

Дипольная модель сужения энергетической щели между зонами Хаббарда в слабо компенсированных полупроводниках

© Н.А. Поклонский[¶], С.А. Вырко, А.Г. Забродский*

Белорусский государственный университет,
220050 Минск, Белоруссия

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 19 июля 2005 г. Принята к печати 5 сентября 2005 г.)

Предложена модель сужения энергетической щели между зонами Хаббарда (A^0 - и A^+ -зонами для акцепторов и D^0 - и D^- -зонами для доноров) с ростом концентрации легирующей водородоподобной примеси при низкой концентрации компенсирующей примеси. Ширина примесных зон предполагается малой по сравнению со щелью между ними. Учтено, что локальное кулоновское взаимодействие ионов электрического диполя, образовавшегося в результате перехода дырки (электрона) между двумя электрически нейтральными примесными атомами, уменьшает величину щели. Рассчитанные значения термической энергии активации прыжкового перехода дырок (электронов) между примесными зонами согласуются с экспериментальными данными для слабо компенсированных кристаллов p -Si:B, p -Ge:Ga и n -Ge:Sb.

PACS: 71.27.+a, 71.20.Fi, 71.30.+h, 71.55.Cn, 72.20.Fr

1. Введение

Согласно [1], в умеренно легированных слабо компенсированных кристаллах, например в p -Si:B, при низких температурах наряду с A^0 -центрами, т.е. атомами бора в зарядовых состояниях (-1) и (0) , существуют также A^+ -центры — атомы бора в зарядовом состоянии $(+1)$. Акцепторы в зарядовых состояниях $(+1)$ имеют статистический разброс по энергии и образуют A^+ -зону (верхнюю зону Хаббарда), которая расположена ближе к потолку валентной зоны (v -зоны), чем A^0 -зона (нижняя зона Хаббарда). В кристалле n -Ge:Sb существуют D^0 - и D^- -зоны: атомы сурьмы, находящиеся в зарядовых состояниях (0) и $(+1)$, формируют D^0 -зону, в зарядовых состояниях (-1) — формируют D^- -зону. На рис. 1, a, b показаны энергетические плотности состояний $g(E)$ дырок в примесных A^0 -, A^+ -зонах (g_b, g_t соответственно) и в валентной зоне (g_v) полупроводника p -типа, а также электронов в примесных D^0 -, D^- -зонах (g_b, g_t) и в зоне проводимости (g_c) полупроводника n -типа.

В работе [2] предпринята попытка количественного описания термической энергии активации прыжковой электропроводности по донорам с учетом D^- -зоны. Из решения стационарного уравнения Шредингера найдено расщепление симметричного и антисимметричного термов отрицательно заряженной „молекулы“, состоящей из двух доноров: один электрически нейтральный, а второй в зарядовом состоянии (-1) . Показано, что уменьшение энергетической щели между D^0 - и D^- -зонами обусловлено сдвигом D^- -зоны к D^0 -зоне и пропорционально концентрации нейтральных доноров N_0 .

Однако как в модели [2], так и при ее модернизации в серии работ [3] не учитывался сдвиг D^0 -зоны к c -зоне (или A^0 -зоны к v -зоне) с ростом концентрации легирующих и компенсирующих примесей (см., например, [4]). Не учитывалось также, что наряду с акти-

вацией перехода дырок из A^0 - в A^+ -зону (электронов из D^0 - в D^- -зону) в прыжковой электропроводности должна проявляться также термически активированная миграция дырок (электронов) в самой верхней зоне. Как следствие, модели [2,3] не дают адекватного описания энергии активации прыжкового переноса зарядов между нижней (b) и верхней (t) зонами Хаббарда [5].

Цель работы — развить модель локального сужения энергетической щели между A^0 - и A^+ -зонами (D^0 - и D^- -зонами), обусловленного электрическим диполем, образующимся при термически активированном переходе дырки (электрона) из нижней в верхнюю зону Хаббарда.

