_2, C_1, C_2, C_3 , входящих в закон дисперсии (11). В наших расчетах мы используем результаты, полученные в работе Мисельского [6], где эти параметры рассчитаны в широком интервале изменения E_g (E_g — энергетический зазор

между зонами Γ_6 и Γ_8). Ниже приведены результаты численных расчетов атомных единицах

$$E_a = f, \quad \alpha_{1,2} = 2R/\rho_{1,2},$$

$$a_2^2 = 2F/[5 + \Phi], \quad a_3^2 = [3 + \Phi]/[5 + \Phi],$$

$$f = f_a + [f_b^2 + f_c]^{1/2},$$

$$F = \left\{ 1 + \left[\frac{f_b}{f_c^{1/2}} + \left[1 + \frac{f_b^2}{f_c} \right]^{1/2} \right]^{-2} \right\}^{-1},$$

$$f_a = (1 - 1/\rho_1)/\rho_1 + (1/3 - 1/\rho_2)/\rho_2,$$

$$f_b = (1 - 1/\rho_1)/\rho_1 - (1/3 - 1/\rho_2)/\rho_2,$$

$$f_c = (32/5)^2 \eta \rho_1^3 \rho_2 (\rho_1 + 5\rho_2)^2 / (\rho_1 + \rho_2)^{10},$$

$$\rho_1 = \rho_{10} + \rho_{1\eta} \eta \quad (\rho_{10} = 1.81, \quad \rho_{1\eta} = -0.675),$$

$$\rho_2 = \rho_{20} + \rho_{2\eta} \eta \quad (\rho_{20} = 1.45, \quad \rho_{2\eta} = -0.545),$$

$$\eta = 2(5 + \Phi^2)(\gamma_2/\gamma_1)^2, \quad \Phi = 3[(\gamma_3/\gamma_2)^2 - 1]. \quad (13)$$

В принятой нами системе единиц длины выражаются в приведенных боровских радиусах $a_b^* = \kappa^{\hbar^2/m^*e^2}$, где эффективная масса $m^* = m_0/\gamma_1$ определяется соотношением

$$\frac{2}{m^*} = \frac{1}{m_h} + \frac{1}{m_l} \quad (14)$$

(m_l и m_h — массы легких и тяжелых дырок соответственно). Энергия измеряется в единицах $e^2/\kappa a_b^*$. Через $\rho_{1,2}$ обозначены $r_{1,2}$, выраженные в атомных единицах. Формулы (13) справедливы для достаточно больших $E_g \gg E^*$. В нашем случае характерная энергия задачи $E^* = E_g$.

Параметры Латтинджера определяются выражениями [1]

$$\gamma_1 = 2\gamma_E + \delta\gamma_1, \quad \gamma_{2,3} = \gamma_E + \delta\gamma_{2,3}, \quad \gamma_E = -E_p/6E_g.$$

Здесь $\delta\gamma$ — поправки от учета высших зон, $E_p = 2P^2 m_0/\hbar$, P — матричный элемент. Формулы (11) — (14) позволяют вычислить плотность состояний дырок в примесной полосе узкощелевого полупроводника с заданными значениями E_g и $\delta\gamma$.

В нашей работе все численные расчеты проводились на примере $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ в интервале изменения E_g от 50 до 600 мэВ. Поправки от высших зон вычислялись по параметрам Латтинджера для HgTe . В расчетах использованы наборы параметров Латтинджера, приведенные в работе [8].

На рис. 1 приведены плотности состояний дырок, нормированные на единицу. Здесь концентрация примесных центров соответствует межпримесному расстоянию $R = 0.2$, $E_g = 100$ мэВ, параметры Латтинджера взяты из [9]. Кривые плот-

