

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В УСЛОВИЯХ СТРУКТУРНОГО БЕСПОРЯДКА

Гинзбург Л. П.

Теоретическая глубина полосы локализованных состояний сравнивается с экспериментальными данными по фотопроводимости, обусловленной $D^- (A^+)$ -центрами. Показано, что при надлежащем учете положения порога подвижности в зоне проводимости согласие оказывается хорошим.

Введение. Как и в [1], рассматривается структурно неупорядоченная система, определяемая интегралом переноса ¹

$$V(R) = -V_0 \exp(-R/a). \quad (1)$$

В [1] было показано, что в довольно широком интервале концентраций энергетический спектр имеет следующий вид: нижнюю его часть образует проводящая зона, а верхнюю — полоса локализованных состояний шириной

$$\Delta = \pi^2 \frac{\hbar^2}{2m\beta^2} N^{2/3}. \quad (2)$$

Формула (2) сравнивалась с некоторыми экспериментами, было установлено, что согласие имеет место при

$$\beta = 1.014. \quad (3)$$

Написанная цифра соответствует наблюдаемому условию образования D^- -зоны в $\text{Ge}(\text{Sb})$ и получена в условиях водородоподобного приближения. По нашему мнению, трудно найти более «чистый» пример системы со структурным беспорядком, описываемой (1), чем электрон (или дырка), принадлежащий (принадлежащая) совокупности случайно расположенных нейтральных доноров (или акцепторов). Поэтому в настоящей работе формула (2) при $\beta = 1.014$ (3) применяется к изучению зависимости от N порога фотопроводимости, обусловленной $D^- (A^+)$ -центрами [$D^- (A^+)$ -ФП]. Показано, что при надлежащей оценке положения порога подвижности в зоне проводимости (что ранее для неравновесных условий никогда не делалось) оказывается возможным интерпретировать данные наблюдения на широком интервале значений N .

1. Порог подвижности в зоне проводимости

Очевидно, как при наличии, так и при отсутствии проводящей зоны механизм локализации за счет структурной неупорядоченности должен быть одним и тем же. Поэтому и при малых N глубина полосы локализованных состояний должна определяться формулами (2), (3). Это обстоятельство позволяет по-новому подойти к оценке зависимости порога $D^- (A^+)$ -ФП от N . Основная трудность здесь состоит в следующем. Рассматриваемая фотопроводимость возникает благодаря фоновому подсвету, который переводит примесные электроны в зону проводимости (дырки — в валентную зону). Далее эти электроны (дырки),

¹ Обозначения везде те же, что и в [1].

если они не рекомбинируют, могут захватываться на нейтральные центры и «проваливаться» во флуктуационные потенциальные ямы глубиной (2). Такой механизм при низких температурах порождает сильно неравновесную систему, содержащую относительно большое количество электрических зарядов [2, 3]. При этом профиль дна зоны проводимости должен заметно деформироваться и соответственно порог подвижности в ней E_c должен сместиться. Как видно из рис. 1, не имея сведений о положении E_c , невозможно определить порог $D^- (A^+) - \text{ФП} (E_n)$.² Согласно [5, 6], можно ожидать, что

$$E_c = \xi \frac{e_0^2}{\chi} N^{1/2}, \quad (4)$$

где величина ξ должна зависеть от концентрации зарядов. Однако каких-либо «законенных» рецептов определения ξ в рассматриваемых условиях не существует.

