

ПЕРЕХОДЫ АНДЕРСОНА В СИСТЕМЕ D^- -ЦЕНТРОВ

Л. П. Гинзбург

Московский институт связи, 105855, Москва, Россия
(Получена 27.03.1992. Принята к печати 4.06.1992)

Рассмотрены два типа переходов Андерсона, которые имеют место в системе D^- -центров примесного полупроводника. Первый переход связан с эффектом структурной неупорядоченности системы. В основе его анализа лежит теория энергетического спектра подобных систем, развитая в работе автора [ФТП, 23, 813 (1989)]. При выводе критерия перехода установлена существенная роль трехцентровых членов в гамильтониане. Критерий оказывается в гораздо лучшей согласии с экспериментом, нежели расчеты, основанные на других известных подходах. Второй переход связан с эффектом компенсации, которая порождает дополнительный диагональный беспорядок. Показано, что в этом случае в рамках той же модели спектра применение обычного критерия Андерсона позволяет интерпретировать влияние компенсации на проводимость по D^- -зоне.

Введение. Система D^- -центров в примесном полупроводнике представляет собой пример структурно-неупорядоченной системы (СНС). Подобные системы изучались в ряде работ, где установлено, что в СНС имеет место переход Андерсона ($[1^{-6}]$ и др.). Критерий перехода имеет вид

$$N^{1/3}a \cong C, \quad (1)$$

где N — концентрация случайно расположенных центров, $C = \text{const}$ и a — характерный радиус интегралов переноса, которым нередко приписывается модельное выражение

$$V(R) = -V_0 \exp(-R/a). \quad (2)$$

В соотношении (1) знак $<$ соответствует локализации всех состояний, а знак $>$ — появлению полосы состояний, которые делокализованы (т. е. проводящей зоны).

Несмотря на то что в цитированных работах применялись довольно рафинированные методы оценок, определенную неудовлетворенность вызывает то обстоятельство, что, как подмечено в [6, 7], имеет место большой разброс предсказываемых значений C (от 0.08 до 0.37). Возможно, в какой-то степени эта неудовлетворенность может быть смягчена тем, что полученные оценки варьируют вокруг цифры 0.26. Последняя экспериментально совпадает с условием перехода металл—неметалл у многих материалов [8]. Однако система D^- -центров здесь преподносит неожиданность. В такой системе эксперименты по фотопроводимости [9, 10] указывают на значение C , которое в ~ 2 раза превышает все предсказания упомянутых выше работ. Такая ситуация, на наш взгляд, является серьезной, так как система D^- -центров в полупроводнике — это один из самых «чистых» примеров СНС.

Эта же система преподносит еще одну неожиданность. Предположим, что мы находимся на проводящей стороне перехода (т. е. $N^{1/3} > C$). Известно, что

в этом случае в области гелиевых температур проводимость по примесям может быть представлена в виде суммы

$$\sigma = \rho_{02}^{-1} \exp(-\varepsilon_2/k_0T) + \rho_{03}^{-1} \exp(-\varepsilon_3/k_0T). \quad (3)$$

В написанном выражении последний член справа описывает прыжковую проводимость, связанную с термически активированными перескоками носителя между свободными центрами. Поэтому такая проводимость наблюдается только при наличии компенсации. Первый же член (3) (так называемая ε_2 -проводимость) как раз связывают с проводящей D^- -зоной, и такая интерпретация, естественно, предполагает, что степень компенсации K мала. Поэтому большинство работ, посвященных проводимости по D^- -зоне, относится к случаю, когда K не превышает нескольких процентов. Однако в работе [11], где изучался Ge(Sb), было установлено, что на кривой зависимости $\ln \sigma$ от $1/T$ участок ε_2 -проводимости наблюдается вплоть до $K \sim 0.8$. Этот результат к настоящему времени не объяснен и является предметом противоречивых толкований [12, 13]. В частности, в [12] высказан ряд соображений в пользу того, что на самом деле при $K \geq 0.2$ и среднем расстоянии между донорами $>150 \text{ \AA}$ в опытах [11] первый член (3) не связан с делокализованными носителями. Другими словами, при указанных условиях должен произойти обратный переход из делокализованных состояний в локализованные. Но причина и механизм этого перехода в [12] не раскрыты.