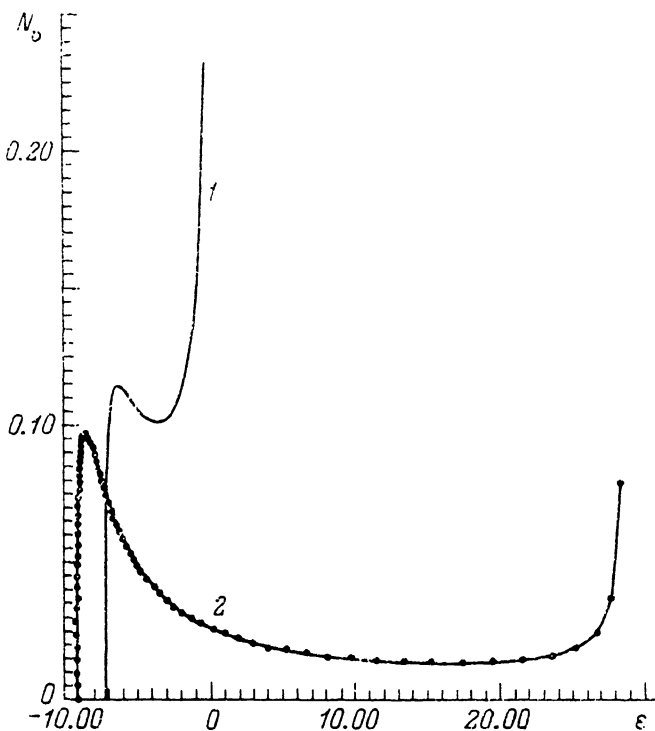


Рис. 1. Плотность состояний в акцепторной зоне N_v от энергии ϵ (в атомных единицах). $j = \pm 3/2$ (1), $-j = \pm 1/2$ (2), межпримесное расстояние $R = 0.2$, $E_g = 100$ мэВ, параметры Латтинджера [2].

ности состояний идентичны кривым, полученным для доноров в Γ_6 [2]. Отличие в том, что для дырок в Γ_8 имеются две двукратно выраженные зоны, соответствующие волновым функциям с индексами $j = 1, 4$ (сплошная кривая) и $j = 2, 3$ (кривая с расчетными точками). Ширины этих двух дырочных зон разнятся в несколько раз вблизи перехода Мотта. Эта асимметрия в сущности отражает различие в массах легких и тяжелых дырок в Γ_8 , которые при малых E_g может достигать нескольких порядков. Наличие этой асимметрии ставит перед нами вопрос о заполнении примесных зон.

На изолированном акцепторе дырка занимает любое из четырех состояний, соответствующих энергии E_a с равной вероятностью. И примесные уровни заполняются по принципу один акцептор—одна дырка. В случае примесной зоны, образовавшейся при перекрытии волновых функций акцепторов, понятие индивидуального центра теряет смысл. Состояния в зоне описываются новым квантовым числом k . Если распределение акцепторов достаточно однородно, то в области малых k , соответствующих большим пространственным масштабам, это квантовое число является достаточно хорошим и может служить для классификации состояний в примесной зоне. Поскольку закон дисперсии (11) используется исключительно для расчета плотности состояний, мы посчитали возможным распространить эту классификацию на всю примесную зону.

В зонах с $j = 1, 4$ и $j = 2, 3$ одному и тому же k соответствуют различные значения энергии. Поэтому при заполнении зон дырка помещается в то из состояний, соответствующих данному k , которое более выгодно энергетически. Перекрытие приводит к уширению акцепторного уровня E_a . При этом, как следует из соотношения (12), уровни, соответствующие значениям k из интервала $0 < kR < \pi$, сдвигаются в область энергий $E < E_a$, а уровни, соответствующие

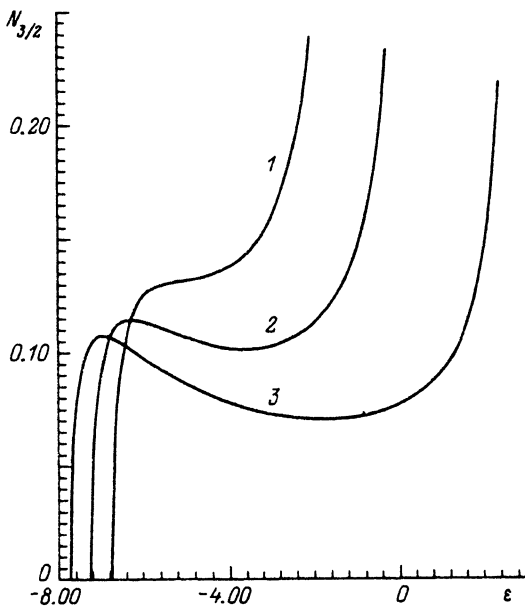


Рис. 2. Плотность состояний $N_{3/2}$ в акцепторной подзоне с $j = \pm 3/2$ от энергии ϵ . 1, 2, 3 соответствуют значениям $R = 0.22, 0.2, 0.18$. $E_g = 100$ мэВ. Параметры Латтинджера [2].

