

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ФОТОПРОВОДИМОСТЬ, ОБУСЛОВЛЕННУЮ D^- -ЦЕНТРАМИ

Гинзбург Л. П.

На основе предыдущих работ автора (ФТП. 1989. Т. 23. В. 5. С. 813—819; В. 9. С. 1629—1634) дается интерпретация эффекта делокализации D^- -состояний с ростом температуры.

Введение. С момента обнаружения фотопроводимости, обусловленной D^- -центрами в полупроводниках [1, 2], этому явлению посвящено много работ. В частности, появилась уникальная возможность проследить за возникновением проводящей зоны в условиях структурного беспорядка [2—6]. Именно по мере роста концентрации примеси N при определенном ее значении N_c наблюдалось качественное изменение вида кривой фотоотклика: от типа «примесь—зона» она переходила к типу «зона—зона». Это свидетельствовало о том, что происходит коллективизация D^- -состояний и образуется D^- -зона. Однако в связи с этим эффектом вскоре обнаружилась и определенная странность. Выяснилось (по-видимому, впервые в [4]), что подобное же изменение кривой фотоотклика (правда, более постепенное) происходит с ростом температуры (T). Так, можно привести такое критическое значение T_k , при котором вид указанной кривой начинает заметно изменяться в том же направлении, что и с ростом N [4—6]. Но если появление проводящей зоны с ростом N — результат, качественно вполне ожидаемый, то эффект делокализации за счет роста T кажется трудно объяснимым.

В работах [7, 8] была изложена определенная концепция механизма делокализации (локализации) в условиях структурного беспорядка. Было показано, что эта концепция приводит к результатам, которые согласуются с данными ряда наблюдений. В частности, это относится к зависимости порога D^- -фотопроводимости от N [8].

В данной работе показано, что отмеченное выше влияние T на характер фотоотклика также может быть объяснено в рамках модели, предложенной в [7, 8].

1. Взаимодействие с фононами

Один из основных выводов работы [7] определяет условие появления проводящей зоны

$$\Delta T_k > \pi^2 \frac{\hbar^2}{2mL^2}. \quad (1)$$

В формуле (1) ΔT_k — отклонение средней кинетической энергии электрона, находящегося в K -состоянии [7], от одноцентровой, а L — длина его свободного пробега. В [7, 8] показано, что правая часть (1) определяет ширину полосы локализованных состояний, поэтому смысл (1) состоит в том, что величина ΔT_k должна превышать эту ширину. Однако в [7, 8] не принималось во внимание влияние фононов. Такое приближение, будучи справедливым при достаточно низких T , не дает возможности проследить за эффектами, которые возникают с повышением T . Для этого учет фононного поля необходим. Ввиду малости

электрон-фононного взаимодействия можно ожидать, что не будет большой ошибки, если влияние последнего свести к действию термостата. Здесь, правда, есть две трудности. Во-первых, мы имеем дело не с одним термостатом, а с двумя: один связан с основной решеткой, а другой — с примесной. Во-вторых, рассматриваемая нами система неравновесна и вид функции распределения неизвестен.

Тем не менее представляется возможным обойти указанные трудности следующим образом. Вполне вероятно, что электрон, который фоновым подсветом возбуждается в зону проводимости и не рекомбинирует, еще до того, как он «почувствует» присутствие примесей, термализуется. Так как концентрация атомов примеси мала по сравнению с концентрацией атомов основной решетки влияние примесного термостата может сказаться только в одном случае — если масса атомов примеси мала по сравнению с массой атомов основной решетки (например, в случае $\text{Si}\langle\text{B}\rangle$). Во всех остальных случаях примесный термостат можно не учитывать. Поэтому весь эффект термостата может заключаться в том, что за время пребывания в зоне проводимости электрон получает порцию кинетической энергии, среднее значение которой определяется стандартной формулой

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{n\Omega} \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} \left[\exp\left(\frac{p^2/2m - \mu}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (2)$$

В выражении (2) \mathbf{p} — квазиимпульс, μ — квазиуровень Ферми, n — концентрация электронов в зоне проводимости, Ω — объем системы.

Описанный эффект термостата может быть учтен в схеме работ [7, 8], если гамильтониан электрона, движущегося в примесной подрешетке, представить в виде

$$H_{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \sum_{\mathbf{n}} W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}|) + \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle, \quad (3)$$

где $W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}|)$ — потенциал примеси, находящейся в точке $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$. Одноцентровое уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}|) \right) \varphi_{\mathbf{n}} = \left(E - \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \right) \varphi_{\mathbf{n}}, \quad (4)$$

очевидно, приведет к тем же волновым функциям $\varphi_{\mathbf{n}} \equiv \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}|)$, которые рассматривались в [7]. Поэтому, введя полевые операторы

$$\Psi^{\dagger} = \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}}^{\dagger} \varphi_{\mathbf{n}}, \quad \Psi = \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}} \varphi_{\mathbf{n}}, \quad (5)$$