2. Модель ионизационного равновесия между узкими A^0 - и A^+ -зонами

Рассмотрим кристаллический полупроводник p -типа, умеренно легированный акцепторами и слабо компенсированный донорами. Условие электронейтральности при наличии A^0 - и A^+ -зон имеет вид

$$N_{-1} = N_{+1} + KN, \quad (1)$$

где $N = N_{-1} + N_0 + N_{+1}$ — суммарная концентрация акцепторов в зарядовых состояниях (-1) , (0) и $(+1)$; KN — концентрация водородоподобных доноров, полностью находящихся в зарядовом состоянии $(+1)$; $K \ll 1$ — степень компенсации акцепторов донорами.

Средняя по кристаллу концентрация нейтральных (N_0), отрицательно (N_{-1}) и положительно (N_{+1}) заряженных акцепторов составляет [6]:

$$N_Z = N \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_Z g_b g_t d(E_b - \bar{E}_b) d(E_t - \bar{E}_t). \quad (2)$$

Здесь учтены энергетические плотности распределения уровней E_b и E_t относительно их средних значений \bar{E}_b

[¶] E-mail: poklonski@bsu.by

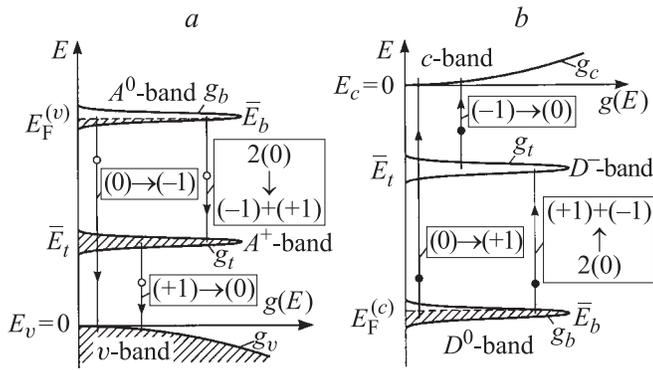


Рис. 1. Схема A^0 - и A^+ -зон в запрещенной зоне полупроводника p -типа (а); D^0 - и D^- -зоны в полупроводнике n -типа (б). Стрелки соответствуют переходам дырок (светлые кружки) или электронов (темные кружки), приводящим к изменению зарядовых состояний акцепторов (доноров). Заполненные электронами состояния заштрихованы; E_v — потолок v -зоны, E_c — дно c -зоны; $E_F^{(v)}$, $E_F^{(c)}$ — уровни Ферми в полупроводниках p -типа и n -типа, соответственно.

и \bar{E}_t в запрещенной зоне полупроводника:

$$g_b = g_b(E_b - \bar{E}_b), \quad g_t = g_t(E_t - \bar{E}_t),$$

f_Z — вероятность того, что акцептор находится в одном из трех возможных зарядовых состояний $Z = -1, 0, +1$. Если пренебречь возбужденными состояниями дырок на акцепторе, то согласно [7] имеем

$$f_Z^{-1} = \sum_{Z'=-1}^{+1} \frac{\beta_{Z'}}{\beta_Z} \exp \left[\frac{(Z - Z')E_F + E_Z - E_{Z'}}{k_B T} \right], \quad (3)$$

где E_F — уровень Ферми, $k_B T$ — тепловая энергия; β_Z — число квантовых состояний акцептора в зарядовом состоянии Z с энергией E_Z .

В качестве начала отсчета энергии акцепторов выберем энергию, соответствующую потолку v -зоны ($E_v = 0$) нелегированного кристалла. Переход акцептора из нейтрального (0) в отрицательно заряженное (-1) состояние при тепловой эмиссии дырки из A^0 -зоны в v -зону сопровождается поглощением энергии $E_b = E_{-1} - E_v - E_0 > 0$. Переход акцептора из положительно заряженного (+1) в нейтральное (0) состояние сопровождается поглощением энергии $E_t = E_0 - E_v - E_{+1}$ (эмиссия дырки из A^+ -зоны в v -зону). При переходе двух электрически нейтральных акцепторов в отрицательно и положительно заряженные ионы поглощается энергия

$$E_b - E_t = E_{-1} + E_{+1} - 2E_0.$$

В силу принципа детального термодинамического равновесия при „рекомбинации“ зарядовых состояний акцепторов (+1) и (-1) и превращения их в два электрически нейтральных состояния акцепторов в среднем эта же энергия выделяется.