значениям $kR > \pi$, расположены теперь в области энергий $E > E_g$. Таким образом, энергетически выгодно заполнять широкую зону ($j = 1, 4$) в интервале $0 < kR < \pi$ и узкую зону ($j = 2, 3$) в области $kR > \pi$. Именно эти заполненные куски подзон и образуют в случае Γ_8 нижнюю зону Хаббарда.

Легко подсчитать, используя закон дисперсии (11), что в области $kR > \pi$ размещается примерно 0.64 от полного числа состояний в зоне. Поэтому переход Мотта—Андерсона определяется эволюцией именно узкой зоны. Эволюция зоны ($j = 1, 4$) при изменении уровня легирования изображена на рис. 2. Параметры

Латтинджера и E_g те же, что и на рис. 1. Кривые 1, 2, 3 соответствуют межпримесным расстояниям $R = 0.22, 0.2, 0.18$.

3. Условие перехода Мотта—Андерсона

При достаточно низких концентрациях акцепторов каждое состояние k занято одной дыркой. Вторая дырка в состоянии с тем же k вследствие кулоновского отталкивания попадает в верхнюю подзону Хаббарда. Будем оценивать энергию отталкивания дырок, находящихся в состоянии k , энергией кулоновского взаимодействия U двух дырок на изолированном акцепторе

$$U_{jj'} = \int dr_1 dr_2 |\varphi_j(r_1)|^2 \frac{e^2}{\pi r_{12}} |\varphi_{j'}(r_2)|^2. \quad (15)$$

В сферическом приближении ($\gamma_2 = \gamma_3$) этот интеграл легко вычисляется стандартными методами [7]. Энергия отталкивания зависит от того, в каких состояниях j и j' расположены дырки на акцепторе. Однако, как показывают вычисления, эти величины отличаются друг от друга менее чем на 0.01. Поэтому мы положим все эти энергии равными одной и той же величине U

$$U = \frac{e^2}{\pi r_1} \left\{ \frac{5}{8} a_1^4 + \frac{25}{48} a_2^4 \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \left[1 - \frac{231}{2^{10}} \right] + \frac{5}{6} a_1^2 a_2^2 \alpha_1^2 \alpha_2^7 \times \right. \\ \times \left[\frac{3}{\alpha_1^2 \alpha_2^2} + \frac{1}{\alpha_1^3 \alpha_2^6} - \left[\frac{3}{2^7 \alpha_2^2 \alpha_1^{+7}} + \frac{5}{2^6 \alpha_2^3 \alpha_1^{+6}} + \frac{6}{2^5 \alpha_2^4 \alpha_1^{+5}} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{6}{2^4 \alpha_2^5 \alpha_1^{+4}} + \frac{5}{2^3 \alpha_2^6 \alpha_1^{+3}} + \frac{3}{2^2 \alpha_2^7 \alpha_1^{+2}} + \frac{3}{2^7 \alpha_1^2 \alpha_2^{+7}} + \frac{1}{2^6 \alpha_1^3 \alpha_2^{+6}} \right] \right\}. \quad (16)$$

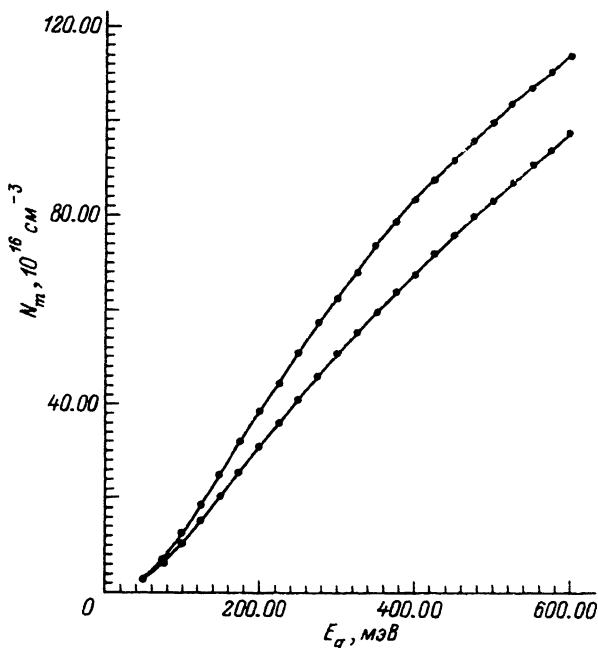


Рис. 3. Критическая концентрация акцепторов N_m (10^{16} см $^{-3}$) от E_g (мэВ).