где $a_{\mathbf{n}}^{\dagger}$, $a_{\mathbf{n}}$ — операторы рождения и уничтожения электрона на центре в точке $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$, будем иметь

$$H_{\tau} = H + \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{m}}^{\dagger} a_{\mathbf{n}} \langle \varphi_{\mathbf{m}} | \varphi_{\mathbf{n}} \rangle, \quad (6)$$

где H — оператор энергии, определяемый (2) [7]. В Приложении показано, что в рассматриваемых условиях можно положить¹

$$\sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{m}}^{\dagger} a_{\mathbf{n}} \langle \varphi_{\mathbf{m}} | \varphi_{\mathbf{n}} \rangle \simeq \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}}^{\dagger} a_{\mathbf{n}}. \quad (7)$$

С помощью (6), (7) нетрудно проверить следующее. Если оператор кинетической энергии электрона, взаимодействующего с примесной подрешеткой, определить соотношением

$$T = H_{\tau} - \sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{m}}^{\dagger} a_{\mathbf{n}} \langle \varphi_{\mathbf{m}} | \sum_{\mathbf{l}} W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{l}}|) | \varphi_{\mathbf{n}} \rangle, \quad (8)$$

то, повторив выкладки [7], получим

¹ Заметим, что если бы (7) не соблюдалось, то теряли бы смысл определения (5).

$$T = -U_0 - N \int dR e^{-i\mathbf{KR}} V(R) + \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle. \quad (9)$$

В выражении (9) $-U_0$ — средняя кинетическая энергия одноцентрового связанного состояния, $V(R)$ — интеграл переноса. При этом

$$-N \int dR e^{-i\mathbf{KR}} V(R) = \Delta T_{\mathbf{K}}. \quad (10)$$

Согласно (9), (10), условие появления делокализованных электронов теперь должно быть переписано в виде

$$\Delta T_{\mathbf{K}} + \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle > \pi^2 \frac{\hbar^2}{2mL^2}. \quad (11)$$

2. К р и т и ч е с к а я т е м п е р а т у р а

Из предыдущего раздела следует, что для правильной оценки условия делокализации необходимо вычислить величину $\langle p^2/2m \rangle$, определяемую (2). Указанная формула относится к обычным электронам зоны проводимости. В нашем случае, очевидно, $p^2/2m > \mu$. Поэтому стандартным путем можно проверить, что

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \simeq \frac{3}{2} k_0 T. \quad (12)$$

Используем теперь обозначения работы [8]

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \nu W_0 a_0^2, \quad W_0 = \frac{e_0^2}{2\kappa a_0}, \quad L = \beta N^{-1/3}, \quad (13)$$

где a_0 — боровский радиус примеси, $\beta = 1.014$ [7]. Кроме того, согласно [7],

$$\Delta T_{\mathbf{K}} = \frac{8\pi N a_0^3 W_0 A}{(1 + a^2 K^2)^2}, \quad (14)$$

где $A = 3.08$, $a = 4.25 a_0$. С помощью (11)–(14) для критической температуры получаем выражение

$$\frac{3}{2} k_0 T_{\mathbf{K}} = 8\pi A W_0 (N^{1/3} a_0)^2 \left(\nu \frac{\pi}{8A\beta^2} - N^{1/3} a_0 \right). \quad (15)$$

Из (15), в частности, следует, что если ввести обозначение

$$C = \frac{8\pi A W_0}{k_0} (N^{1/3} a_0)^2 \left(\nu \frac{\pi}{8A\beta^2} - N^{1/3} a_0 \right), \quad (16)$$

то должен иметь место закон

$$C/T_{\mathbf{K}} = 1.5. \quad (17)$$

Значения $C/T_{\mathbf{K}}$ при разных N в случае $\langle \text{SiP} \rangle$

$N \cdot 10^{-17}$, см ⁻³	$\frac{C}{T_{\mathbf{K}}}$	$T_{\mathbf{K}}$, К	$N \cdot 10^{-17}$, см ⁻³	$\frac{C}{T_{\mathbf{K}}}$	$T_{\mathbf{K}}$, К
0.7	1.3	8.1 [6]	2.5	1.7	6.2 [6]
0.9	1.4	8.0 [4, 6]	3.0	1.6	5.5 [4, 6]
1.2	1.4	8.0 } [6]	3.5	1.5	4.5 } [6]
1.6	1.5	7.8 }	4.2	1.2	3.6 }
2.0	1.6	6.9 [5]	4.7	0.5	3.4 [4]

В таблице приведены результаты вычисления отношения $C/T_{\mathbf{K}}$ в случае $\text{Si}\langle \text{P} \rangle$ ($a_0 = 17 \text{ \AA}$, $\kappa = 11.7$, $\nu = 1.09$ [8]). При этом использовались экспериментальные значения $T_{\mathbf{K}}$, приведенные в работах [6] (рис. 5), [4] (рис. 2) и [5] (рис. 13).