Будем рассматривать „узкие“ примесные зоны,¹ ширины которых много меньше энергетической щели между ними, а энергетические плотности распределения примесных уровней аппроксимируем δ -функциями:

$$g_b = \delta(E_b - \bar{E}_b), \quad g_t = \delta(E_t - \bar{E}_t).$$

Тогда выражение (2) для концентрации акцепторов в зарядовых состояниях $Z = -1, 0, +1$ принимает вид

$$N_Z = N f_Z, \quad (4)$$

где согласно (3) обратные функции распределения $1/f_Z$ акцепторов по зарядовым состояниям имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{-1}} &= 1 + \beta_b \exp \left(\frac{E_F^{(v)} + E_b}{k_B T} \right) \\ &\quad + \frac{\beta_b}{\beta_t} \exp \left(\frac{E_b + E_t + 2E_F^{(v)}}{k_B T} \right), \\ \frac{1}{f_0} &= 1 + \frac{1}{\beta_b} \exp \left(-\frac{E_F^{(v)} + E_b}{k_B T} \right) + \frac{1}{\beta_t} \exp \left(\frac{E_F^{(v)} + E_t}{k_B T} \right), \\ \frac{1}{f_{+1}} &= 1 + \beta_t \exp \left(-\frac{E_F^{(v)} + E_t}{k_B T} \right) \\ &\quad + \frac{\beta_t}{\beta_b} \exp \left(-\frac{E_b + E_t + 2E_F^{(v)}}{k_B T} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $E_F^{(v)} = E_v - E_F$ — уровень Ферми, отсчитанный от потолка v -зоны;

$$E_b = E_{-1} - E_v - E_0 > 0, \quad E_t = E_0 - E_v - E_{+1} > 0.$$

Для акцепторных атомов В в кремнии и Ga в германии, следуя [7,10], имеем: $\beta_b = \beta_0/\beta_{-1} = 4$, $\beta_t = \beta_0/\beta_{+1} = 1/4$.

Здесь отметим, что согласно (3) обратные функции распределения $1/f_Z$ доноров по зарядовым состояниям $Z = +1, 0, -1$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{+1}} &= 1 + \beta_b \exp \left(\frac{E_F^{(c)} + E_b}{k_B T} \right) \\ &\quad + \frac{\beta_b}{\beta_t} \exp \left(\frac{E_b + E_t + 2E_F^{(c)}}{k_B T} \right), \\ \frac{1}{f_0} &= 1 + \frac{1}{\beta_b} \exp \left(-\frac{E_F^{(c)} + E_b}{k_B T} \right) + \frac{1}{\beta_t} \exp \left(\frac{E_F^{(c)} + E_t}{k_B T} \right), \\ \frac{1}{f_{-1}} &= 1 + \beta_t \exp \left(-\frac{E_F^{(c)} + E_t}{k_B T} \right) \\ &\quad + \frac{\beta_t}{\beta_b} \exp \left(-\frac{E_b + E_t + 2E_F^{(c)}}{k_B T} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

¹ Согласно численным оценкам, собранным в [8], кулоновской щелью [9] в плотности состояний дырок на уровне Ферми в акцепторной A^0 -зоне слабо легированных и слабо компенсированных (формально при $K \rightarrow 0$) полупроводников можно пренебречь.

Здесь $E_F^{(c)} = E_F - E_c$ — уровень Ферми, отсчитанный от дна c -зоны;

$$E_b = E_{+1} + E_c - E_0 > 0, \quad E_t = E_0 + E_c - E_{-1} > 0.$$

Для атомов Sb в германии [7,10] имеем: $\beta_b = \beta_0/\beta_{+1} = 2$, $\beta_t = \beta_0/\beta_{-1} = 1/2$.