Верхняя кривая соответствует параметрам Латтинджера [10], нижняя — параметрам Латтинджера [9].

Численные оценки с параметрами Латтинджера [9] показывают, что в широком интервале значений E_g от 50 до 600 мэВ с точностью до нескольких процентов $U = E_g$. Таким образом, верхняя подзона Хаббарда оказывается сильно перекрытой с зоной проводимости. Поэтому для перехода Мотта мы выбираем тот же критерий, что и в работе [2] для Γ_6 . А именно будем называть критической концентрацией N_m такую концентрацию акцепторов, при которой нижняя зона Хаббарда соприкасается с зоной проводимости. Поскольку параметры зоны S_{jj} и A_{jj} представлены экспонентами, нагруженными полиномами, то естественно предположить, что величина, стоящая в экспоненте R_m/r_2 (R_m — межпримесное расстояние при $N = N_m$) слабо зависит от E_g и от выбора набора параметров Латтинджера. Критические концентрации N_m просчитывались по формулам (11) — (13) для тринадцати различных наборов Латтинджера в интервале изменения $50 \text{ мэВ} < E_g < 600 \text{ мэВ}$. (Все ссылки на экспериментальные значения параметров Латтинджера см. в работе [8]).

Результаты численных расчетов приведены на рис. 3, 4. На рис. 3 изображены зависимости N_m от E_g ; верхняя кривая соответствует набору параметров Латтинджера [10], а нижняя набору параметров [9]. Кривые, соответствующие всем прочим наборам, попадают в область, заключенную между этими кривыми, и на рис. 3 не отображены. На рис. 4 показана зависимость величин R_m/r_2 от E_g для тех же наборов параметров, что и на рис. 3. Из приведенных расчетов следует, что если положить величину R_m/r_2 равной постоянной C , то при значении $C = 2.59$ максимальное отклонение комбинации R_m/r_2 от C составляет менее 3% во всем интервале изменения E_g для любого из наборов параметров Латтинджера, приведенных в [8]. Таким образом, в пределах той точности, которую допускает само описание в модели сильной связи, можно положить $C = \text{const}$, а условие перехода Мотта описывать простым алгебраическим уравнением

$$N_m^{1/3} a_b^* = 0.48 / \rho_2,$$

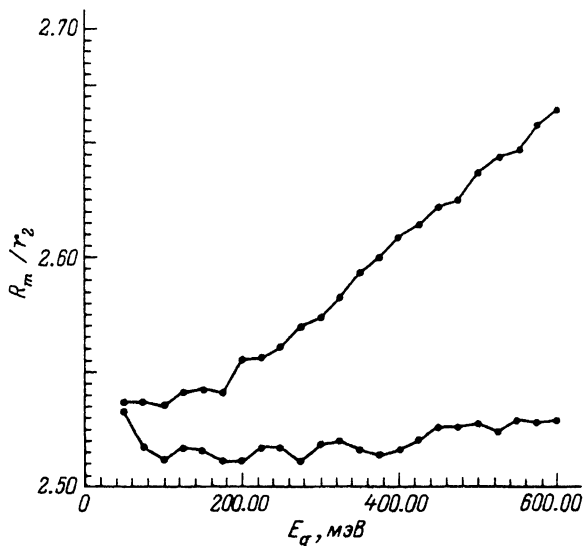


Рис. 4. Основной параметр теории R_m/r_2 от E_g (мэВ) для параметров Латтинджера [9] (верхняя кривая) и [10] (нижняя кривая).