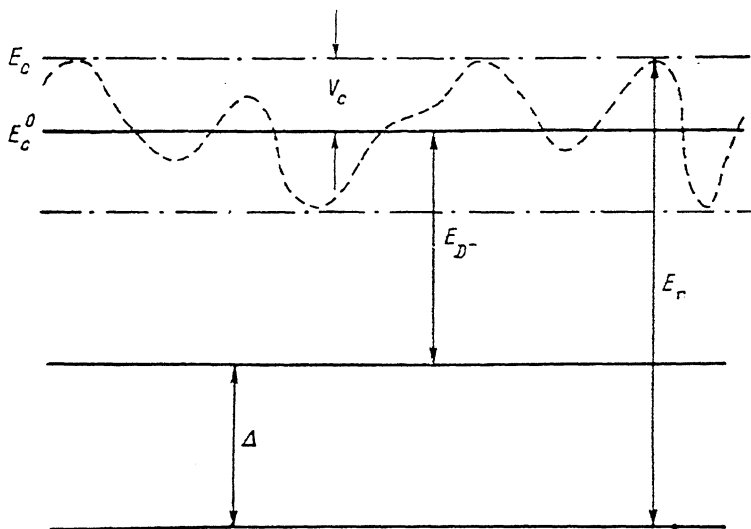


Рис. 1. Схема энергетических уровней вдоль пути протекания.

E_c^0 — уровень невозмущенного дна зоны проводимости. Штриховая линия — случайный потенциал.

Для преодоления трудности рассмотрим следующую модель (которая представляется физически оправданной). Согласно Андерсону [7], узлы основной решетки остаются резонансными, если вариация потенциала на них ограничена:

$$|V(r)| \leq V_c. \quad (5)$$

С другой стороны, если $E \geq E_c$, то цепочки соседних узлов должны обеспечивать протекание. Поэтому если $F(V)$ — функция распределения значений потенциала, то должно выполняться соотношение

$$\int_{-V_c}^{V_c} F(V) dV = \theta_c, \quad (6)$$

где $\theta_c = \text{const}$. Далее мы покажем, что в области рассматриваемых концентраций эффектом туннелирования под барьеры потенциального рельефа зоны проводимости можно пренебречь, поэтому $E_c \simeq V_c$. Проблема, таким образом, сводится к отысканию функции $F(V)$.

Будем исходить из следующих предположений.

1) В системе имеются два типа случайно расположенных заряженных центров: положительные с концентрацией N_+ и отрицательные с концентрацией N_- .

² Косвенно сказанное подтверждается оценками в условиях равновесия (при более высоких T) [4].

При этом в силу малости температуры концентрацией электронов в зоне проводимости можно пренебречь и положить

$$N_+ = N_- \quad (7)$$

2) Локальные концентрации N_+ (\mathbf{r}) и N_- (\mathbf{r}) можно рассматривать как функции $E_c^0 + V(\mathbf{r})$, где E_c^0 — энергия невозмущенного дна зоны проводимости, отсчитанная от уровня донора. При этом

$$|V(\mathbf{r})| \ll E_c^0 \quad (8)$$

3) Электрон, который попадает в зону проводимости, подвергается воздействию потенциалов φ_+ ($|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha|$) со стороны положительных центров, расположенных в точках \mathbf{R}_α , и потенциалов φ_- ($|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\beta|$) со стороны отрицательных центров, расположенных в точках \mathbf{R}_β . Условие (8) позволяет линеаризовать уравнение Пуассона, поэтому

$$\varphi_\pm(r) = \mp \frac{e_0^2}{\chi r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \quad (9)$$

4) Так как явный вид функций $N_\pm(E_c^0 + V(\mathbf{r}))$ неизвестен, определить радиус экранирования r_0 непосредственно из уравнения Пуассона невозможно. Тем не менее мы воспользуемся следующими соображениями. В рассматриваемых нами условиях в силу неравновесности системы экранирование не может быть связано с перемещением электронов в область положительного потенциала. Вместо этого можно представить себе следующую картину. Как указывалось, электрон, возбужденный в зону проводимости фоновым подсеом, может либо рекомбинировать, либо образовать заряженный центр. Естественно считать, что последний случай будет преимущественно реализовываться вблизи таких точек пространства, которые равноудалены от ближайших положительных центров. Такая картина воссоздает черты бинарного соединения. Поэтому можно ожидать, что экранирование осуществляется в объеме элементарной ячейки. В этом случае, воспользовавшись «кубической» аналогией, мы сможем написать