Изменение энергетической щели между A^0 - и A^+ -зонами (уровнями) оценим исходя из того факта, что в термодинамическом равновесии число актов „рекомбинации“ акцепторов в зарядовых состояниях (+1) и (-1) равно числу актов перехода акцепторов в зарядовых состояниях (0) в противоположно заряженные пары ионов — электрические диполи. Рассмотрим область температур, при которых только начинается тепловой заброс дырок из A^0 - в A^+ -зону, т.е. когда еще $KN \gg N_{+1}$, а концентрация нейтральных акцепторов максимальна и согласно (1) равна $(1-K)N$. При случайном, пуассоновском, распределении нейтральных примесей по кристаллу вероятность того, что на расстоянии R от произвольного нейтрального акцептора в интервале $(R, R+dR)$ находится ближайший к нему нейтральный акцептор и нет примесных атомов в объеме $4\pi R^3/3$, есть [11–14]:

$$\mathcal{P}(R) dR = 4\pi R^2(1-K)N \exp\left[-\frac{4\pi}{3}R^3(1+K)N\right] dR, \quad (7)$$

где $(1-K)N$ — концентрация электрически нейтральных акцепторов, $(1+K)N$ — концентрация всех примесных атомов в кристалле.

После термически активированного перехода двух ближайших по расстоянию нейтральных акцепторов в ионы и образования диполя средняя кулоновская энергия их взаимодействия (определяется средним обратным расстоянием между нейтральными примесными атомами) с учетом (7), при $K \ll 1$, равна²

$$U_{\text{dip}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \int_0^\infty \frac{1}{R} \mathcal{P}(R) dR \approx -2.183 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \left(1 - \frac{5}{3}K\right) N^{1/3}, \quad (8)$$

где $\epsilon_r\epsilon_0$ — статическая диэлектрическая проницаемость нелегированного кристалла (кристаллической решетки).

Следуя схеме учета кулоновского взаимодействия ионов примесей при описании донорно-акцепторной излучательной рекомбинации³ (см., например, [15]), можно положить, что именно на величину U_{dip} (8) в среднем уменьшается энергия, необходимая для перехода дырки

² Энергия U_{dip} в среднем выделяется при прыжковом переходе дырки с акцептора в зарядовом состоянии (+1) на ближайший акцептор в зарядовом состоянии (-1) и превращении их в два электрически нейтральных акцептора.

³ Энергия испускаемого фотона при переходе электрона с донора в зарядовом состоянии (0) на акцептор в зарядовом состоянии (0) тем больше, чем меньше расстояние между образующимися ионами.

из A^0 -зоны в A^+ -зону (рис. 1, а). Тогда для „локальной“ энергетической щели E_2 между A^0 - и A^+ -зонами получаем (ср. с работами [16–18]):

$$E_2 = E_b - E_t = I_2 + U_{\text{dip}}, \quad (9)$$

где

$$I_2 = I_b - I_t = (1 - 0.055)I_b = 0.945I_b$$

— энергетическая щель между уровнями (зонами) Хаббарда для одиночного водородоподобного акцептора [19],

$$I_b = I_{-1} - E_v - I_0 > 0; \quad I_t = I_0 - E_v - I_{+1} > 0$$

— энергии, необходимые для перехода дырки с нейтрального (индекс b) и с положительно заряженного (индекс t) акцепторов в v -зону; $I_b \equiv I_H = e^2/(8\pi\epsilon_r\epsilon_0 a_H)$ — боровская энергия; $U_{\text{dip}} < 0$ — средняя электростатическая энергия диполя, образовавшегося в результате прыжка дырки между электрически нейтральными ближайшими акцепторами. Для атома бора в узле решетки кремния $I_b = 44.39$ мэВ [20], так что согласно модели отрицательно заряженного иона водорода [19] получаем $I_t = 0.055I_b \approx 2.44$ мэВ [1]. Аналогично для акцепторного атома галлия в узле решетки германия $I_b = 11.32$ мэВ, $I_t \approx 0.62$ мэВ. Примесные уровни одиночного атома сурьмы в кристалле германия таковы: $I_b = 10.45$ мэВ, $I_t = 0.055I_b \approx 0.57$ мэВ.