В связи с изложенным заметим следующее. По нашему мнению, для того чтобы разобраться в возможных механизмах делокализации (локализации) состояний в СНС и правильно оценить соответствующий критерий, необходимо опираться на такой подход, который изначально не сопряжен с использованием приближений, допускающих сильную количественную вариацию результата. Как видно, цитированные выше теоретические работы, несмотря на математическую изощренность или использование ЭВМ, от таких аппроксимаций не свободны. На наш взгляд, причина этого заключается в следующем. Рассмотрим общий вид гамильтониана СНС:

$$H = \sum_n a_n^+ a_n (E + \sum_{l \neq n} U(R_{ln})) + \sum_{m \neq n} a_m^+ a_n (E \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle + V(R_{mn}) + \sum_{l \neq m, n} \langle \varphi_m | W(|r - R_l|) | \varphi_n \rangle). \quad (4)$$

В написанном выражении a_n^+ , a_n — операторы рождения и уничтожения электрона на центре с координатой R_n (которая случайна), E — одноцентровая энергия, $\varphi_n \equiv \varphi(|r - R_n|)$ — одноцентровые волновые функции,

$$U(R_{ln}) = \langle \varphi_n | W(|r - R_l|) | \varphi_n \rangle, \quad (5)$$

$$V(R_{mn}) = \langle \varphi_m | W(|r - R_m|) | \varphi_n \rangle, \quad (6)$$

$W(r)$ — эффективный одноцентровый потенциал и $R_{mn} = R_m - R_n$. Автору не приходилось сталкиваться ни с одной работой, где бы не отбрасывался последний (трехцентровый) член (4) [так называемое приближение сильной связи (ПСС)]. Более того, во всех упомянутых выше работах отбрасывается то или иное бесконечное множество интегралов переноса (6). Прямого ответа на вопрос, насколько подобные аппроксимации могут влиять на картину делокализации и, в частности, на величину C , в (1) найти трудно. Формально как будто подразаумевается, что, согласно, например, (2), при больших R_{mn} отбрасываемые интегралы $V(R_{mn})$ (а тем более трехцентровые) малы. Но, по нашему мнению, действительная подоплека упомянутых аппроксимаций состоит в том, что в

рамках применявшихся методов отказ от них просто приводит к непреодолимым математическим трудностям.

Между тем, как установлено в [7], учет бесконечного множества пусть малых интегралов переноса может приводить к весьма существенным искажениям картины перехода.

Таким образом, возникает проблема альтернативного подхода, не сопряженного с необходимостью отбрасывать энергетические интегралы, фигурирующие в (4). В определенной степени такая программа была реализована в работе [14], где хотя и использовалось ПСС, но интегралы переноса учитывались все. Развитая в [14] теория приводит к новой картине энергетического спектра СНС, которая позволяет интерпретировать ряд эффектов, связанных с фотопроводимостью, обусловленной $D^-(A^+)$ -центрами [14-16]. Эта же теория приводит к новой аналитической расшифровке величины C .

В настоящей работе показано, что в рамках метода, развитого в [14], фактическое положение порога подвижности, определяющего эту величину, связано с вкладом трехцентровых членов гамильтониана (4). При этом для системы $D^-(A^+)$ -состояний получаются значения C , которые заметно превышают результаты [1-6], но гораздо лучше согласуются с экспериментом.

Далее показано, что благодаря модели энергетического спектра, полученного в [14], удастся продвинуться и в понимании эффекта компенсации. Показано, что при $K \geq 0.1$ данные [11] действительно относятся к разновидности прыжковой проводимости, осуществляемой в системе локализованных D^- -центров.

1. Переход Андерсона и применимость приближения сильной связи

В работе [14] на основе критерия Иоффе—Регеля для величины C получено выражение [формула (35) [14]]

$$C^3 = \frac{\hbar^2}{16m} \frac{\pi}{V_0 L^2}, \quad (7)$$

где L — длина свободного пробега электрона. Вообще говоря, согласно [16], в выражение (7) должна быть внесена поправка типа $\langle p^2/2m \rangle / 8\pi V_0$, где $\langle p^2/2m \rangle$ — средняя кинетическая энергия электрона, возбужденного в зону проводимости. Однако из данных той же работы следует, что при рассматриваемых в дальнейшем концентрациях $\langle p^2/2m \rangle \leq 0.33 (3/2) k_0 T$. При этом вклад поправки не превышает нескольких процентов, и мы ее учитывать не будем.

