

УДК 537.311.322

©1994

ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ ВБЛИЗИ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР В ЛЕГИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В.М.Муреев

В модели сильной связи показано, что при учете экранирования примесных потенциалов донорного типа электронами проводимости концентрация электронов проводимости как функция от концентрации доноров образует петлю гистерезиса в некотором интервале изменения концентрации доноров. Явление гистерезиса обусловлено экранированием примесных потенциалов и имеет место лишь в том случае, если концентрация электронов проводимости меняется скачком в точке перехода металл-изолятор. Наличие гистерезиса приводит к тому, что система электронов в некотором интервале изменения концентраций доноров вблизи точки перехода может находиться как в полупроводниковом, так и в металлическом состоянии в зависимости от предыстории этого состояния.

1. В предыдущей работе автора [1] было показано, что в легированных полупроводниках в модели сильной связи [2] экранирование примесных потенциалов электронами проводимости в окрестности перехода металл-изолятор приводит к скачкообразному изменению концентрации электронов проводимости в точке перехода. Теперь мы хотим показать в рамках тоже модели, что этот скачок концентрации электронов проводимости с необходимостью приводит к явлениям гистерезиса в окрестности перехода. В нашем случае гистерезис — проявление неоднозначности концентрации электронов проводимости как функции концентрации доноров N_d . При возрастании концентрации доноров скачок концентрации электронов проводимости происходит при одном значении $N_d = N_1$, а при убывании — при другом значении $N_d = N_1^*$. В интервале концентраций $N_1^* < N_d < N_1$ возможны переходы металл-изолятор (или обратные переходы изолятор-металл), а при внешних воздействиях, зависящих от времени, возможны неустойчивости, связанные с эффектом запаздывания.

Механизм возникновения гистерезиса поясняется на схеме, изображающей расположение примесной зоны и зоны проводимости в окрестности перехода металл-изолятор (рис. 1). Напомним, что в принятой нами модели основной вклад в экранирование примесных потенциалов вносят электроны с положительной энергией (отсчет энергии от дна в глубь зоны проводимости), концентрацию которых, отнесенную к концентрации доноров, обозначим через n^+ . Вклад в экранирование электронов примесной зоны с отрицательной энергией считается пренебрежимо малым. Критическая концентрация доноров N_1 , при которой происходит переход металл-изолятор, соответствует бесконечно малому перекрытию примесной зоны и зоны проводимости.

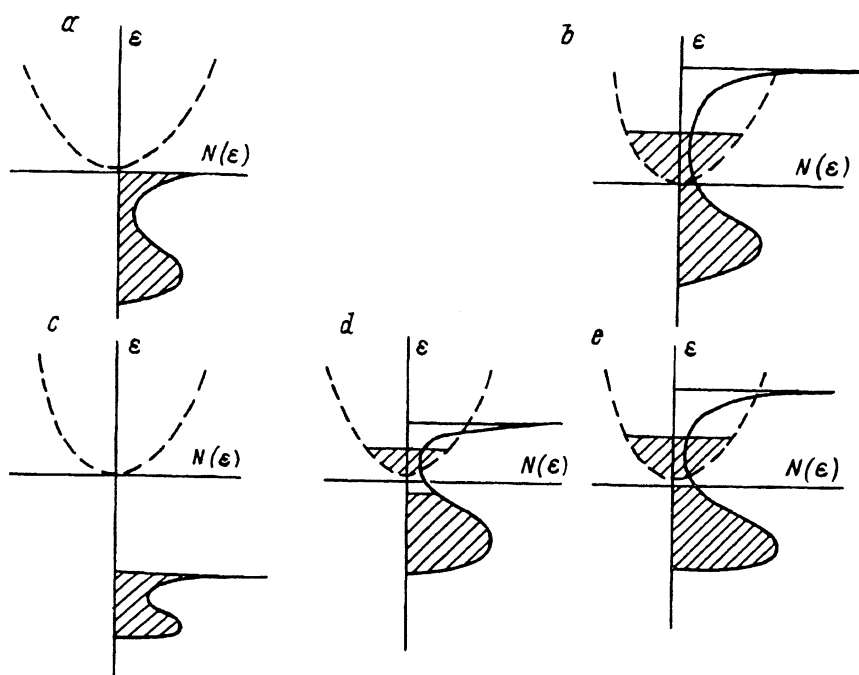


Рис. 1. Схема расположения примесной зоны и зоны проводимости.
 ϵ — энергия электрона, $N(\epsilon)$ — плотность состояний в зоне. $N_d \approx N_1$ (a,b), $N_d < N_1$ (c-e).

