

©1994 г.

ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЩЕЛИ МЕЖДУ ЗОНОЙ ПРОВОДИМОСТИ И ВЕРХНЕЙ ЗОНОЙ ХАББАРДА

Е.М.Гершензон, Ф.М.Исмагилова, Л.Б.Литвак-Горская

Московский педагогический государственный университет, 119882, Москва, Россия

(Получена 20 октября 1993 г. Принята к печати 10 ноября 1993 г.)

Исследована зависимость энергетической щели ϵ между дном зоны проводимости и верхней зоной Хаббарда в широком диапазоне легирования: $0.07 \leq N^{1/3}a \leq 0.25$ (N — концентрация примеси, a — радиус локализации носителя заряда на примеси). Показано, что при $N^{1/3}a \leq 0.12$ экспериментальные значения $\epsilon(N)$ совпадают с рассчитанными по теории Х.Нишимуры.

1. Цель работы — исследование зависимости энергетической щели между зоной проводимости и верхней зоной Хаббарда (ВЗХ) от концентрации примесей в широком диапазоне легирования.

Известно [1], что в легированных и слабо компенсированных полупроводниках, когда средний радиус сферы, занимаемой примесным центром $r = (3/4\pi N)^{1/3}$, варьируется в пределах $r \simeq (2.5 \div 6)a$ ($N^{1/3}a \simeq 0.12 \div 0.25$), наблюдается проводимость по зоне делокализованных примесных состояний — ϵ_2 -зоне. Здесь N — концентрация основной примеси, a — радиус локализации носителя заряда на примесном центре. Энергетическая щель между ϵ_3 -зоной и зоной основных примесных состояний (ϵ_2 -зоной), определяемая как энергия ϵ_2 , уменьшается с увеличением N , $\epsilon_2 = 0$ соответствует переходу металл-изолятор (переходу Мотта), $N^{1/3}a \simeq 0.25$ [2]. Принято считать, что ϵ_2 -зона — это верхняя зона Хаббарда, т.е. зона, образованная вследствие перекрытия D^- -состояний доноров (A^+ — состояний акцепторов). Схема примесных зон представлена на рис. 1 (вставка) [2]. Основная информация об ϵ_2 -зоне и зависимости $\epsilon_2(N)$ найдена из гальваномагнитных измерений, в частности, из температурной зависимости электропроводности σ , для которой, начиная с $N^{1/3}a \geq 0.12$, характерно появление участка экспоненциальной зависимости $\sigma(T^{-1})$ с энергией активации ϵ_2 . Заметим, что полученное при этом максимальное значение энергии составляет $\epsilon_2 \simeq 0.6$ Ry, в то время как энергия электрона

в D^- -состоянии $J \simeq 0.05$ Ry, а делокализация D^- -состояний наблюдается при существенно меньших концентрациях примесей ($N^{1/3}a \geq 0.07$) [3]. Это свидетельствует о существовании проводимости по ϵ_2 -зоне и при $N^{1/3}a \leq 0.12$, не проявляющейся, однако, в гальваномагнитных измерениях из-за своей малости по сравнению с проводимостью по ϵ_3 -зоне и проводимостью за счет свободных носителей заряда.

2. Возможность исследования ВЗХ при относительно слабом легировании возникла с началом изучения фотопроводимости (ФП) в очень слабо компенсированном Si (степень компенсации $K \leq 10^{-4}$) при низком уровне примесного возбуждения, когда существенный вклад в полную проводимость дают фотоэлектроны D^- -зоны [3,4]. Этот факт приводит к тому, что концентрация свободных электронов определяется не только интенсивностью примесного возбуждения, но и термической активацией из D^- -зоны, вследствие чего в диапазоне температур $T \simeq 7 \div 14$ К ФП за счет свободных электронов σ_c имеет температурную зависимость вида [4]

$$\ln(\sigma_c) \sim (-\epsilon/kT),$$

где ϵ — энергетический зазор между зоной проводимости и нижним краем делокализованных состояний в D^- -зоне. Таким образом, исследование $\sigma_c(T)$ позволяет найти зависимость ϵ от концентрации легирующей примеси в том диапазоне концентраций, когда существенна проводимость за счет свободных носителей заряда σ_c (для p -Si(B) — это $N \leq 1.2 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$) [5].

3. Нами исследована низкотемпературная фотопроводимость p -Si(B) с $N \simeq 4 \cdot 10^{16} \div 2 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$ и $10^{-2} > K > 10^{-4}$ при малом уровне примесного возбуждения $W_{ph} = 0.25$ с $^{-1}$. Выполненное нами ранее [4,5] исследование $\sigma_c(T)$ позволяет найти только величину $\epsilon(N)$ и не дает иной информации о ВЗХ. На рис. 1 представлены экспериментальные значения ϵ и рассчитанная по [6] теоретическая зависимость $\epsilon(N)$, которые хорошо совпадают. Из рисунка видно монотонное возрастание ϵ по мере увеличения N .

Работа [6], как нам известно, является единственной попыткой теоретического рассмотрения ВЗХ в полупроводниках, выполненного для D^- -состояний в приближении сильной связи, но без учета флуктуационного потенциала заряженных примесей, поскольку предполагалось, что $K = 0$. Одним из результатов [6] является расчет ширины энерге-

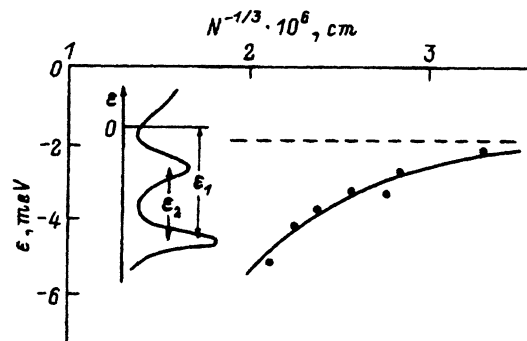


Рис. 1. Зависимость ширины энергетической щели между зоной проводимости и дном D^- -зоны от концентрации примесей в Si(B).