Из формул (9) и (8) следует, что электростатическое взаимодействие двух ближайших акцепторов в зарядовых состояниях (+1) и (-1), образованных из двух нейтральных акцепторов, приводит к „локальному“ сдвигу уровня E_b по направлению к v -зоне, а уровня E_t — от v -зоны (ср. с работами [21,22]):

$$E_b = I_b + \frac{1}{2} U_{\text{dip}} \approx I_b - 1.09 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \left(1 - \frac{5}{3}K\right) N^{1/3},$$

$$E_t = I_t - \frac{1}{2} U_{\text{dip}} \approx I_t + 1.09 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \left(1 - \frac{5}{3}K\right) N^{1/3}, \quad (10)$$

где U_{dip} — электростатическая энергия среднестатистического диполя, состоящего из акцепторов в зарядовых состояниях (+1) и (-1); $\epsilon_r = 11.5$ для Si [23], $\epsilon_r = 15.4$ для Ge [24].

Отметим, что формула (10) предсказывает увеличение энергии перехода дырок E_t из A^+ -зоны в v -зону с ростом N для $K \ll 1$, что подтверждается экспериментальными данными (см. обзор [1]), но не согласуется с расчетами в [25].

3. Энергия термической активации ϵ_2 прыжковой электропроводности

Экспериментально установлено, что температурная зависимость прыжковой электропроводности σ_h на постоянном токе объемных ковалентных полупроводников

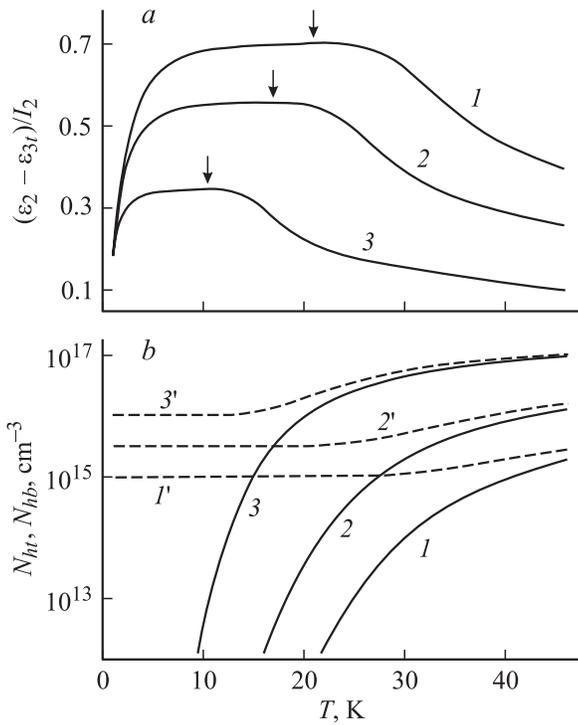


Рис. 2. *a* — температурные зависимости энергии активации $\epsilon_2 - \epsilon_{3t}$ перехода дырок из A^0 -зоны в A^+ -зону для p -Si:B, рассчитанные по формуле (13) при $K = 0.01$; $N, 10^{17} \text{ см}^{-3}$: 1 — 1, 2 — 3, 3 — 10. Максимальные значения $\epsilon_2 - \epsilon_{3t}$ отмечены стрелками. *b* — рассчитанные по соотношениям (4), (5) температурные зависимости концентраций прыгающих в A^+ - и A^0 -зонах дырок $N_{ht} = N_{+1}N_0/N$ (сплошные линии 1–3) и $N_{hb} = N_0N_{-1}/N$ (штриховые линии 1'–3') при $K = 0.01$ для $N, 10^{17} \text{ см}^{-3}$: 1, 1' — 1; 2, 2' — 3; 3, 3' — 10.

имеет вид [1,26]

$$\sigma_h = \sigma_{ht} + \sigma_{hb} = \sigma_2 \exp\left(-\frac{\epsilon_2}{k_B T}\right) + \sigma_3 \exp\left(-\frac{\epsilon_3}{k_B T}\right), \quad (11)$$

где σ_{ht} — прыжковая электропроводность, определяемая переходами электронов (дырок) между зонами Хаббарда (электронов из D^0 - в D^- -зону для доноров, дырок из A^0 - в A^+ -зону для акцепторов); σ_{hb} — прыжковая электропроводность, связанная с прыжками электронов (дырок) по примесным атомам (в D^0 - или A^0 -зонах); σ_2, σ_3 — предэкспоненциальные множители, слабо (по сравнению с соответствующими экспонентами) зависящие от температуры; ϵ_2, ϵ_3 — энергии термической активации в соответствующих каналах прыжкового переноса зарядов.⁴

Согласно [28–30] прыжковая электропроводность σ_h дырок по акцепторам складывается из электропровод-

⁴ В работе [27] экспериментально исследовалась зависимость энергии активации ϵ_3 прыжкового переноса дырок в A^0 -зоне от концентрации и степени компенсации атомов бора в кристаллах кремния. Показано, что существующие теории ϵ_3 для слабо компенсированных полупроводников не могут количественно описать экспериментальные данные.