На рис. 1,а изображена ситуация, когда концентрация доноров N_d немного меньше критической концентрации N_1 . При этом энергетический зазор между примесной зоной и зоной проводимости очень мал. На рис. 1,б расположение энергетических зон соответствует концентрации доноров, чуть большей, чем критическое значение N_1 . Однако при этом, как следует из расчетов [1], величина перекрытия зон может быть весьма велика. Соответственно и концентрация свободных электронов n^+ может иметь большие значения. Дело в том, что при сколь угодно малом перекрытии примесной зоны и зоны проводимости в зоне проводимости появляются свободные электроны, экранирующие примесные потенциалы. Экранирование примесных потенциалов, увеличивающее радиусы волновых функций примесных электронов, приводит к увеличению перекрытия волновых функций и, следовательно, к уширению и сдвигу примесной зоны в область положительных энергий. Увеличение перекрытия зон и возрастание концентрации свободных электронов приводят к дальнейшему усилению экранирования. Возникающий таким образом механизм обратной связи приводит к «лавинообразному» процессу ионизации примесных центров в точке перехода металл-изолятор, а следовательно, и к скачкообразному изменению концентрации свободных электронов n^+ [1].

В данной работе изучается поведение электронов в области концентраций доноров ниже критической $N_d < N_1$ (рис. 1,с). Допустим, что в результате некоторого внешнего воздействия, к примеру термической ионизации или «подсветки», в зоне проводимости появились электроны. Экранирование примесных потенциалов этими электронами при-

ведет к уширению и сдвигу примесной зоны в область положительных энергий. Пусть при этом сохранится зазор между дном зоны проводимости и верхним заполненным уровнем в примесной зоне (рис. 1, *d*). Тогда если убрать внешнее воздействие, то примесная зона возвратится в исходное состояние (рис. 1, *c*).

Предположим теперь, что концентрация электронов, заброшенных в зону проводимости, достигла порогового значения n_c . Назовем пороговым такое значение концентрации электронов проводимости, при котором благодаря экранированию величина зазора становится равной нулю. Тогда, как и в ранее рассмотренном случае $N_d = N_1$, включится механизм обратной связи и лавинообразный процесс ионизации доноров приведет к скачкообразному изменению концентрации электронов проводимости. В результате этого скачка примесная зона перейдет в состояние, изображенное на рис. 1, *e*. Теперь если убрать внешнее воздействие, то примесная зона уже не сможет вернуться в прежнее состояние (рис. 1, *c*), так как для этого необходимо уменьшить концентрацию электронов в зоне проводимости на величину скачка.

Таким образом, в некотором интервале концентраций, меньших критической концентрации N_1 , электронная система может находиться в одном из двух состояний — либо металлическом, либо полупроводниковом. Это означает, что соответствующая система самосогласованных уравнений, имеющая своим решением функцию $n^+(N_d)$ [1], в области концентраций доноров, меньших критической, должна иметь второе решение, описывающее металлическое состояние. Цель нашей статьи заключается в нахождении и изучении этого второго решения наших уравнений.

