Интерполяционная формула для кулоновской щели в слаболегированных и компенсированных полупроводниках

© С.Л. Арутюнян

Государственный инженерный университет Армении,
Гюмрийский образовательный комплекс,
377503 Гюмри, Армения

E-mail: sashar@rambler.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 24 марта 2003 г.)

Для функции плотности состояний носителей заряда в примесной зоне слаболегированного полупроводника предлагается зависящая от двух параметров итерполяционная формула, которая справедлива для произвольного значения энергии. Указанные параметры, первый из которых есть уровень Ферми, а второй характеризует ширину пиков функции плотности состояний, определяются из условий нормировки и электронейтральности.

Многочисленные теоретические работы доказывают, а экспериментальные факты прямо или косвенно подтверждают существование кулоновской щели в плотности состояний носителей заряда вблизи уровня Ферми в слаболегированных полупроводниках как в двумерных, так и в трехмерных системах (см., например, [1–8] и ссылки в них).

В частности, в работе [3] для трехмерных систем доказано, что вследствие дальнодействующего характера кулоновского потенциала плотность состояний $g(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми μ обращается в нуль по универсальному закону

$$g(\varepsilon) = \frac{3}{\pi}\,\frac{\kappa^3}{a^6}\,(\varepsilon-\mu)^2 = \frac{4n_D(\varepsilon-\mu)^2}{\varepsilon_D^3}, \qquad (1)$$

где n_D — концентрация основных примесей-доноров, $\varepsilon_D = e^2/\kappa R_D$ — энергия кулоновского взаимодействия на среднем расстоянии $R_D = (4\pi n_D/3)^{-\frac{1}{3}}$ между донорами, κ — диэлектрическая проницаемость образца.

Аналитическое исследование функции $g(\varepsilon)$ в широком интервале изменения ε связано со сложной многоэлектронной задачей, которую невозможно свести к одноэлектронной (см., например, [4]). Поэтому для исследования структуры примесной зоны широко применяется метод численного моделирования (см. обзор [5]).

В [5] приводятся результаты исследования примесной зоны и графические зависимости функции $g(\varepsilon)$, полученные по методу численного моделирования при разных степенях компенсации $K = n_A/n_D$ (n_A — концентрация компенсирующих примесей, например акцепторов в электронном полупроводнике).

Исходя из результатов работ [1–3,5,6], можно утверждать, что численными методами исследования структуры примесной зоны в настоящее время установлено следующее.

1) Плотность состояний всегда имеет два пика. Высокоэнергетический пик связан с ионизированными донорами, а низкоэнергетический пик соответствует заполненным донорам.

2) Между этими пиками и расположена кулоновская щель, причем вблизи уровня Ферми $g(\varepsilon)$ стремится к нулю по закону (1).

3) В предельных случаях слабых $K \to 0$ и сильных $K \to 1$ компенсаций ширина кулоновской щели стремится к нулю.

В условиях отсутствия строгой теории структуры примесной зоны при исследовании физичских свойств образцов, определяющихся структурой этой зоны, в основном используются различные численные методы (см., например, [9]). Анализ экспериментальных данных в основном ведется в трех направлениях.

В первом подходе используются функции плотности состояний, которые получены в случаях предельно слабых и сильных компенсаций (см., например, [4,10]). Во втором используется формула (1), которая справедлива вблизи вровня Ферми (см., например, [5]). В третьем подходе — вдали от уровня Ферми — в зависимости от условий задачи выбирают ту или иную функцию (см., например, [11,12]), которая справедлива в определенном узком интервале.

Очевидно, что в таких условиях для анализа опытных данных желательно иметь формулу, адекватно воспроизводящую отмеченные выше свойства функции $g(\varepsilon)$ в широком интервале изменения энергии ε.

В настоящей работе предлагается такая интерполяционная формула для функции $g(\varepsilon)$.

Легко убедиться, что функция типа

$$g(\varepsilon) = \frac{4n_D(\varepsilon-\mu)^2}{\varepsilon_D^3}\exp\frac{\mu^2-\varepsilon^2}{\gamma^2} \qquad (2)$$

с подгоночными параметрами μ и γ удовлетворяет всем требованиям пунктов 1–3 (см. далее). Причем параметр μ есть уровень Ферми, а параметр γ характеризует ширину пиков, упомянутых в пункте 1.