Заметим теперь, что в схеме [14] величина L появляется чисто феноменологически. Для нее было постулировано соотношение

$$L = \beta N^{-1/3}, \quad (8)$$

и множитель β определялся из эксперимента (см. далее). В настоящей работе, коль скоро мы стремимся получить более обоснованные сведения о критерии делокализации, необходима попытка независимого определения L . В связи с этим обратим внимание на следующее.¹ В работах [14, 16] применялось ПСС. В этом приближении естественно ожидать, что при больших N локализованных состояний в системе вообще не окажется. Сказанное подтверждается ЭВМ оценками при $N^{1/3} a \geq 1.47$ [5]. В [14] для энергии полосы делокализованных состояний в условиях (2) получено

¹ См. также заключительные замечания в [15].

$$E_k \leq \bar{E} - \pi^2 \frac{\hbar^2}{2mL^2}, \quad (9)$$

где E — потолок энергетического спектра, а величина

$$\Delta = \pi^2 \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad (10)$$

определяет ширину полосы локализованных состояний, занимающих верхнюю его часть. Поэтому если локализованные состояния отсутствуют, то, согласно (8)—(10), это возможно только при условии $L \rightarrow \infty$ и соответственно $\beta \rightarrow \infty$. В [14] на основании оптических данных по переходу Андерсона в системе D^- -центров, принадлежащих Ge(Sb), было установлено, что если исходить из (8), то в точке перехода

$$\beta = 1.014. \quad (11)$$

Эта же цифра затем позволила получить хорошие результаты для величины Δ в Ge(Sb) и α -SiO₂ [14], для зависимости перехода Андерсона в D^- -системе от температуры [16] и, главное, для зависимости порога D^- (A^+)-фотопроводимости в Si(P) и Si(B) от N . Перечисленные данные создают впечатление, что на самом деле значение β , определяемое (11), универсально и вопреки ППС не зависит от N .

Далее, допустим, что все состояния делокализованы. Согласно [14], в условиях (2) мы в этом случае будем иметь

$$E_k = \bar{E} - \frac{8\pi N \alpha^3 V_0}{(1 + \alpha^2 K^2)^2}, \quad (12)$$

где $0 \leq K < \infty$. С помощью (12) можно проверить, что плотность состояний будет иметь вид

$$g(E) = \frac{1}{8\pi^2 B \alpha^3} \left[\left(\frac{B}{\bar{E} - E} \right)^{1/2} - 1 \right]^{1/2} \left(\frac{B}{\bar{E} - E} \right)^{3/2}, \quad (13)$$

где $B = 8\pi N \alpha^3 V_0$. Из (13) видно, что при $E \rightarrow \bar{E} (K \rightarrow \infty)$ $g(E) \rightarrow \infty$. Этот результат (который сам по себе, возможно, не лишен интереса), по всей видимости, указывает на то, что для изучения верхней части полосы делокализованных состояний ПСС неприменимо. Так как, согласно [14, 15], именно в этой части находится порог подвижности, связанный с величинами L , β (и соответственно C), отсюда следует, что для определения этих величин необходимо выйти за рамки этого приближения.

2. Длина свободного пробега и условие делокализации

В ПСС отбрасывается член гамильтониана (4), имеющий вид

$$\sum_{m \neq n} \sum_{l \neq m, n} a_m^+ a_n \sum \langle \varphi_m | W(|r - R_l|) | \varphi_n \rangle. \quad (14)$$

Совершенно очевидно, что в пространстве существуют такие области, где центры располагаются особенно тесно и где туннельный перенос с n -центра на m -центр подвергается заметному рассеянию со стороны других ($l-x$)-центров. В термодинамическом пределе количество таких областей неограниченно возрастает,