2. Напомним, что в нашей модели донорные центры равномерно распределены по образцу. Вклад в экранировании примесных потенциалов вносят лишь свободные электроны. Тогда в модели сильной связи зависимость концентрации свободных электронов n^+ от концентрации доноров N_d описывается системой самосогласованных уравнений [1,3].

$$n^+ = 1 - (Y_0/Y_1)^3, \quad (1a)$$

$$\delta_0 = \sin Y_0/Y_0, \quad (1b)$$

$$\delta_0 = -(\varepsilon_i + BZ)/Z(A + S\varepsilon_i), \quad (1c)$$

$$r_e = C\sqrt{R}/n^{+1/6}. \quad (1d)$$

Здесь A — интервал переноса; B — интеграл, описывающий сдвиг примесной полосы; S — интеграл перекрытия,

$$S = e^{-bp}(1 + bp + (bp)^2/3),$$

$$A = -e^{-b(1+p)} \frac{p^3}{2R(p+1)^2} \{ e^b[2b(1+p) - p] + pe^{-b} \},$$

$$B = -e^{-b(1+p)} \frac{p^3}{R(p^2-1)^2} \{ pe^{b(p-1)} - e^{-b(p-1)}[b(p^2-1) + p] \} + \frac{1}{R},$$

$$b = R/2r_e. \quad (2)$$

Энергия связи ε_i определяется выражением

$$\varepsilon_i = -\frac{p^3(p-1)}{4r_e(p+1)^3}. \quad (3)$$

Здесь p — вариационный параметр, значения которого находятся из уравнения [1]

$$r_e = (1+p)^3/2p(p+3), \quad (4)$$

r_e — радиус экранирования, который вычисляется в модели Пайнса [4] по формуле (1d); межпримесное состояние R определяется выражением $R = (3/4\pi N_d)^{1/3}$; значение координационного числа Z при расчетах принято равным 6; Y_1 — параметр теории, который определяется из уравнения $\text{tg } Y_1 = Y_1$ [3]. Обобщение наших уравнений на случай примесных центров акцепторного типа проделано в работе автора [5]. Все расчеты проводятся в атомной системе единиц (длины измеряются в боровских радиусах — a_b , а энергия измеряется в удвоенных ридбергах).

Система самосогласованных уравнений (1) в области концентраций $N_d < N_1$ имеет очевидное решение $n^+ = 0$, которое соответствует полупроводниковому состоянию (рис. 1,с). Покажем, что система уравнений (1) в некотором интервале концентраций, меньших критической концентрации N_1 , имеет второе решение, которое соответствует металлическому состоянию (рис. 1,е). Для этого построим графические решения нашей системы уравнений (рис. 2). Уравнения (1а) и (1б) определяют значение параметра теории δ_0 как функции от n^+ . Эта зависимость изображена на рис. 2 штриховой линией и представляет собой универсальную кривую, вид которой не зависит от значения параметров образца. Оставшиеся уравнения (1с) и (1д) описывают кривую $\delta_0(n^+)$ (рис. 2, сплошная линия), вид которой зависит от значения параметров Z , C и R .

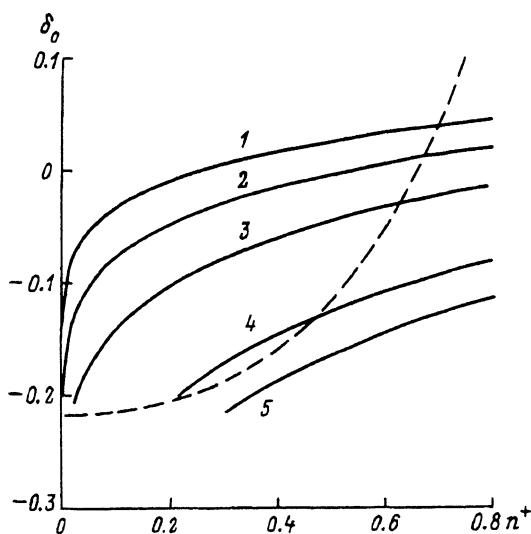


Рис. 2. Графическое решение системы уравнений (1) для значения параметра экранирования $C = 5.97$.

δ_0 — параметр теории; n^+ — концентрация свободных электронов, отнесенная к концентрации доноров. Кривые 1, 2, 3, 4, 5 соответствуют значениям межпримесного расстояния $R = 3, 3.5, 4, 4.6, 4.8$.