ности A^0 -зоны $\sigma_{hb} = eN_{hb}M_{hb}$ и электропроводности A^+ -зоны $\sigma_{ht} = eN_{ht}M_{ht}$, где $N_{hb} = N_0N_{-1}/N$ — концентрация прыгающих дырок с подвижностью M_{hb} в A^0 -зоне, $N_{ht} = N_{+1}N_0/N$ — концентрация прыгающих дырок с подвижностью M_{ht} в A^+ -зоне (см. расчет N_{ht} и N_{hb} для p -Si:B при $K = 0.01$ и разных концентрациях атомов бора N на рис. 2, *b*). Максимально возможная концентрация прыгающих в A^0 - и A^+ -зонах дырок равна $N_{hb}^{(m)} = N_{ht}^{(m)} = N/8$ (см. [31]).

Здесь заметим, что при отсутствии дырок в v -зоне длина экранирования Λ_s внешнего электростатического поля в кристаллическом полупроводнике с узкими A^0 - и A^+ -зонами (уровнями) в приближении Дебая–Хюккеля⁵ имеет вид [6,31]

$$\Lambda_s = \sqrt{\frac{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T}{e^2 N_s}},$$

где $N_s = N_{hb} + N_{ht} + N_{\text{dip}}$ — эффективная концентрация зарядов, экранирующих поле; $(N_{hb} + N_{ht})$ — сумма концентраций прыгающих в A^0 - и A^+ -зонах дырок; $N_{\text{dip}} = 4N_{+1}N_{-1}/N$ — эффективная концентрация электрических диполей, образованных акцепторами в зарядовых состояниях (-1) и $(+1)$;

$$N = \sum_{Z=-1}^{+1} N_Z$$

— концентрация акцепторов в кристалле.

Когда реализуется термический заброс дырок из A^0 -зоны в A^+ -зону, то экспериментально измеряемая температурная зависимость прыжковой электропроводности между акцепторами согласно (11) при $\sigma_{ht} \gg \sigma_{hb}$ представима в виде

$$\sigma_{ht} = eN_{ht}M_{ht} = \sigma_2 \exp\left(-\frac{\epsilon_2}{k_B T}\right). \quad (12)$$

Энергия активации ϵ_2 состоит из энергии термической активации дырок из A^0 - в A^+ -зону и энергии прыжкового движения дырок в A^+ -зоне.

Согласно [29–31] температурные зависимости подвижностей

$$M_{ht} = M_{+1,0} \exp(-\epsilon_{3t}/k_B T) \text{ и } M_{hb} = M_{0,-1} \exp(-\epsilon_{3b}/k_B T)$$

определяются энергиями активации ϵ_{3t} и ϵ_{3b} прыжков дырок в A^+ - и A^0 -зонах.⁶ С учетом этого из (12)

⁵ Предполагается, что тепловая энергия $k_B T$ больше ширины A^0 - и A^+ -зоны, а также электростатической энергии иона примеси во внешнем поле.

⁶ В работе [32] не учитывалась зависимость прыжковой подвижности M_{ht} от температуры, а также корреляция между размещением зарядовых состояний примесей в кристалле. Поэтому ее результаты по расчету ϵ_2 применимы для полупроводников с промежуточной степенью компенсации основной легирующей примеси $0.1 < K < 0.9$.

получаем

$$\begin{aligned} \varepsilon_2 &= -k_B \frac{d \ln \sigma_{ht}}{d(1/T)} \\ &= -k_B \left(\frac{d \ln N_0}{d(1/T)} + \frac{d \ln N_{+1}}{d(1/T)} \right) + \varepsilon_{3t}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\varepsilon_{3t} = -k_B d(\ln M_{ht})/d(1/T)$ — энергия термической активации прыжковой миграции дырок в A^+ -зоне.