и мы не можем априори утверждать, что они не вносят вклада в сопротивление. Для конкретности определим указанные «области рассеяния» (ОР) следующим образом. Разобьем мысленно весь объем на ячейки размером

$$v_0 = 2/N. \quad (15)$$

В каждой из ячеек v_0 должно в среднем находиться 2 центра. Из (14) видно, что основной вклад в этот член будут давать такие ячейки, где вместо двух будут находиться 3, 4 и более центров. Такие «перенаселенные» ячейки мы и примем за ОР. Согласно распределению Пуассона, вероятность того, что в объеме v_0 окажется Z центров, дается выражением

$$P(Z) = \frac{(v_0 N)^Z \exp(-v_0 N)}{Z!}. \quad (16)$$

Отсюда полное количество ОР можно оценить соотношением

$$M = \frac{\Omega}{v_0} \left(\sum_{Z=3}^{\infty} \frac{(v_0 N)^Z}{Z!} \right) \exp(-v_0 N) = \frac{\Omega}{v_0} \left[1 - \left(1 - v_0 N + \frac{(v_0 N)^2}{2} \right) e^{-v_0 N} \right], \quad (17)$$

где Ω — объем системы. Если длину свободного пробега L отождествить со средним (по Пуассоновскому распределению) расстоянием между центрами масс ОР, то, используя (17), (15), будем иметь

$$L = 0.554 \left(\frac{\Omega}{M} \right)^{1/3} = 0.554 \left(\frac{2}{1 - 5e^{-2}} \right)^{1/3}. \quad (18)$$

Из сравнения (18) и (8) видно, что рассматриваемый механизм рассеяния приводит к значению β , которое практически совпадает с (11). Отсюда, на наш взгляд, можно заключить, что полоса локализованных состояний, определяемая (10) и занимающая верхнюю часть спектра, на самом деле связана с вкладом оператора (14) и присутствует при любых N .

Возвращаясь к проблеме перехода Андерсона в системе $D^- (A^+)$ -центров, учтем, что для последних имеют место соотношения [17]

$$V_0 \approx W_0 \alpha^3 A, \quad W_0 = \frac{e_0^2}{2\chi a_0}, \quad a = a_0/\alpha, \quad \alpha = 0.235, \quad A = 3.08, \quad (19)$$

где a_0 — боровский радиус примеси. В условиях (18), (19) величина C , определяемая (7), трансформируется к виду

$$C = 0.525 \frac{\hbar^2 \chi}{e_0^2 m a_0}. \quad (20)$$

В таблице приведены результаты сравнения величины C , вычисленной по формуле (20), с экспериментом. Данные последнего взяты из опытов по фотопроводимости, обусловленной $D^- (A^+)$ -центрами [9, 10]. Можно отметить хорошее согласие результатов, с одной стороны, и их резкое отличие от предсказаний работ [1-6] — с другой. В связи с полученным результатом естественно снова обратиться к цифре $C = 0.26$, которая, как указывалось, нередко рассматривается как некий ориентир. Эта цифра также существенно меньше, чем экспериментальные и теоретические данные, приведенные в таблице. Но, на наш взгляд, в работе [8] (и многих других) достаточно убедительно показано, что обсуждаемая цифра на самом деле не относится к переходу Андерсона. Она выводится для систем,

Сравнение величины C , определяемой по формуле (20), с данными эксперимента

| Вещество | m/m_0 | $a_0, \text{ \AA}$ | C | C , эксперимент |
|---------------------|---------|--------------------|------|-------------------|
| Ge (Sb) | 0.22 | 42 | 0.47 | 0.40—0.53 [9] |
| Si (P) | 0.33 | 17 | 0.57 | 0.48—0.57 [10] |
| Si (B) _l | 0.16 | 23 | 0.87 | 0.62—0.70 [10] |
| Si (B) _h | 0.49 | 13 | 0.50 | 0.62—0.70 [10] |

Примечание. Используются значения χ (Ge) = 15.7, χ (Si) = 11.7. Символы l и h указывают на то, что теоретические значения C вычислены соответственно для легкой и тяжелой дырок.

у которых нарушения трансляционной симметрии могут отсутствовать и которые описываются гамильтонианом Хаббарда. Таким образом, цифра 0.25 связана с переходом типа Мотта. Поэтому экспериментальные данные, приведенные в [8], не могут говорить ни в пользу результатов [1-6], ни против данных, приведенных в таблице.

