

ВЕРХНЯЯ ЗОНА ХАББАРДА И ПРОВОДИМОСТЬ ПО ПРИМЕСЯМ НЕКОМПЕНСИРОВАННОГО КРЕМНИЯ

Гершензон Е. М., Гурвич Ю. А., Мельников А. П., Шестаков Л. Н.

Обнаружена проводимость с энергией активации ϵ' , промежуточной по отношению к ϵ_3 и ϵ_2 — энергиям активации проводимости по нижней (НЗХ) и верхней (ВЗХ) зонам Хаббарда. Результаты объясняются возбуждением электронов НЗХ в «хвост» ВЗХ. Сделан ряд заключений о структуре ВЗХ. Предложено объяснение уменьшения ϵ_3 с концентрацией примеси N .

1. В кристаллических полупроводниках проводимость $\sigma(T)$ можно представить в виде $\sigma(T) = \sigma_1(T) + \sigma_n(T)$, где $\sigma_1(T) = \sigma_{01} \exp(-\epsilon_1/T)$ — проводимость по свободной зоне, $\sigma_n(T)$ — проводимость по примесям. Наше сообщение посвящено области перехода от σ_n (низкие T) к σ_1 (высокие T) в Si с компенсацией $K \leq 10^{-4}$.

Обычно $\sigma_n(T)$ представляет собой прыжковую проводимость по НЗХ — основным состояниям примеси: $\sigma_n = \sigma_3$. При $T < T_s \approx \epsilon_3 \ln(K^{-1})^{-1}$ $\sigma_3 = \sigma_{03} \exp(-\epsilon_3/T)$. Энергия ϵ_3 определяется положением уровня Ферми $\epsilon_3 = \epsilon_F = 0.61e^2/\kappa R_c$; $R_c = (4\pi N/3)^{-1/3}$. При $T \geq T_s$ наступает насыщение: $\sigma_3 = \sigma_{\text{нас}} = \text{const}$ [1].

Наши измерения показали, однако, что при $K \approx 10^{-4} - 10^{-5}$ насыщение $\sigma_3(T)$ выражено очень слабо или отсутствует. Для выяснения причины этого факта мы провели измерения $\sigma(T)$ и холловского напряжения и обработали результаты по двузонной модели [2]. Это позволило отделить σ_n от σ_1 и изучить зависимость $\sigma_n(T)$ в области, где $\sigma_n \leq \sigma_1$.

Оказалось, что в области перехода от σ_n к σ_1 существует проводимость с энергией активации ϵ такой, что $\epsilon_3 < \epsilon' < \epsilon_2$ (об энергии ϵ_2 см. далее): $\sigma'(T) = \sigma'_0 \exp(-\epsilon'/T)$ (рис. 1, кривая 1). Она наблюдается как в p -Si, так и в n -Si (далее приводятся результаты для p -типа).

Недавно было обнаружено, что в определенном диапазоне N и K вместо ϵ_3 -проводимости наблюдается моттовская проводимость с переменной длиной прыжка: $\sigma_n(T) = \sigma_n(T) \sim \exp[-(T_0/T)^{1/4}]$ [3]. В переходной области проводимость $\sigma'(T)$ существует и в этих образцах (рис. 1, кривая 2).

Максимальные значения K , при которых наблюдается эта проводимость для образцов с ϵ_3 -проводимостью, увеличиваются от $K \approx 10^{-5}$ при $N^{-1/3} \approx 210 \text{ \AA}$ до $K \approx 10^{-4}$ при $N^{-1/3} \approx 160 \text{ \AA}$. При $K \approx 10^{-5}$ она проявляется в достаточно большом диапазоне T и без вычитания σ_1 из полной проводимости. С ростом N ϵ' монотонно уменьшается (в отличие от ϵ_3). В образцах, где $\sigma_n = \sigma_n(N^{-1/3} \approx 280 - 360 \text{ \AA})$ [3], $\sigma'(T)$ имеет место при $K \approx 10^{-5}$.

Существование ϵ' -проводимости объясняет отсутствие насыщения в образцах с ϵ_3 -проводимостью. В самом деле, если экстраполировать зависимость $\sigma'(T)$ в меньшие T и вычесть σ' из σ_n , то получим насыщение $\sigma_3(T)$ (рис. 1).