Производные по обратной температуре от N_0 и N_{+1} определяются в (13) из условия электронейтральности (1) с учетом соотношений (4), (5) и (10). Для случая прыжков электронов между донорами вместо (5) в расчетах используются формулы (6).

На рис. 2, *a* представлены рассчитанные по (13) температурные зависимости $\varepsilon_2 - \varepsilon_{3t}$ для кристаллов p -Si:В при концентрации атомов бора $N = 10^{17}$, $3 \cdot 10^{17}$, 10^{18} см^{-3} и степени компенсации $K = 0.01$. Для сравнения с экспериментальными данными (см. рис. 3) для каждого N использовалось максимальное значение $\varepsilon_2 - \varepsilon_{3t}$ из температурной зависимости (отмечены стрелками на рис. 2, *a*). Из рис. 2, *a* видно, что чем меньше концентрация легирующей примеси N , тем шире интервал температур, где энергия активации $\varepsilon_2 - \varepsilon_{3t}$ из нижней в верхнюю зону Хаббарда практически не зависит от температуры. Из рис. 2, *b* следует, что прыжковая проводимость по верхней зоне Хаббарда $\sigma_{ht} = e(N_{+1}N_0/N)M_{ht}$ превалирует над проводимостью по нижней зоне $\sigma_{hb} = e(N_0N_{-1}/N)M_{hb}$, если подвиж-

ность M_{ht} превышает M_{hb} более чем на 3 порядка (при температурах, отмеченных на рис. 2, *a* стрелками). Это согласуется с оценками отношения $M_{ht}/M_{hb} \gg 1$ в работах [1,5,33–35]. Из сравнения рис. 2, *a* и 2, *b* получаем, что для интервала температур, где определяется ε_2 , условие $N_{-1} \gg N_{+1}$, принятое при записи формулы (7), выполняется.

Величина энергии активации ε_{3t} необходима для разрыва диполя (термически активируемого прыжкового „разбегания“ зарядовых состояний (+1) и (-1) акцепторов друг от друга). Энергия ε_{3t} для движения дырок в A^+ -зоне (электронов в D^- -зоне) пока экспериментально не измерена. Поскольку состояния в верхней зоне „перекрываются“ больше, чем в нижней зоне Хаббарда [27,29,36], то $\varepsilon_{3t} \leq \varepsilon_{3b} = \varepsilon_3$. Поэтому в качестве верхней оценки ε_{3t} можно взять энергию активации $\varepsilon_{3b} = \varepsilon_3$ движения дырок в A^0 -зоне (электронов в D^0 -зоне). По этой причине на рис. 3 не представлены экспериментальные данные тех немногих работ по ε_2 , в которых не приводятся значения ε_3 .

На рис. 3 приведен расчет $\varepsilon_2 - \varepsilon_{3t}$ по формуле (13) при $K = 0.01$ (линии 1–3) в сравнении с экспериментальными данными $\varepsilon_2 - \varepsilon_3$ для слабо компенсированных полупроводников: p -Si:В [33–35], p -Ge:Ga [37] и n -Ge:Sb [38–43]. При расчете принималось:

$$I_b = 44.39 \text{ мэВ}, \quad I_t = 2.44 \text{ мэВ} \text{ и } \varepsilon_r = 11.5 \text{ для } p\text{-Si:В};$$

$$I_b = 11.32 \text{ мэВ}, \quad I_t = 0.62 \text{ мэВ} \text{ и } \varepsilon_r = 15.4 \text{ для } p\text{-Ge:Ga};$$

$$I_b = 10.45 \text{ мэВ}, \quad I_t = 0.57 \text{ мэВ} \text{ для } n\text{-Ge:Sb}.$$

Кривые 1–3 для степени компенсации $K = 0.01$ аппроксимируются формулой $(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)/I_2 \approx 1 - 4.54N^{1/3}a_H$, где $a_H = e^2/8\pi\varepsilon_r\varepsilon_0I_b$ — боровский радиус. Стрелками отмечены значения критической концентрации примеси N_c для переходов изолятор–металл (см. работу [44] и ссылки в ней); $N_c = 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ для p -Si:В; $1.3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ — p -Ge:Ga; $1.8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ — n -Ge:Sb.