На вставке — схема примесных зон в полупроводниках по [2].

тической щели ε между зоной проводимости и дном D^- -зоны в зависимости от параметров материала и концентрации примесей:

$$\varepsilon \approx -J - 4\pi a^3 N V_0 \left[1 + 16(4 + \alpha)/(2 + \alpha)^3 \right], \quad (1)$$

где J — разность энергий основных состояний нейтрального донора и отрицательно заряженного донора, $V_0 = e^2/(2\kappa a)$ — кулоновский потенциал, $\alpha \approx 0.235$ — коэффициент, численно равный отношению радиусов основного и D^- -состояния донора. Для p -Si(B) $J = 2$ мэВ, $a = 2.3 \cdot 10^{-7}$ см.

Совпадение расчетных и экспериментальных значений ε нам представляется не случайным для столь слабо компенсированного материала при $N^{1/3}a < 0.12$, поскольку в нем флуктуационный потенциал заряженных примесей [7]

$$W = 0.26e^2\kappa^{-1}N^{1/3}K^{1/4}$$

мал по сравнению с ε . Так, в образце с $N \leq 2 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$ и $K \approx 10^{-4}$ $W \leq 0.2$ мэВ, т.е. более чем в 10 раз меньше ε . В остальных, менее легированных образцах, величина W/ε еще меньше.

4. Рассмотрим экспериментальные значения ε во всем диапазоне концентраций примесей, где существует проводимость по ВЗХ. Для этого, помимо использованных нами результатов измерений ФП в Si [8], привлечем данные по исследованию температурной зависимости в n -Ge(Sb) [9,10], где компенсация примесей значительно выше ($K \leq 0.15$). На рис. 2 представлены теоретические и экспериментальные значения $\varepsilon(N)$ в относительных единицах: ε — в долях Ридберга, концентрация примесей — в виде безразмерного параметра $N^{1/3}a$. В случае ε_2 -проводимости $\varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, где ε_1 — энергия активации проводимости по свободной зоне. Значения ε , найденные по температурной зависимости проводимости $\sigma(T)$, в области ε_2 -проводимости объединены

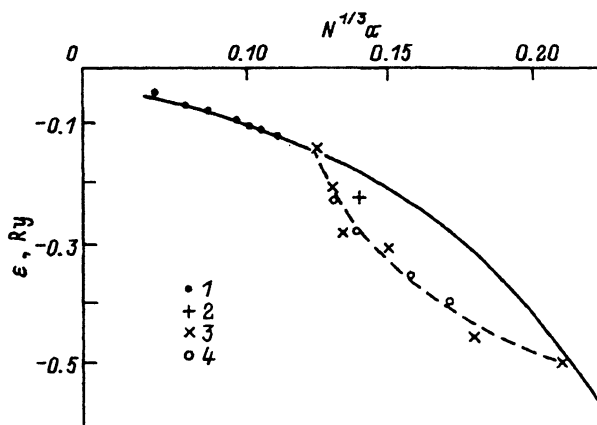


Рис. 2. Зависимость энергетической щели между зоной проводимости и дном D^- -зоны от безразмерного параметра $N^{1/3}a$ для различных полупроводников: 1 — результаты наших измерений в p -Si(B), 2 — данные [8] для p -Si(B), 3,4 — данные [9,10] для n -Ge(B).

штриховой кривой. Из рисунка видно, что экспериментальная зависимость $\varepsilon(N)$ для них не зависит от компенсации, т.е. не отвечает теории, за исключением самых малых концентраций, когда $N^{1/3}a \leq 0.125$.

5. Настоящая работа не является попыткой реанимации теории [6], часть положений которой нам не вполне понятна. Возможно, работа [6] не получила дальнейшего развития в связи с тем, что не было совпадения расчета с экспериментом, несмотря на предпринятую автором не вполне обоснованную корректировку рассчитанных по (1) значений ε . Из рис. 2 видно, что совпадение теории с экспериментом должно иметь место при существенно меньших концентрациях примесей.

Список литературы

- [1] Н. Frizshe. Phys. Rev., **99**, 406 (1955).
- [2] Н. Мотт, Е. Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах. Т. 1. М.: Мир (1982).
- [3] Л.А. Ворожцова, Е.М. Гершензон, Ю.А. Гурвич, Ф.М. Исмагилова, А.П. Мельников, Р.И. Рабинович. Письма в ЖЭТФ, **43**, 480 (1986).
- [4] Л.А. Ворожцова, Е.М. Гершензон, Ю.А. Гурвич, Ф.М. Исмагилова, Л.Б. Литвак-Горская, А.П. Мельников. ЖЭТФ, **93**, 1419 (1987).
- [5] Е.М. Гершензон, Ф.М. Исмагилова, Л.Б. Литвак-Горская, А.П. Мельников. ЖЭТФ, **100**, 1029 (1991).
- [6] Н. Nishimura. Phys. Rev. A, **138**, 815 (1965).
- [7] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. Электронные свойства полупроводников. М.: Наука (1979).
- [8] Ф.М. Исмагилова, Л.Б. Литвак-Горская, Г.Я. Луговая, И.Е. Трофимов. ФТП, **25**, 255 (1991).
- [9] Е.М. Гершензон, Л.Б. Литвак-Горская, Г.Я. Луговая. ФТП, **15**, 1284 (1981).
- [10] E. Davis, W. Compton. Phys. Rev. A, **140**, 2183 (1965).

Редактор Л.В. Шаронова