Напомним, что параметр экранирования C в теории Томаса-Ферми имеет значение $C = (\pi/12)^{1/3}$, а в модели Пайнса $C = 1.47$. Поскольку при низких концентрациях носителей используемая нами теория экранирования представляет достаточно грубое приближение, будем в дальнейших расчетах считать параметр C параметром теории. При вычислениях мы варьировали величину этого параметра от значения $C = 1.47$ до значения $C = 5.97$. На рис. 2 представлены результаты расчетов для $C = 5.97$. Сплошные кривые идут сверху вниз в порядке возрастания межпримесного расстояния R от 3 до 4.8. Таким образом, из наших расчетов следует, что второе решение, соответствующее металлическому состоянию, существует в достаточно широком интервале примесных концентраций, соответствующих межпримесным расстояниям R , лежащим в интервале от 3 до 4.8. Напомним, что критическая концентрация N_1 соответствует значению $R_1 = 3$ [1].

Численно систему самосогласованных уравнений (1) решали методом итераций. На рис. 3 представлены результаты расчетов концентрации свободных электронов n^+ как функции межпримесного расстояния R для различных значений параметра экранирования C . Рассмотрим более подробно поведение кривой 2, соответствующей значению параметра $C = 4.47$. При уменьшении межпримесного расстояния R электронная система находится в полупроводниковом состоянии до тех пор, пока R не достигнет критического значения R_1 , при котором начинается перекрытие зоны проводимости и примесной зоны (точка А на рис. 3). В этой точке система скачком переходит из полупровод-

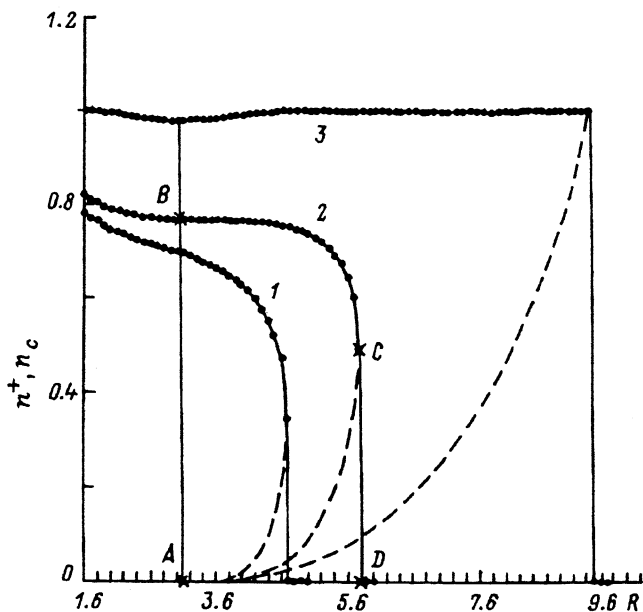


Рис. 3. Результаты решения системы самосогласованных уравнений (1) методом итераций.

Зависимость концентрации свободных электронов n^+ от межпримесного расстояния R — сплошные кривые, соединяющие расчетные точки. Зависимость порогового значения концентрации электронов n_c от R — штриховые линии. Кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям параметра экранирования $C = 5.97, 4.47, 1.47$.

никового в металлическое состояние (точка B). Если теперь увеличивать межпримесное расстояние R , то система электронов, оставаясь в металлическом состоянии, перейдет в точку C , соответствующую критическому значению R_1^* . Из этого состояния система электронов скачком переходит обратно в полупроводниковое состояние (точка D на рис. 3). Таким образом, зависимость n^+ от R обладает гистерезисом в области изменения R , где система уравнений (1) имеет второе решение.

Этот результат расчетов легко понять из простых качественных соображений. Действительно, если мы подходим к критической точке перехода $R_1 = 3$ из области больших значений R , то при этом мы всегда находимся в области примесных концентраций, где нет экранирования примесных потенциалов и концентрация свободных электронов n^+ меняется скачком от нуля до конечного значения в точке $R_1 = 3$. Если же мы подходим к точке перехода металл-изолятор из области меньших значений R , то при прохождении через критическую точку $R_1 = 3$ концентрация электронов n^+ имеет значение, большее, чем пороговое значение n_c , и остается конечной во всей области изменения R , где выполняется соотношение $n^+ > n_c$. Условие $n^+ = n_c$ определяет критическое значение параметра R_1^* , соответствующее критической концентрации примесных центров N_1^* , при которой исчезает второе решение и концентрация свободных электронов n^+ обращается в нуль.