Видно, что на широком интервале значений N закон (17) соблюдается достаточно хорошо.

При $N > 4.2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ согласие нарушается. Это может быть связано с тем, что при больших N электроны за время пребывания в зоне проводимости термализоваться не успевают. Данные, например, работы [9] показывают, что последнее вполне возможно.

Приложение

В работе [10] показано, что существует такая унитарная матрица S_{pq} , что

$$\varphi_n = \sum_p \mu_p^{1/2} \xi_p S_{pn}^+, \quad (\xi_p \equiv \xi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_p|)), \quad (\text{П. 1})$$

где

$$\langle \xi_p | \xi_q \rangle = \delta_{pq}, \quad (\text{П. 2})$$

$$\sum_m \sum_n S_{pm}^+ \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle S_{nq} = \mu_p \delta_{pq}. \quad (\text{П. 3})$$

С помощью (П. 1), (П. 2) можно проверить, что

$$\sum_m \sum_n a_m^+ a_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \sum_p A_p^+ A_p \mu_p, \quad (\text{П. 4})$$

где

$$A_p^+ = \sum_n a_n^+ S_{np}, \quad A_p = \sum_n S_{pn}^+ a_n. \quad (\text{П. 5})$$

Заметим, что если имеет место равенство $[a_m, a_n]_+ = \delta_{mn}$, то из (П. 2), (П. 5) следует $[A_p^+, A_q]_+ = \delta_{pq}$. Поэтому A_p^+ , A_p играют роль операторов рождения и уничтожения электрона в состоянии ξ_p (или $\mu_p^{1/2} \xi_p$). Отсюда следует, что если $|\Phi\rangle$ — вектор состояния в пространстве φ_n -функций, а $|\dots, n_p, \dots\rangle$ — такой же вектор в пространстве ξ_p -функций ($n_p = 0, 1$), то имеет место равенство

$$\langle \Phi | \sum_p A_p^+ A_p \mu_p | \Phi \rangle = \sum_{\{n_p\}} |\langle \Phi | \dots, n_p, \dots \rangle|^2 \left(\sum_p n_p \mu_p \right)_{n_p \in \{n_p\}}. \quad (\text{П. 6})$$

В соотношении (П. 6) символом $\{n_p\}$ обозначена некоторая реализация чисел заполнения n_p , а сумма берется по всем реализациям.

Учтем теперь, что, согласно (П. 3),

$$\sum_p \mu_p = N\Omega. \quad (\text{П. 7})$$

Согласно закону больших чисел, из (П. 7) следует

$$\langle \mu_p \rangle = 1, \quad (\text{П. 8})$$

где угловые скобки означают усреднение. Если выполняется условие

$$N_- \Omega \gg 1, \quad (\text{П. 9})$$

где N_- — концентрация электронов, захваченных на нейтральные примеси, то на основании того же закона, согласно (П. 8),

$$\left(\sum_p n_p \mu_p \right)_{n_p \in \{n_p\}} = \left(\sum_p' \mu_p \right)_{n_p \in \{n_p\}} \simeq N_- \Omega, \quad (\text{П. 10})$$

где штрих над суммой означает, что она распространяется только на занятые состояния. Приняв во внимание равенство

$$\langle \Phi | \sum_n a_n^+ a_n | \Phi \rangle = N_- \Omega, \quad (\text{П. 11})$$

мы, подставив (П. 10) в (П. 6) и учитывая (П. 4), убеждаемся в справедливости (7).

Список литературы

- [1] Гершензон Е. М., Гольцман Г. Н., Мельников А. П. // Письма ЖЭТФ. 1971. Т. 14. В. 7. С. 281—283.
- [2] Taniguchi M., Hirano M., Narita S. // Phys. Rev. Lett. 1975. V. 35. N 16. P. 1095—1098.
- [3] Taniguchi M., Narita S., Hasegawa N., Kobayashi M. // J. Phys. Soc. Japan. 1978. V. 45. N 2. P. 545—552.
- [4] Гершензон Е. М., Заяц В. А., Мельников А. П. и др. // Письма ЖЭТФ. 1980. Т. 32. В. 5. С. 344—347.
- [5] Гершензон Е. М., Мельников А. П., Рабинович Р. И., Серебрякова Н. А. // УФН. 1980. Т. 132. В. 2. С. 353—378.
- [6] Банная В. Ф., Гершензон Е. М., Мельников А. П. и др. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. В. 2 (8). С. 746—763.
- [7] Гинзбург Л. П. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 5. С. 813—819.
- [8] Гинзбург Л. П. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 9. С. 1629—1634.
- [9] Ворождова Л. А., Гершензон Е. М., Гурвич Ю. А. и др. // Письма ЖЭТФ. 1986. Т. 43. В. 10. С. 480—482.
- [10] Löwdin P. O. // Rev. Mod. Phys. 1967. V. 39. N 2. P. 259—287.

Московский институт связи

Получена 21.06.1990
Принята к печати 24.10.1990