$$N_\pm r_0^3 \sim 4 \quad (10)$$

Если исходить из определения

$$F(V) = \int \frac{d\mathbf{r}_1}{\Omega} \int \frac{d\mathbf{r}_2}{\Omega} \dots \int \frac{d\mathbf{r}_{N_+ + N_-}}{\Omega} \delta\left(V - \sum_\alpha \varphi_+(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha|) - \sum_\beta \varphi_-(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\beta|)\right) \quad (11)$$

то несложно проверить, что, применив метод Маркова [8], мы в условиях (7), (9) будем иметь

$$F(V) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i s V + 2N_+ f(s)} \quad (12)$$

где

$$f(s) = \int d\mathbf{r} \left[\cos\left(\frac{e_0^2}{\chi r} e^{-\frac{r}{r_0} s}\right) - 1 \right] \quad (13)$$

При этом если

$$\left(\frac{e_0^2}{\chi r_0 V}\right)^2 \ll 1, \quad (14)$$

то (12) переходит в гауссовское распределение

$$F(V) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \gamma} \exp\left(-\frac{V^2}{\gamma^2}\right) \quad (15)$$

где

$$\gamma = \left(4N_+ \int d\mathbf{r} \left(\frac{e_0^2}{\chi r}\right)^2 e^{-2\frac{r}{r_0}}\right)^{1/2} = 2\sqrt{2\pi} \frac{e_0^2}{\chi r_0} (N_+ r_0^3)^{1/2} \sim 6.32 \frac{e_0^2}{\chi} N_+^{1/3} \quad (16)$$

и использовано (10).

Подставив (15), (16) в (6) и учитывая, что для рассматриваемых концентраций $\theta_c \sim 0.2$ [9], мы, как нетрудно проверить, получим

$$E_c \simeq V_c = 0.18\gamma = 1.14 \frac{e_0^2}{z} N_{\pm}^{1/2}. \quad (17)$$

Зависимость порога $D^-(A^+)$ -ФП от N особенно отчетливо наблюдалась в Si<P> и Si. В работах [3, 10] соответственно установлено, что

$$N_{\pm}(\text{Si}<\text{B}>) \simeq 0.05N, \quad N_{\pm}(\text{Si}<\text{P}>) \simeq 0.02N, \quad (18)$$

поэтому из (17), (4) следует

$$\xi(\text{Si}<\text{B}>) \simeq 0.42, \quad \xi(\text{Si}<\text{P}>) \simeq 0.31. \quad (19)$$

Убедимся теперь в справедливости использованных приближений. Вероятность туннелирования под горбы потенциального рельефа имеет порядок

$$\exp\left(-\frac{r_0 \sqrt{mV_c}}{\hbar}\right) \leq \exp\left[-\frac{2.79}{(\nu N^{1/2} a_0)^{1/2}}\right]. \quad (20)$$

В (20) использованы выражения (17), (18), (10), а также соотношения

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \nu W_0 a_0^2, \quad W_0 = \frac{e_0^2}{2z a_0}, \quad (21)$$

где a_0 — борковский радиус примеси.³ В условиях экспериментов по $D^-(A^+)$ -

Значения коэффициента ν , вычисленные по формуле (21), а также полученные из (23) с помощью наблюдаемых значений N_c

Вещество	$a_0, \text{ \AA}$	m/m_0	ν	$N_c^{1/2} a_0$	$\nu(N_c)$
G<Sb>	42	0.22	0.89	0.093—0.124 [2]	0.76—1.00
Si<P>	17	0.33	1.09	0.114—0.135 [11]	0.92—1.09
Si	23	0.16	1.67	0.147—0.165 [11]	1.18—1.33

Примечание. Используются значения: $\kappa(\text{Ge}) = 15.7$, $\kappa(\text{Si}) = 11.7$.

