

## ЭЛЕКТРОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ РАСПЛАВОВ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

Гацкевич Е. И., Малевич В. Л.

Рассчитана электронная проводимость расплавов кремния и германия вблизи соответствующих температур плавления в широкой области частот. Для кремния использовался экспериментально измеренный структурный фактор, а для германия — структурный фактор, вычисленный в рамках модели твердых сфер. В качестве псевдопотенциала выбирался потенциал Ашкрофта. Исследовано влияние обменно-корреляционного взаимодействия в электронном газе на проводимость. Показано, что межэлектронные корреляции существенным образом влияют на ее величину и их учет позволяет достичь хорошего согласия с экспериментом.

Элементарные полупроводники кремний и германий плавятся, как известно [1], по типу полупроводник—металл. Образующийся расплав представляет собой двухкомпонентную электрон-ионную плазму с сильными межionными и межэлектронными корреляциями. Учет последних необходим при расчете электронных явлений переноса. Так, в работе [2] на примере жидкого натрия показано, что обменно-корреляционные эффекты в электронном газе существенно влияют на величину высокочастотной проводимости. Учет этих эффектов позволяет достичь хорошего согласия с экспериментом.

В настоящей работе рассчитаны электропроводность и показатели преломления и поглощения расплавов кремния и германия для произвольных частот  $\omega$  с учетом обменно-корреляционных эффектов в электронной подсистеме.

Отметим, что исследование оптических свойств жидкого кремния и германия особенно важно в связи с проблемой импульсной лазерной модификации полупроводников. Дело в том, что зондирование поверхности полупроводника лазерным излучением с последующей регистрацией параметров отраженного и рассеянного света является одним из основных методов исследования динамики плавления полупроводника под действием лазерного импульса.

Будем исходить из выражения для эффективной частоты столкновений электронов с ионами [2]

$$\nu(\omega) = -\frac{1}{3m\omega Z} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k^2 S_i(k) \frac{|V_{ei}(k)|^2}{|\epsilon(\omega, k)|^2} \text{Im} \chi(\omega, k), \quad (1)$$

где  $m$  — масса электрона,  $Z$  — валентность,  $k$  — волновой вектор электрона,  $S_i(k)$  — ионный структурный фактор,  $V_{ei}(k)$  — фурье-компонента электрон-ионного псевдопотенциала,  $\epsilon(\omega, k) = 1 - \hat{V}_{ee}(k)\chi(\omega, k)$  и  $\chi(\omega, k)$  — диэлектрическая проницаемость и поляризационный оператор электронного газа с учетом обменно-корреляционных эффектов,  $V_{ee} = 4\pi e^2/k^2$ .

В классической области частот  $\omega \ll \epsilon_F/\hbar$  ( $\epsilon_F$  — энергия Ферми,  $\hbar$  — постоянная Планка) для проводимости справедливо обычное выражение теории Друде—Лоренца

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m\nu_0(1 - i\omega/\nu_0)}, \quad (2)$$

где  $n$  — концентрация электронов. Частота столкновений  $\nu_0$  получается из (1) предельным переходом  $\omega \rightarrow 0$  и в отличие от формулы Займана [3] учитывает обменно-корреляционные эффекты.

В работе [2] на основе теории линейного отклика получено выражение для комплексной проводимости

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\nu(\omega)}{m\omega^2} + i \frac{ne^2}{m^*\omega}, \quad (3)$$

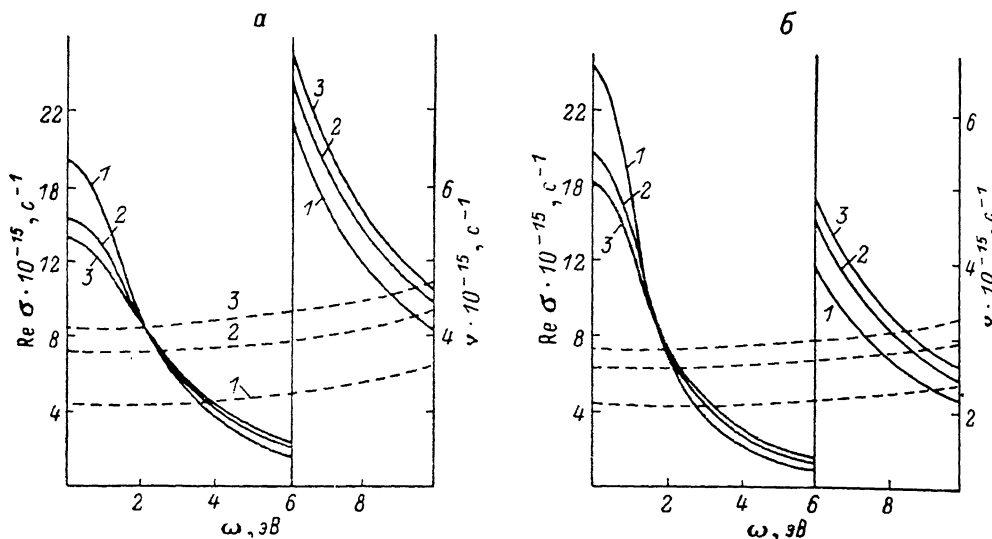


Рис. 1. Вещественная часть проводимости  $\text{Re } \sigma(\omega)$  (сплошные кривые) и эффективная частота столкновений электронов  $\nu(\omega)$  (штриховые кривые) жидкого кремния (а) и германия (б). Вертикальная шкала для проводимости при высоких частотах умножена на фактор 10: 1 — ПСФ, 2 — приближение Хаббарда, 3 — приближение Сингви и др.