3. Влияние компенсации на D^- -зону (качественные соображения)

В рамках представлений, развитых в [14, 15], влияние компенсации может проявиться двояко. Во-первых, во всех формулах концентрация центров N должна быть заменена на величину $N_D(1 - K)$, где N_D — концентрация доноров. Согласно (1), (20), это означает, что основное условие существования проводящей D^- -зоны трансформируется к виду $N_D^{1/3} a (1 - K)^{1/3} \geq 0.525 \hbar^2 \chi / e_0^2 m a$. Если в написанное неравенство подставить данные для Ge(Sb): $\chi = 15.7$, $m = 0.22m_0$, $a_0 = 42\text{ \AA}$, а также учесть (19), то мы получим

$$(1 - K)^{1/3} \geq 0.11/X, \quad (21)$$

где $X = N_D^{1/3} a_0$. Из (21) следует, что при значениях K , превышающих некоторое критическое значение $K_0(X)$, D^- -зона сформироваться не сможет (все состояния окажутся локализованными). Среди образцов, изученных в [11], типичными представителями ϵ -проводимости являются образцы, у которых величина N_D заключена в интервале $(3.5 - 7.4) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Для таких образцов величина $K_0(X)$ попадает в интервал 0.48—0.76.

Во-вторых, можно указать еще один фактор влияния компенсации, который приводит к ограничению более жесткому. Дело в том, что компенсация сопровождается не только уменьшением количества нейтральных центров [что приводит к условию (21)], но и создает случайно меняющийся в пространстве потенциал заряженных доноров и акцепторов. Последний порождает диагональный беспорядок, который выводит D^- -центры из резонанса. Это обстоятельство должно сопровождаться появлением нового порога подвижности E_{c2} , который в отличие от порога E_{c1} , ограничивающего полосу (10) снизу, располагается в нижней части D^- -зоны и ограничивает локализованные состояния сверху (рис. 1). С повышением K порог E_{c2} движется вверх по энергетической шкале и при определенной величине компенсации может «настигнуть» E_{c1} . В этом случае произойдет «обратный» переход Андерсона, т. е. все состояния, которые при выполнении условия (21) делокализовались, вновь окажутся локализованными, причем, как мы увидим далее, при значениях K , меньших, чем те, при которых (21) нарушается.

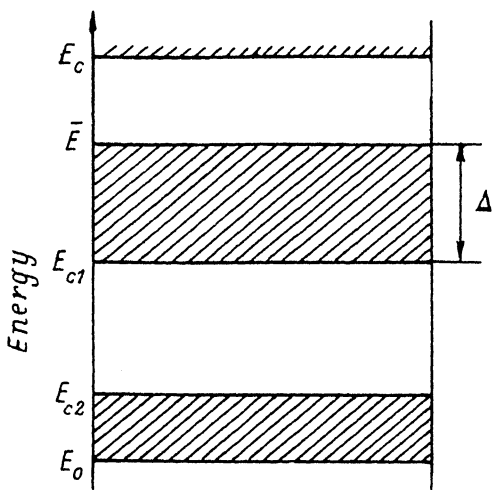


Рис. 1. Энергетическая схема D^- -зоны при наличии компенсации. E_c — дно зоны проводимости, \bar{E} — потолок спектра D^- -состояний, $\bar{E} - E_{c1} = \Delta$, E_0 — невозмущенное дно D^- -зоны. Заштрихованы области локализованных состояний.

4. Критерий обратного перехода Андерсона

В принципе для количественной оценки условия перехода можно было бы искать зависимость E_{c2} от K . Однако на таком пути возникают большие трудности. Во-первых, не известен характер расположения заряженных примесей, что для оценки весьма важно (см. далее), и, во-вторых, потребуются сведения о радиусе экранирования [15], что также представляет собой задачу непростую. Между тем в рассматриваемом случае имеется возможность обойтись без явного учета зависимости E_{c2} (K). Для этого воспользуемся непосредственно критерием Андерсона

$$\frac{\Delta W}{\Delta E} > C_1, \quad (22)$$

где ΔW — характерный размер флуктуаций потенциала, ΔE — ширина проводящей зоны и C_1 — константа. При этом, учитывая, что, согласно предыдущему, полоса (10) присутствует всегда, под ΔE следует понимать разность (рис. 1)

$$\Delta E = E_{c1} - E_0, \quad (23)$$

где E_0 соответствует невозмущенному дну D^- -зоны [т. е. величине (12) при $K=0$]. Если воспользоваться формулами (19), (10), а также соотношением $\hbar^2/2m = \nu W_0 a_0^2$, где в случае $\text{Ge}(\text{Sb}) \nu = 0.89$ [15], то будем иметь

$$\Delta E = W_0 \left[8\pi X^3 (1-K) A - \frac{\pi^2}{\beta} \nu X^2 (1-K)^{2/3} \right]. \quad (24)$$