ФП $\nu N_c^{1/2} a_0 \leq 0.17$ (см. далее). Поэтому правая часть (20) не превышает $\sim 10^{-3}$. Далее, подставив в левую часть (14) $V = \gamma$ и воспользовавшись (16), (10), будем иметь

$$(e_0^2/zr_0 V)^2 \sim (e_0^2/zr_0 \gamma)^2 = 0.01.$$

2. Порог фотопроводимости, обусловленной $D^-(A^+)$ -центрами

Согласно (2), (4), (21) и рис. 1, мы в условиях, когда $N_{\pm} \ll N$ [см. (18)], для порога $D^-(A^+)$ -ФП можем написать

$$E_{\text{п}} = E_{D^-(A^+)} + 2\xi W_0 N^{1/2} a_0 + \pi^2 \nu \frac{W_0}{3^2} (N^{1/2} a_0)^2, \quad (22)$$

где $E_{D^-(A^+)}$ — энергия связи изолированного $D^-(A^+)$ -центра. В таблице приведены величины ν , рассчитанные по (21) с помощью известных значений m и a_0 .

Если исходить из (35) [1], то, согласно (21), величина ν должна также удовлетворять соотношению

$$N_c^{1/2} a_0 = \nu \frac{\pi}{83^2 A} = 0.124 \nu, \quad (A = 3.08), \quad (23)$$

где N_c — концентрация, при которой появляется проводящая зона, и использовано (3). Значения N_c могут быть определены с помощью тех же экспериментов по $D^-(A^+)$ -ФП. Этим значениям соответствуют концентрации, при которых

³ В случае чисто водородоподобной модели $\nu = 1$.

спектр фотопроводимости переходит от вида «примесь—зона» к виду «зона—зона» [2, 11]. Из той же таблицы видно, что в случаях $\text{Ge}\langle\text{Sb}\rangle$ и $\text{Si}\langle\text{P}\rangle$ значения ν , рассчитанные по (24), очень хорошо укладываются в интервал, который диктуется данными по N_c . Этого, однако, нельзя сказать о случае $\text{Si}\langle\text{B}\rangle$. Здесь, по всей видимости, мы сталкиваемся с обычным затруднением, которое возникает из-за того, что априори неясен относительный вклад легкой дырки (для которой приведены данные в таблице) и тяжелой дырки. В такой ситуации естественно опираться на величину $\nu(N_c)$.

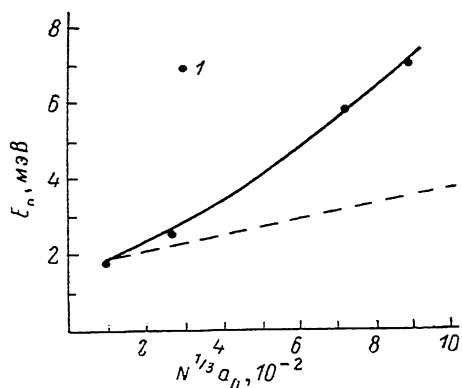


Рис. 2. Зависимость порога фотопроводимости E_n от $N^{1/3}a_0$ в случае $\text{Si}\langle\text{P}\rangle$.

1 — [11]. Штриховая линия соответствует неучету последнего члена (22).

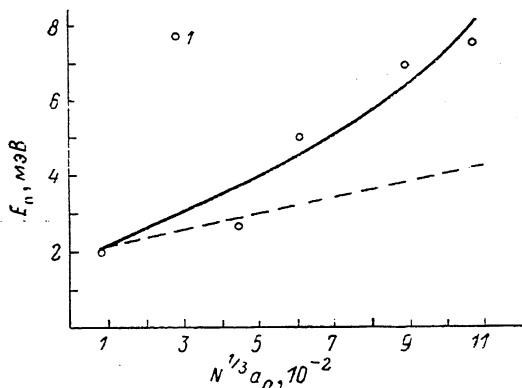


Рис. 3. Зависимость порога фотопроводимости E_n от $N^{1/3}a_0$ в случае $\text{Si}\langle\text{B}\rangle$.