2. Измерения показали, что зависимости σ' и σ_3 от E ($E < 100 \text{ В/см}$) и H ($H < 10 \text{ кЭ}$) совпадают. Поэтому мы считаем, что $\sigma'(T)$, как и $\sigma_3(T)$, обусловлена движением вакансий по НЗХ (для n -типа). Тогда экспоненциальный рост $\sigma'(T)$ должен быть связан с увеличением числа вакансий. Последнее при $T \geq T_s$ может происходить за счет активации электронов из НЗХ в какие-то

вышележащие состояния. Это могут быть только состояния, лежащие вблизи дна D^- -зоны (ВЗХ). Они возникают в случайных скоплениях (кластерах) центров, сближенных на расстояния, меньшие R_c . Такие кластеры встречаются относительно редко, расстояния между ними велики и эти состояния являются непроводящими.

Энергия ϵ' должна быть связана с расстоянием $\Delta\epsilon$ между НЗХ и дном ВЗХ. Для образцов с ϵ_2 -проводимостью эта связь довольно очевидна. Концентрация вакансий в истощении равна KN . В области, где $\sigma'(T) > \sigma_{нас}$, концентрация вакансий должна быть больше KN . Это означает, что при ϵ' -проводимости ϵ_F лежит посередине между НЗХ и дном ВЗХ и $\Delta\epsilon = 2\epsilon'$. Для образцов, у которых $\sigma_n = \sigma_x$, эта связь менее очевидна. Мы предположили, что в этом случае $\Delta\epsilon = \epsilon'$.

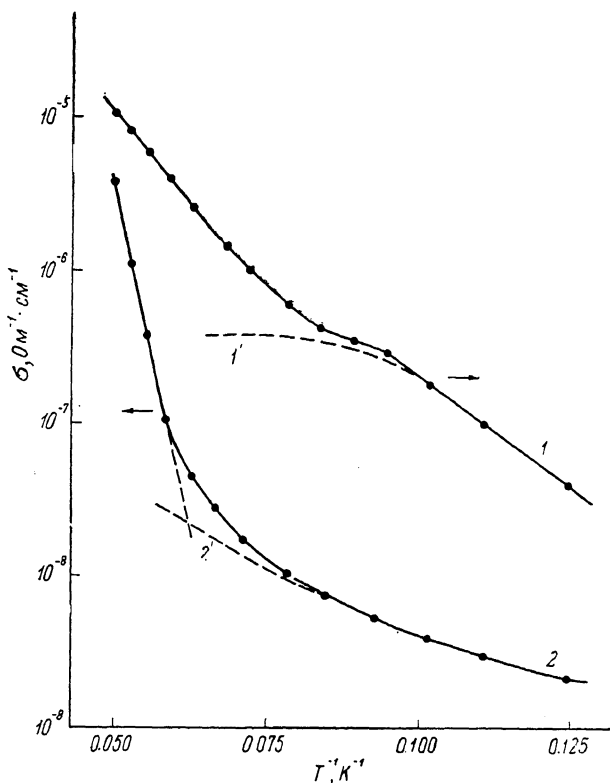


Рис. 1. Зависимости $\sigma_n(T)$ в образцах Si : В с $K \approx 10^{-5}$.

$N, \text{см}^{-3}$: 1 — $1.2 \cdot 10^{17}$, 2 — $3.5 \cdot 10^{16}$; 1' — насыщение $\sigma_2(T)$, 2' — экстраполяция $\sigma_n(T)$ в область высоких T .

При этом мы исходили из того, что наличие проводимости σ_x свидетельствует о достаточно высокой плотности состояний вблизи $\epsilon = \epsilon_F$. В таком случае эта область должна фиксировать энергию Ферми.

Зависимость $\Delta\epsilon(N)$, полученная по описанному выше рецепту из измеренных значений $\epsilon'(N)$, показана на рис. 2 (кривая 1). Там же (кривая 1') показана зависимость $I_1(N) = \epsilon_i - \Delta\epsilon(N)$ — расстояния между дном ВЗХ и уровнем изолированного D^- -центра ϵ_i (≈ 43 мэВ). Примечательно, что значения I_1 для образцов, существенно различающихся по N и K и имеющих различный характер проводимости по примесям в области низких T , на плоскости $\ln I_1$ — $\ln N^{-1/2}$ ложатся на одну прямую. Прямая хорошо аппроксимируется выражением $I_1 = A_1 \exp(-N^{-1/2}/a_i)$, где a_i — радиус D^- -состояния (≈ 95 Å для Si : В), $A_1 \approx 150$ мэВ.