При определении ΔW необходимо принять во внимание две возможности. Заряженные центры, появляющиеся в результате компенсации, могут быть коррелированы и располагаться в виде донорно-акцепторных пар (диполей). Или они могут быть расположены независимо и беспорядочно. В первом случае, приняв аппроксимацию точечного диполя, мы для соответствующего потенциала будем иметь

$$U_d \sim \frac{e_0^2}{\chi r^2} l \cos \gamma, \quad (25)$$

где l — плечо диполя и γ — угол его ориентации. Заменяя l и $\cos \gamma$ их средними значениями

$$l \sim 0.554 N_D^{-1/3}, \quad \cos \gamma \sim 0.5 \quad (26)$$

(в последнем случае на участке $0 \leq \gamma \leq \pi/2$) и оценивая размах флуктуаций как удвоенное среднее от (25) по распределению Пуассона, получим

$$\Delta W \rightarrow \Delta W_d = 7.73 K^{2/3} \chi W_0. \quad (27)$$

Заметим, что приближение точечного диполя можно считать справедливым, если $n^{1/3} \ll 1$, где n — концентрация электронов в D^- -зоне. С помощью (26) и оценки n , приведенной в [17], можно убедиться в том, что в условиях работы [11] написанное неравенство выполняется по крайней мере с точностью до порядка.

В случае некоррелированных зарядов

$$U_{nc} \sim \frac{e_0^2}{\chi r}. \quad (28)$$

И распределение Пуассона дает

$$\Delta W \rightarrow \Delta W_{nc} = 8.75 K^{1/3} \chi W_0, \quad (29)$$

где учтено, что концентрация заряженных центров равна $2N_D K$.

Для определения константы C_1 воспользуемся ее близостью к обратной величине порога протекания [18]. Для последнего известно соотношение $x_c = \theta_c / f$, где в трехмерном случае $\theta_c \approx 0.2$ [19] и f — плотность упаковки. В рассматриваемых условиях случайного расположения узлов $f = 0.65$ [18]. Таким образом,

$$C_1 = x_c^{-1} \approx 3.25. \quad (30)$$

После подстановки (24), (27), (30) в (22) условие существования проводящей D^- -зоны приобретает вид

$$K^{2/3} \leq 32.55 X^2 (1 - K) - 3.57 X (1 - K)^{2/3}. \quad (31)$$

С помощью (31) можно установить, что при концентрациях доноров

$$N_D = (5.4 - 7.0) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3} \quad (32)$$

D^- -зона может сохраняться при $K \leq 0.1$. Если же исходить из модели некоррелированных зарядов и вместо (27) использовать (29), то получим соотношение

$$K^{1/3} \leq 28.75 X^2 (1 - K) - 3.15 X (1 - K)^{2/3}. \quad (33)$$

Соотношение (33) приводит к еще более жесткому условию существования D^- -зоны: $K < 0.01$. Последний результат находится в противоречии с данными наблюдения, согласно которым у промежуточно легированных полупроводников D^- -зонная проводимость наблюдается при K порядка нескольких процентов [11, 17, 20].

Таким образом, если стоять на позициях [14], то необходимо принять, что по крайней мере при не слишком больших значениях K заряженные центры располагаются в основном в виде донорно-акцепторных диполей. Заметим, что такой же вывод получен и для области низких концентраций, где установлено, что коррелированное расположение заряженных примесей сохраняется вплоть до $K = 0.5$ [21, 22].