Величина пороговой концентрации свободных электронов n_c как функция от межпримесного расстояния R изображена на рис. 3 штриховыми линиями. Эта величина найдена из системы уравнений (1) методом итераций. Так, если при решении системы уравнений (1) взять в качестве «затравочного» значение $n^+ < n_c$, то итерационная процедура сходится к значению $n^+ = 0$. Если же выбрано затравочное значение $n^+ > n_c$, то итерационная процедура сходится к конечному значению n^+ , отличному от нуля. Таким образом, итерационная процедура позволяет отыскать пороговое значение концентрации свободных электронов n_c для любого наперед заданного значения R .

3. Остановимся теперь на возможности экспериментального обнаружения подобных гистерезисных эффектов. Очевидно, что при комнатных температурах мелкие примесные центры истощены и практически все примесные электроны принимают участие в экранировании примесных потенциалов. Поэтому в интервале концентраций $N_1^* < N_d < N_1$ при комнатных температурах должно быть выполнено условие $n^+ > n_c$, уровень Ферми лежит в зоне проводимости. При понижении температуры электроны будут вымораживаться на уровень Ферми, что обеспечивает сохранение условия $n^+ > n_c$. Следовательно, при понижении температуры электронная система останется в металлическом состоянии. Таким образом, экспериментальное значение критической концентрации N^{exp} , при которой происходит переход металл-изолятор, необходимо отождествить с расчетным значением N_1^* . Если теперь, зафиксировав температуру, мы приложим к системе магнитное поле, то с ростом магнитного поля волновые функции электронов начнут сжиматься в направлении, перпендикулярном полю, что приведет к уменьшению перекрытия волновых функций, а следовательно, и к уменьшению перекрытия между примесной зоной и зоной проводимости.