3. Известно, что при достаточно больших N и малых K наблюдается ϵ_2 -проводимость, обусловленная движением электронов вблизи порога подвижности ВЗХ. Сопоставим зависимости $\epsilon_2(N)$ и $\Delta\epsilon(N)$. На рис. 2 приведены значения ϵ_2 , полученные нами в равновесных и неравновесных [2] условиях, а также данные [4]. Видно, что $\epsilon_3 < \epsilon' < \epsilon_2$. Здесь же (кривая 2') показана зависимость

от N расстояния между уровнями ϵ_i и порогом подвижности: $I_2(N) = \epsilon_i - \epsilon_2(N)$. Оказывается, что зависимость $\ln I_2(N)$ от $N^{-1/3}$ также линейна и описывается выражением: $I_2(N) = A_2 \exp(-2N^{-1/3}/a_i)$, причем $A_2 \simeq A_1$.

Зависимости $I_1(N)$ и $I_2(N)$ можно интерпретировать, если формально воспользоваться представлениями Лифшица [5] о резонансных и нерезонансных центрах. «Хвост» ВЗХ обусловлен образованием кластеров из сравнительно небольшого числа центров, причем разброс межцентровых расстояний в кластере $\Delta R < a_i$. Это резонансные центры, энергия расщепления уровней в системе таких центров $I \sim \exp(-R_c/a_i)$. В формировании же проводимости от

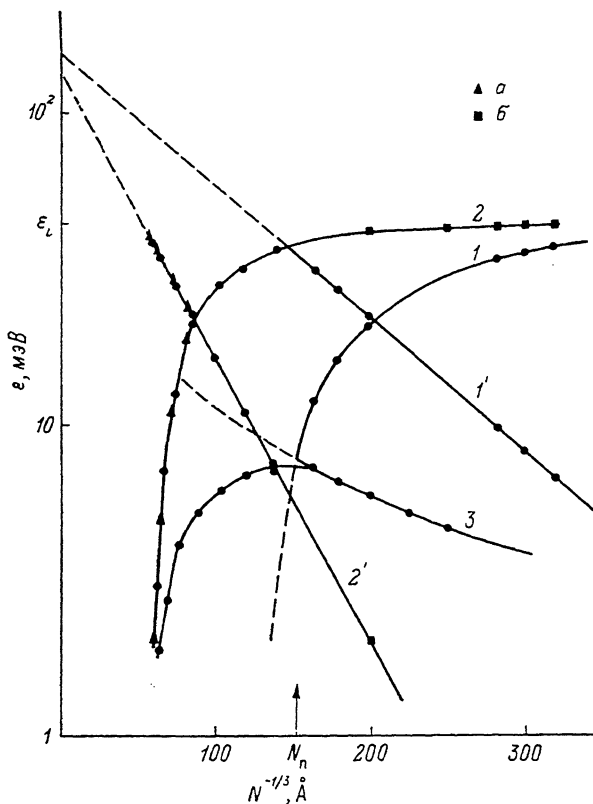


Рис. 2. Зависимости от N .

1 — $\Delta\epsilon$, 2 — ϵ_2 , 3 — ϵ_3 , 1' — I_1 , 2' — I_2 . Значения ϵ_2 по данным [4] (а) и [2] (б).

контакта до контакта по ВЗХ участвует большинство центров, так что $\Delta R \simeq R_c > a_i$. Для таких нерезонансных центров $I \sim \exp(-2R_c/a_i)$.

Однако модель Лифшица применима для короткодействующих центров при $R_c \gg a_i$. Эти условия у нас не выполняются. Тем не менее соответствующие зависимости имеют место. Этот факт представляется нам весьма нетривиальным.