5. Сравнение с экспериментом

Переход Андерсона, предсказываемый условием (31), может быть подвергнут экспериментальной проверке. Действительно, если это условие нарушается и все состояния становятся локализованными, то перенос должен осуществляться посредством термически активированных перескоков между центрами донорной подрешетки. В этих условиях предэкспонента первого члена правой части (3) должна удовлетворять соотношению [18]

$$\rho_{02} \propto \exp\left(\frac{\alpha}{N_0^{1/3} a^*}\right), \quad (34)$$

где a^* — эффективный радиус локализованного состояния, N_0 — концентрация доступных центров подрешетки и α — постоянная, зависящая от вида волновых функций локализованных состояний. В нашем случае, учитывая спиновую корреляцию, естественно положить

$$N_0 = 0.5N_D(1 - K). \quad (35)$$

Кроме того, согласно [18, 23], приняв во внимание многодолинность зоны проводимости, можно принять, что в условиях Ge(Sb) $\alpha = 1.24$.

Если же перенос осуществляется делокализованными носителями, то зависимость ρ_{02} от N_D должна быть более слабой (степенной), что и наблюдается при $K \sim \%$ [11].

Как видно из рис. 2, у образцов с $N_D = (5.4 \div 7.0) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и $K \leq 0.5$ (для которых в [11] приведены подробные данные о зависимости ρ_{02} от K) линейная зависимость $\ln \rho_{02}$ от $N^{-1/3} = [N_D(1 - K)]^{-1/3}$ действительно наблюдается. При этом в соответствии с предсказанием теории эта зависимость формируется при $K > 0.1$. Точки, которые соответствуют $K < 0.1$, этой зависимости не подчиняются.

Подчеркнем, что, как видно из (23), полученный результат существенно связан с наличием у D^- -зоны постоянной энергетической «крыши» из локализованных состояний шириной (10). Той самой крыши, которая была предсказана в [14] и которая, как показано в настоящей статье, обязана своим существованием трехцентровым членам в гамильтониане (4). В отсутствие этой крыши вместо условия (31) мы бы имели $K^{2/3} \leq 32.55X^2(1 - K)$, и полоса делокализованных D^- -состояний сохранялась бы вплоть до $K \sim 0.37$. Даже если сделать ad hoc допущение, что расположение заряженных центров не коррелировано, и исходить из соответствующего условия $K^{1/3} \leq 28.75X^2(1 - K)$, то и тогда мы бы имели, что в отсутствие крыши D^- -зона должна существовать при $K \leq 0.19$.

В заключение попытаемся интерпретировать прямую линию на рис. 2. Это тем более важно, что она охватывает сравнительно небольшой интервал значений $N^{-1/3}$. Наклон прямой составляет $2.76 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$. Согласно (34), (35) этот наклон должен соответствовать величине

$$d \ln \rho_{02} / d(N^{-1/3}) = \frac{1.24}{0.5a^*}. \quad (36)$$

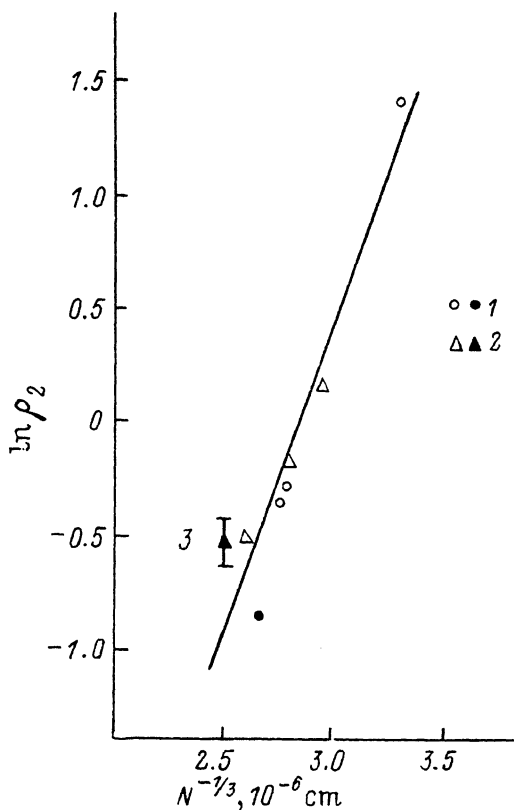


Рис. 2. Зависимость $\ln \rho_2$ от $N^{-1/3} = [N_D(1-K)]^{-1/3}$ по данным [11]. N_D , 10^{16} см^{-3} : 1 — 5.4, 2 — 7.0. Черные точки соответствуют $K \sim 0.03-0.05$. Остальные — охватывают интервал $0.11 < K < 0.50$. Точка 3 получена экстраполяцией кривой на рис. 11 из работы [11].