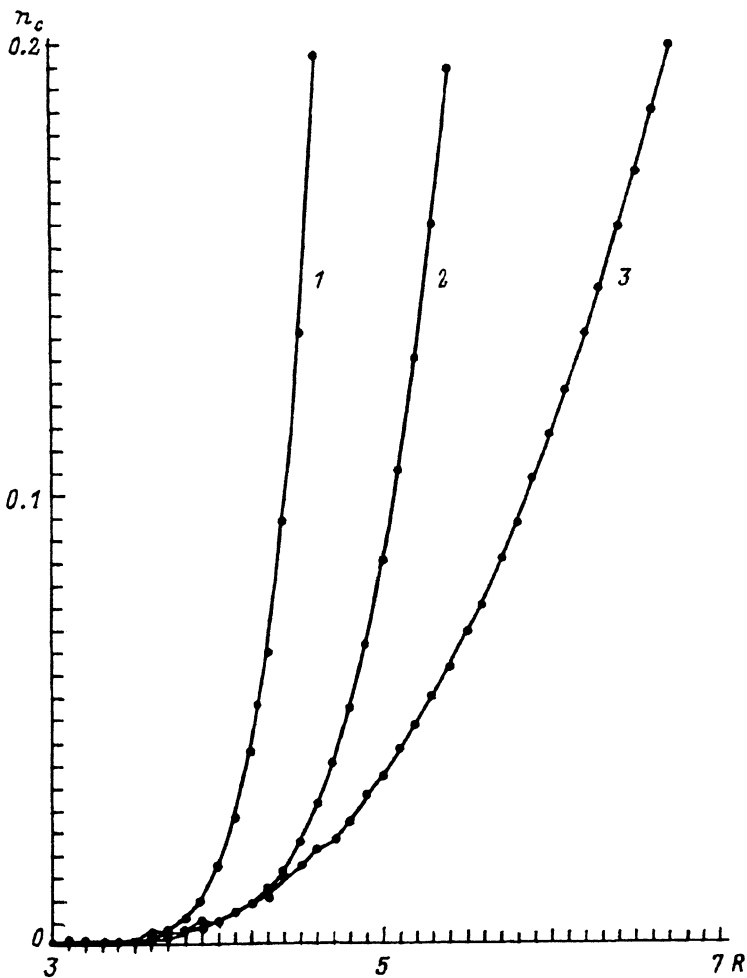


Рис. 4. Зависимость порогового значения концентрации свободных электронов n_c от межпримесного расстояния R .

Кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям параметра экранирования $C = 5.97, 4.47, 1.47$.

Когда концентрация свободных электронов n^+ с ростом магнитного поля уменьшит свое значение до величины n_c , электронная система скачком перейдет в полупроводниковое состояние. Если теперь уменьшить магнитное поле до нуля, то система электронов останется в новом полупроводниковом состоянии и будет находиться в нем до тех пор, пока с помощью внешнего воздействия не удастся увеличить концентрацию электронов в зоне проводимости до порогового значения n_c . Для того чтобы перевести электроны обратно в металлическое состояние, необходимо снова нагреть образец или подсветить его настолько, чтобы концентрация свободных электронов превысила пороговое значение. Возможность таких переключений системы из полупроводникового в металлическое состояние и обратно из металлического в полупроводниковое состояние связана с гистерезисным характером кривых $n^+(R)$ (рис. 2).

На рис. 3 приведены рассчитанные нами зависимости пороговой концентрации электронов n_c от межпримесного расстояния. Из расчетов следует, что область примесных концентраций, в которой имеется второе решение, существенно зависит от выбора постоянной экранирования C . Напомним, что величина скачка концентрации свободных электронов при переходе металл-изолятор также зависит от выбора постоянной экранирования. При значении постоянной экранирования $C = 4.47$ концентрация электронов вблизи перехода металл-изолятор, согласно расчетам (кривая 2 на рис. 3), составляет 0.6–0.8 от концентрации доноров. Проведем дальнейшие оценки для этого значения постоянной C . Согласно расчетным данным (см. кривую 2) переключение может иметь место в узком интервале концентраций доноров от N_1^* до $1.6N_1^*$, если, вымораживая электроны магнитным полем, уменьшить их концентрацию на порядок. В случае же, если уменьшить концентрацию носителей на два порядка, допустимый интервал концентраций доноров возрастет и составит величину от N_1^* до $2.8N_1^*$. Проведенная нами оценка указывает, что гистерезисные явления могут наблюдаться лишь при концентрациях доноров в достаточно узком интервале значений вблизи перехода металл-изолятор.

В заключение еще раз отметим, что изученное нами явление гистерезиса в окрестности перехода металл-изолятор может иметь место лишь в том случае, когда экранирование примесных потенциалов свободными электронами приводит к обратной связи между значениями концентрации свободных электронов и плотностью состояний в примесной зоне. Именно в этом случае процесс ионизации доноров в окрестности перехода металл-изолятор носит лавинообразный характер, приводящий к скачку концентрации электронов проводимости в точке перехода. Скачок концентрации в свою очередь обуславливает существование петли гистерезиса концентрации свободных электронов как функции концентрации доноров. Наличие гистерезиса приводит к тому, что система электронов в некотором интервале изменения концентраций доноров вблизи точки перехода может находиться либо в металлическом, либо в полупроводниковом состоянии в зависимости от предистории этого состояния.

Автор выражает благодарность Г.А.Матвееву и Г.И.Харусу за обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Михеев В.М. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 9. С. 2410–2417.
- [2] Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры. М.: Мир, 1969. 358 с.
- [3] Михеев В.М. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 4. С. 1040–1045.
- [4] Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. М.: Мир, 1965. 382 с.
- [5] Михеев В.М. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 7. С. 2075–2086.

Институт физики металлов УрО РАН
Екатеринбург

Поступило в Редакцию
29 июля 1993 г.