1 — [13]. Штриховая линия соответствует неучету последнего члена (22).

На рис. 2, 3 представлены результаты сравнения значений E_n , вычисленных с помощью (22), (19), (3), с данными эксперимента. При этом были использованы значения $E_D^-(P) = 1.7$ мэВ, $E_{A^+}(B) = 2.0$ мэВ, а также данные таблицы [в случае $\text{Si}\langle\text{B}\rangle$ использовано значение $\nu = 1.25$, которое является средним арифметическим от приведенных в ней значений $\nu(N_c)$]. Экспериментальные точки взяты из обзора [11] и уточнены по оригинальным работам [12, 13]. Как видно, согласие теории с экспериментом на широком интервале значений N оказывается хорошим (особенно в случае $\text{Si}\langle\text{P}\rangle$).

3. Заключительные замечания

На рис. 2, 3 представлены также результаты оценки E_n без учета последнего члена (22). Видно, что при этом согласие не только количественно, но и качественно ухудшается. Это обстоятельство свидетельствует в пользу формул (2), (3) для ширины полосы локализованных состояний. Однако здесь возникает следующий вопрос. В рамках приближения сильной связи, которое применялось в [1], естественно ожидать, что при достаточно больших N указанная полоса должна исчезнуть. Это подтверждается машинными расчетами работы [14] при $N^{1/3}a_0 \geq 1.47$. Согласно [1], такой ситуации должно соответствовать $\beta = \infty$. Однако, из-за того что одно и то же значение β , определяемое (3), позволяет интерпретировать и переход Андерсона, и ширину полосы локализованных состояний, и порог $D^-(A^+) - \text{ФП}$, создается впечатление, что это значение универсально и не зависит от N . Возникшая проблема, на наш взгляд, серьезным образом затрагивает вопрос о независимом определении длины свободного пробега в системах рассматриваемого типа. Автор надеется обратиться к этому вопросу в отдельной статье.

Список литературы

- [1] Гинзбург Л. П. // ФТП. 1979. Т. 23. В. 5. С. 813—819.
- [2] Taniguchi M., Narita S., Hasegawa N., Kobayashi M. // J. Phys. Soc. Japan. 1978. V. 45. N 2. P. 545—552.
- [3] Александров В. Н., Гершензон Е. М., Мельников А. П., Серебрякова Н. А. // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. В. 2. С. 586—596.

- [4] Гинзбург Л. П. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 12. С. 2171—2173.
[5] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 5. С. 825—858.
[6] Нгуен Ван Лиен, Шкловский Б. И. // ФТП. 1979. Т. 13. В. 9. С. 1763—1770.
[7] Anderson P. W. // Phys. Rev. 1958. V. 109. N 5. P. 1492—1505.
[8] Эфрос А. Л. // УФН. 1973. Т. 111. В. 3. С. 451—458.
[9] Efros A. L., Nguen Van Lien, Shklovskii B. I. // J. Phys. C. 1979. V. 12. N 10. P. 1869—1881.
[10] Norton P. // J. Appl. Phys. 1976. V. 47. N 1. P. 308—320.
[11] Гершензон Е. М., Мельников А. П., Рабинович Р. И., Серебрякова Н. А. // УФН. 1980. Т. 132. В. 2. С. 353—377.
[12] Norton P. // Phys. Rev. Lett. 1976. V. 37. N 3. P. 164—168.
[13] Александров В. Н., Гершензон Е. М., Заяц В. А. и др. // Письма ЖЭТФ. 1978. Т. 28. В. 4. С. 226—230.
[14] Ching W. Y., Huber D. L. // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. N 2. P. 1096—1100.

Московский институт связи

Получена 26.09.1988
Принята к печати 15.05.1989