Отсюда получаем

$$a^* = 1.35a_0. \quad (37)$$

Полученное значение a^* очень близко к эффективному одноэлектронному радиусу изолированного D^- -центра, если последний оценивать по асимптотике волновой функции H^- -подобного иона. Действительно, в этом случае $a^* = \hbar/\sqrt{2mE}$, что после подстановки значений $m = 0.22m_0$, $E = 0.528W_0$ [24, 25], $W_0 = 9.8 \text{ мэВ}$ (энергия основного состояния примеси в Ge(Sb)) дает

$$a^* = 1.38a_0. \quad (38)$$

Таким образом, по всей видимости, прямая на рис. 2 соответствует перескокам электрона по нейтральным донорам с образованием связанных D^- -состояний.

Заметим, что, вообще говоря, такого результата можно было ожидать. Можно проверить, что в области рассмотренных концентраций энергия основного одноэлектронного состояния изолированного D^- -иона, равная $-0.528W_0$, оказывается более глубокой, нежели энергия, порождаемая флуктуациями случайного потенциала, или энергия локализованных состояний в упомянутой выше крыше. Последнее справедливо вплоть до $N_D \leq 1.5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. По этой причине образцы с $N_D = (1.1 \div 1.7) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, изученные в [11], требуют отдельного рассмотрения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] П. В. Елютин. ФТТ, 21, 2765 (1979).
- [2] A. C. Fertis, A. N. Andriotis, E. N. Economou. Phys. Rev. B, 24, 5806 (1981).
- [3] D. E. Logan, P. G. Wolynes. J. Chem. Phys., 85, 937 (1986).
- [4] P. V. Elyutin, B. Hickey, G. J. Morgan, G. F. Weir. Phys. St. Sol. B, 124, 279 (1984).
- [5] W. Y. Ching, D. L. Huber. Phys. Rev. B, 25, 1096 (1982).
- [6] J. D. Bauer, V. Logovinsky, J. L. Skinner. J. Phys. C, 21, L993 (1988).
- [7] Л. П. Гинзбург. ФТТ, 34, 164 (1992).
- [8] P. P. Edwards, M. Sienko. Phys. Rev. B, 17, 2575 (1976).
- [9] M. Taniguchi, S. Narita, N. Hasegawa, M. Kobayashi. J. Phys. Soc. Japan., 45, 545 (1978).
- [10] Е. М. Гершензон, А. П. Мельников, Р. И. Рабинович, Н. А. Серебрякова. УФН, 132, 353 (1980).
- [11] E. Davis, W. Compton. Phys. Rev., 140, 2183 (1965).
- [12] H. Fritzsche. Phil. Mag. B, 42, 835 (1980).
- [13] Е. М. Гершензон, Л. Б. Литвак-Горская, Г. Я. Луговая. ФТП, 15, 1284 (1981).
- [14] Л. П. Гинзбург. ФТП, 23, 813 (1989).
- [15] Л. П. Гинзбург. ФТП, 23, 1629 (1989).
- [16] Л. П. Гинзбург. ФТП, 25, 311 (1991).
- [17] H. Nishimura. Phys. Rev., 138, 815 (1965).
- [18] Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников, 416. М. (1979).
- [19] A. L. Efros, Van Lien Nguen, B. I. Shklovskii. J. Phys. C, 12, 1869 (1979).
- [20] H. Fritzsche // J. Phys. Chem. Sol., 6, 69 (1958).
- [21] Ш. М. Коган, Ван Лиен Нгуен, Б. И. Шкловский. ЖЭТФ, 78, 1933 (1980).
- [22] Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос. ФТП, 14, 825 (1980).
- [23] А. С. Скал, Б. И. Шкловский. ФТП, 7, 1589 (1973).
- [24] Г. Месси. Отрицательные ионы, 754. М. (1979).
- [25] C. Pakeris. Phys. Rev., 112, 1649 (1958).

Редактор В. В. Чалдышев