Для определения подгоночных параметров, необходимо использовать условие нормировки $\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon)d\varepsilon = n_D$ и

Численные значения параметров c (значение энергии Ферми в единицах ε_D), a (характеризует ширину побочных максимумов), Δ_0 (характеризует ширину кулоновской щели) при разных степенях компенсаций

K	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
c	0.258	0.184	0.119	0.058	0	−0.058	−0.119	−0.184	−0.258
a	0.285	0.36	0.402	0.423	0.43	0.423	0.402	0.36	0.285
Δ_0	1.099	1.214	1.273	1.303	1.312	1.303	1.273	1.214	1.099

улосвие электронейтральности, которое при абсолютном нуле температуры имеет вид $\int\limits_{\mu}^{\infty} g(\varepsilon)d\varepsilon = n_A$.

Из этих условий с учетом (2) для безразмерных параметров $c = \mu/\varepsilon_D$ (c — энергия Ферми в единицах ε_D) и $a = \left(\frac{\gamma}{\varepsilon_D}\right)^2$ получается система трансцендентных уравнений

$$1 + \frac{2c^2}{a} = \frac{1}{2\sqrt{\pi a^3}} \exp\left(-\frac{c^2}{a}\right),$$

$$\operatorname{erfc}\left(\frac{c}{\sqrt{a}}\right) = 2K + \frac{4c}{a}, \qquad (3)$$

где $\operatorname{erfc}(x)$ — разновидность функции ошибок.

Численные решения систем при разных степенях компенсации приведены в таблице.

Из таблицы видно, что в области $K < 0.5$ энергия Ферми $\mu > 0$ (энергия отсчитывается от уровня энергии изолированного донора E_D). В этой области с увеличением K μ монотонно убывает и при $K = 0.5$ $\mu = 0$. В области $1 > K > 0.5$ $\mu < 0$ и с увеличением K опять μ монотонно убывает.

Если считать, что ширина кулоновской щели — энергетическое расстояние между пиками, то из (2) для ширины щели в единицах ε_D будем иметь

$$\Delta_0 = \sqrt{c^2 + 4a}. \qquad (4)$$

Численные оценки Δ_0, приведенные в таблице, свидетельствуют о том, что ширина щели наибольшая при $K = 0.5$, а в предельных случаях слабых ($K \to 0$) и сильных ($K \to 1$) компенсаций уменьшается; кроме того, если учесть, что при таких предельных компенсациях высота одного из пиков стремится к нулю, можно утверждать, что в таких условиях кулоновской щелью можно пренебречь.

Все эти результаты полностью совпадают с результатами, полученными при помощи численного моделирования [4,5], что и позволяет использовать их при анализе экспериментальных данных кинетических и оптических свойств указанных систем.

Список литературы

[1] M.L. Knotek, M. Pollak. Phys. Rev. B **9**, 664 (1974).
[2] T. Kurosava, H. Sugimoto. Prog. Ther. Phys. (Suppl.) **57**, 217 (1975).
[3] A.L. Efros, B.I. Shklovskii. J. Phys. C.: Sol. Stat. Phys. **8**, L49 (1975).
[4] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. Наука, М. (1979).
[5] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ФТП **14**, 925 (1980).
[6] Э.В. Девятов, А.А. Шашкин, В.Т. Долгополов, В. Ханзен, М. Холланд. УФН **170**, *3*, 327 (2000).
[7] А.Г. Андреев, А.Г. Забродский, И.П. Взягин, С.В. Егоров. ФТП **31**, *10*, 1174 (1997).
[8] А.Г. Забродский. УФН **168**, *7*, 804 (1998).
[9] В.М. Барздов, Т.А. Петрович. ФТП **31**, *1*, 89 (1997).
[10] S.L. Harotunian, V.A. Harotunian, H.A. Jivanian, G.O. Denirjian. Thin Solid Films **258**, 357 (1995).
[11] Н.А. Покровский, С.Ю. Лопатин, А.Г. Забродский. ФТТ **42**, *3*, 432 (2000).
[12] Д.В. Николаев, В.Н. Архипов, В.Р. Никитенко. ФТП **34**, *6*, 682 (2000).