где ρ_2 — вариационный параметр, который выражается через параметры Латтинджера по формулам (13). В сферическом приближении ($\gamma_2 = \gamma_3$) величина C принимает значение $C = 2.54$, при этом максимальное отклонение R_m/r_2 от C составляет менее 1%.

При концентрациях акцепторов $N > N_m$ дырки из нижней подзоны Хаббарда перетекают в зону проводимости. Обозначим через N^+ концентрацию дырок в области энергий $E > 0$. На рис. 5 изображены зависимости N^+/N при $E_g = 50, 100, 150$ мэВ. Как показывают расчеты, в зоне Γ_8 , как и в зоне Γ_6 , плотность состояний в примесной зоне на уровне Ферми в несколько раз меньше, чем плотность состояний в зоне проводимости. Поэтому величина N^+ близка по своим значениям к концентрации дырок в зоне проводимости и может служить для оценки этой величины. Согласно рис. 5, на начальном этапе перехода Мотта при $N^+ > N_m$ концентрация дырок в зоне проводимости очень круто возрастает и лишь при концентрациях порядка нескольких N_m выходит на насыщение. К сожа-

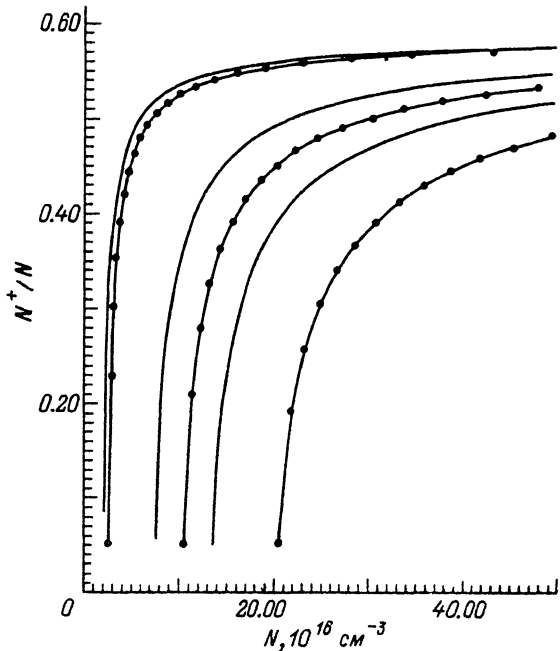


Рис. 5. Приведенная концентрация дырок с энергией $E > 0$ N^+/N от концентрации акцепторов N (10^{16} см $^{-3}$).

Сплошные кривые — в сферическом приближении, кривые с расчетными точками — с учетом гофрировки изоэнергетической поверхности. Кривые расположены в порядке возрастания E_g слева направо ($E_g = 50, 100, 150$ мэВ; параметры Латтинджера [9]).

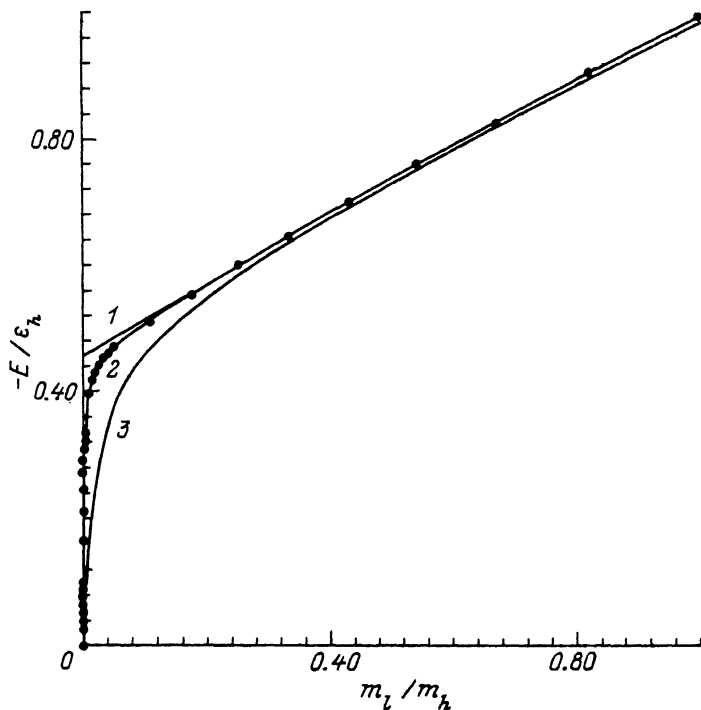


Рис. 6. Энергия связи дырки на акцепторе $-E/\varepsilon_h$ от отношения масс легкой и тяжелой дырок m_l/m_h .