Сопоставляя зависимости $I_1(N)$ и $I_2(N)$, можно сделать вывод, что ВЗХ состоит из относительно слабо размытого пика, где находится край подвижности и длинного хвоста, обязанного своим происхождением глубоким потенциальным ямам, возникающим в местах скопления примесных центров (рис. 3).

4. Известно, что при увеличении N ϵ_3 растет, как $N^{1/3}$, до некоторого предельного значения $N \simeq N_n$, потом начинает уменьшаться (рис. 2, кривая 3). Общепринятого истолкования этого уменьшения нет [1, 6]. Развита выше модель ϵ' -проводимости позволяет дать простое объяснение. Продлив зависимость $\Delta\epsilon(N)$ (рис. 2, кривая 1) в область малых R_c , находим, что кривая $\Delta\epsilon(N)$ пересекается с зависимостью $\epsilon_3 \sim N^{-1/3}$ как раз при $N \simeq N_n$. При $N > N_n$ дно ВЗХ опустится ниже уровня Ферми $\epsilon_F (\simeq \epsilon_3)$. Это приведет к увеличению плотности состояний вблизи ϵ_F , переходу электронов из верхнего

хвоста НЗХ в состоянии нижнего хвоста ВЗХ, росту числа вакансий и понижению уровня $\epsilon_F \approx \epsilon_3$. С этой точки зрения, не является неожиданным изменение зависимостей σ_{II} от T и H , наблюдающееся при $N > N_n$ [1].

Таким образом, исходя из интерпретации, предлагаемой для объяснения полученных результатов, можно заключить, что в некомпенсированных кри-

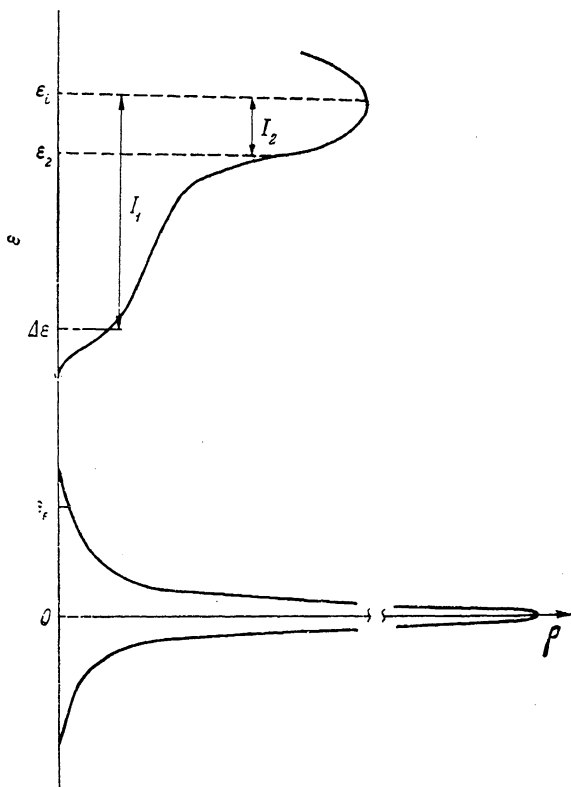


Рис. 3. Схематическое изображение зависимости плотности состояний от энергии $\rho(\epsilon)$ в ВЗХ и НЗХ.

сталлических полупроводниках при малых N структура ВЗХ соответствует представлениям Мотта—Лифшица. С ростом N перекрытие зон приводит к перезарядке состояний и увеличению кулоновского разброса. В этом случае более адекватным описанием системы будет модель Андерсона.

Список литературы

- [1] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М., 1979. 416 с.
- [2] Ворожцова Л. А., Гершензон Е. М. и др. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. В. 4. С. 1419—1423.
- [3] Гершензон Е. М., Гурвич Ю. А. и др. // Письма ЖЭТФ. 1990. Т. 51. В. 1. С. 204—208.
- [4] Staunton H. F. Thesis Brown Univ. 1970. 400 с.
- [5] Лифшиц И. М. // УФН. 1964. Т. 63. В. 2. С. 618—621.
- [6] Pollak M., Knotek M. L. // Sol. St. Commun. 1977. V. 21. P. 183—186.

Московский
государственный педагогический институт
им. В. И. Ленина

Получена 10.09.1990
Принята к печати 18.09.1990