справедливое для произвольного соотношения между  $\hbar\omega$  и  $\epsilon_F$  при условии  $\omega \gg \nu$ . В отличие от классической теории [см. (2)] мнимая часть проводимости в (3) определяется эффективной массой  $m^*$ , выражение для которой приведено в [2]. Численный расчет показывает, что для широкой области частот  $m^*$  всего на несколько процентов отличается от массы свободного электрона, и поэтому будем полагать  $m^* = m$ .

Расчет проводился на основании формул (1)–(3), которые полностью определяют электронную проводимость во всей области частот. Электрон-ионное взаимодействие описывалось псевдопотенциалом Ашкрофта, фурье-компонента которого имеет вид

$$V_{ei}(k) = -\frac{4\pi Ze^2}{k^2} \cos(kR_p), \quad (4)$$

Рис. 2. Частотные зависимости показателей преломления  $n$  (1), поглощения  $k$  (2) и коэффициента отражения света при нормальном падении  $R$  (3).

Сплошные кривые — кремний, штриховые — германий, точки — экспериментальные значения для кремния [6].

где параметр  $R_p$  (в ат. ед.) равен 0.972 для кремния и 0.968 для германия [4]. В качестве ионного структурного фактора для германия выбирался структурный фактор для модели твердых сфер [4]. Для кремния ионные корреляции неудовлетворительно описываются в рамках модели твердых сфер, и поэтому в расчетах использовались экспериментальные значения структурного фактора [4].

В настоящее время не существует теории, позволяющей строго учесть влияние обменно-корреляционных эффектов на диэлектрическую проницаемость электронного газа при плотностях, характерных для реальных металлов. Однако эти эффекты можно учесть приближенно с помощью функции  $G(\omega, k)$ :

$$\chi(\omega, k) = \frac{\chi_0(\omega, k)}{1 + V_{ee}G(\omega, k)\chi_0(\omega, k)}, \quad (5)$$

где  $\chi_0$  — поляризационный оператор электронного газа в приближении случайных фаз (ПСФ). Как и в работе [2], будем полагать  $G(\omega, k) \simeq G(\omega, 0)$  и рассмотрим два наиболее часто используемых приближения для этой функции — Хаббарда и Сингви и др. [5].

Результаты расчета (рис. 1) показывают, что в расплавах кремния и германия обменно-корреляционные эффекты существенно влияют на величину проводимости во всей области частот. Наилучшим приближением для учета межэлектронных корреляций является приближение Сингви и др. В этом случае расхождение между расчетными и экспериментально измеренными значениями статической [1] и высокочастотной [6] проводимостей (последняя измерена только для кремния) не превышает 10 %, что можно считать хорошим согласованием, учитывая погрешности в определении структурного фактора и неопределенность в выборе параметров псевдопотенциала. Заметим, что эффективная частота столкновений электронов с ионами слабо зависит от  $\omega$ , т. е. квантовый характер поглощения света в рассматриваемой области частот практически не проявляется.

Из значений проводимости, рассчитанных в приближении Сингви и др., получены частотные зависимости показателей преломления и поглощения и коэффициент отражения света при нормальном падении. Эти зависимости и экспериментальные значения показателей приведены на рис. 2. Из рисунка видно, что рассчитанные значения удовлетворительно совпадают с экспериментальными.

В заключение отметим, что проводимости расплавов кремния и германия рассчитывались при соответствующих температурах плавления. Отсутствие данных о температурной зависимости структурных факторов жидкого кремния и германия, к сожалению, не позволяет рассчитать температурное поведение проводимости и оптических свойств, хотя такая зависимость представляет значительный интерес в связи с проблемой исследования динамики плавления полупроводников под действием лазерного импульса.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Глазов В. М., Чижевская С. Н., Глаголева Н. Н. Жидкие полупроводники. М., 1967 244 с.
- [2] Бобров В. Б., Тригер С. А. — ЖЭТФ, 1984, т. 86, в. 2, с. 514—520.
- [3] Физика металлов. I. Электроны / Под ред. Дж. Займана. М., 1972. 464 с.
- [4] Shih W.-H., Stroud D. — Phys. Rev., 1985, v. 31, N 6, p. 3715—3719.
- [5] Достижения электронной теории металлов, т. 1 / Под ред. П. Цише, Г. Лемана. М., 1984. 280 с.
- [6] Шварев К. М., Баум Б. А., Гельд П. В. — ФТТ, 1974, т. 16, в. 11, с. 3246—3248.

Институт электроники АН БССР  
Минск

Получена 15.09.1987  
Принята к печати 9.10.1987