Кривые 1, 2, 3 соответствуют численным расчетам в [11], [13], [14].

лению, именно в этой области насыщения концентраций дырок двухцентровое приближение, составляющее основу наших расчетов, оказывается непригодным для описания. Сплошные кривые получены в сферическом приближении. Эти кривые показывают, что, несмотря на то что пренебрежение гофрировкой практически не меняет вида основного уравнения (17), тем не менее изотропное приближение может занижить критические концентрации в несколько раз. Причем учет гофрировки оказывается существеннее для больших E_g . Столь значительное влияние анизотропии изоэнергетической поверхности на величину N_m обусловлено сильной зависимостью вариационного параметра ρ_2 от параметров Латтинджера.

В заключение заметим, что при использовании волновых функций Шехтера [4, 6] критическая концентрация N_m может менять свое значение на два порядка с изменением E_g (рис. 3). Согласно формуле (17), N_m обратно пропорциональна кубу поперечника волновой функции акцептора. Поэтому чем сильнее зависимость энергии основного состояния акцептора от E_g , тем сильнее зависимость радиуса волновой функции, а вместе с ней и критической концентрации от этого параметра. На рис. 6 приведены расчетные зависимости энергии связи от отношения масс легкой и тяжелой дырок m_l/m_h , полученные разными авторами [6, 11-13]. Видно, что в широком интервале изменения m_l/m_h от 0.1 до 1 все результаты совпадают. Но в области малых E_g , соответствующей малым m_l , решения, полученные разными авторами, кардинально различны. Так, согласно Гельмонту [11] (кривая 1), энергия связи стремится к конечному пределу $4\varepsilon_h/9$ (ε_h — боровская энергия тяжелой дырки), в то время как вариационные расчеты на волновых функциях Балдереша [13] и Шехтера [4] (кривые 2, 3 соответственно) приводят к предельному значению энергии связи, равному 0. Конечно, вид уравнения (17) для N_m не может существенно зависеть от вида

волновых функций, однако расчетные значения N_m зависят от того, какие численные значения параметра ρ_2 будут подставлены в это уравнение. Именно поэтому наши численные расчеты, основанные на вариационных решениях [2], приводят к столь резкой зависимости N_m от E_g в области малых значений E_g .

Автор благодарит Г. И. Харуса за полезные обсуждения работы.

Список литературы

- [1] Цидильковский И. М., Харус Г. И., Шелушнина Н. Г. Примесные состояния и явления переноса в бесщелевых полупроводниках. Свердловск, 1987. 152 с.
- [2] Михеев В. М. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 4. С. 1040—1045.
- [3] Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры. М.: Мир, 1969. 358 с.
- [4] Schechter D. J. // J. Phys. Chem. Solids. 1962. V. 23. P. 237—247.
- [5] Kaczmarek E. // Acta Phys. Polonica. 1966. V. 30. № 2 (8). P. 267—275.
- [6] Mycielski J., Rigaux C. // J. Physique. 1983. V. 44. № 9. P. 1041—1049.
- [7] Слэтер Дж. Электронная структура молекул. М.: Мир, 1965. 587 с.
- [8] Якунин М. В. // ФТП. 1988. Т. 22. № 8. С. 1452—1461.
- [9] Tanaka S., Takeyama S., Miura N., Uchida S. // J. Phys. Soc. Japan. 1987. V. 56. № 2. P. 788—793.
- [10] Shimizu K., Narita S., Nisida Y., Ivanov-Omskii V. I. // Sol. St. Commun. 1979. V. 32. № 4. P. 327—330.
- [11] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. // ФТП. 1971. Т. 5. № 11. С. 2191—2193.
- [12] Lipari N. O., Baldereschi A. // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 25. № 24. P. 1660—1664.
- [13] Baldereschi A., Lipari N. O. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. № 6. P. 2697—2709.

Институт физики металлов УрО РАН
Екатеринбург

Поступило в Редакцию
16 января 1992 г.