4. Заключение

Для описания зависимости термической энергии активации ε_2 перехода дырки (электрона) из нижней в верхнюю зону Хаббарда (из A^0 - в A^+ -зону для акцепторов и из D^0 - в D^- -зону для доноров) от концентрации водородоподобной примеси в ковалентных слабо компенсированных кристаллических полупроводниках предложен метод учета электрической энергии диполя, образующегося в результате превращения двух электрически нейтральных акцепторов (доноров) в ионы. Примесные зоны (уровни) предполагаются узкими, т.е. ширина их много меньше энергетической щели между ними. Идея предлагаемой работы состоит в том, что „локальное“ сужение щели между зонами Хаббарда обусловлено образованием электрического диполя при единичном акте прыжкового перехода дырки из A^0 - в A^+ -зону (исчезновением диполя при обратном пе-

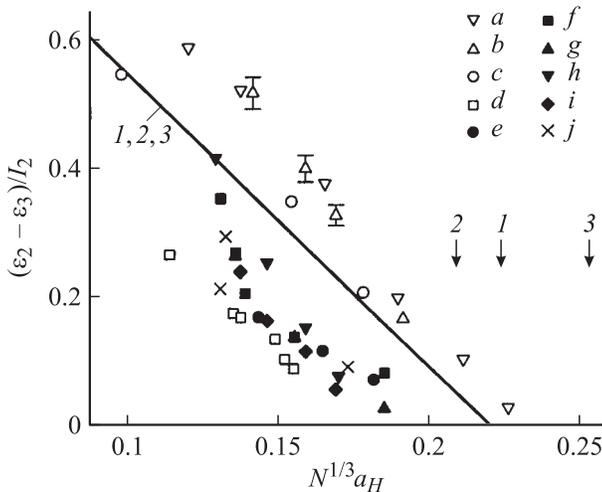


Рис. 3. Термическая энергия активации $\varepsilon_2 - \varepsilon_3$ перехода электронов (дырок) из нижней зоны Хаббарда в верхнюю в зависимости от концентрации N водородоподобных примесных атомов. Линия — расчет для p -Si:В (1), p -Ge:Ga (2) и n -Ge:Sb (3) по формуле (13) при $K = 0.01$; для каждого значения N выбиралось максимальное значение $\varepsilon_2(T) - \varepsilon_3$. Экспериментальные значения $\varepsilon_2 - \varepsilon_3$ (a – c — p -Si:В, d — p -Ge:Ga, e – j — n -Ge:Sb); a — [33], b — [34], c — [35], d — [37], e — [38], f — [39], g — [40], h — [41], i — [42], j — [43]. Стрелками отмечены значения критической концентрации N_c перехода изолятор–металл: 1 — p -Si:В, 2 — p -Ge:Ga, 3 — n -Ge:Sb.

реходе). Энергия среднестатистического диполя равна уменьшению энергетической щели между примесными зонами. (При донорно-акцепторной излучательной рекомбинации энергия испускаемого фотона увеличивается на электростатическую энергию диполя, образующегося при переходе электрона между электрически нейтральными донором и акцептором.) Получена формула, связывающая ширину энергетической щели между зонами Хаббарда легирующей примеси с ее концентрацией и степенью компенсации. Термическая энергия активации прыжкового движения дырок в A^+ -зоне полагалась равной ε_3 — энергии активации прыжкового движения дырок в A^0 -зоне. Результаты расчетов $\varepsilon_2 - \varepsilon_3$ по предложенным формулам без подгоночных параметров согласуются с имеющимися экспериментальными данными для слабо компенсированных полупроводников.

Работа поддержана грантом программы „Низкоразмерные системы“ Министерства образования Республики Беларусь и Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 04-02-16587а), а также Фондом президента РФ (проект НШ-223.2003.02), президиумом и ОФН РАН.

Список литературы

- [1] Е.М. Гершензон, А.П. Мельников, Р.И. Рабинович, Н.А. Серебрякова. УФН, **132** (2), 353 (1980).
- [2] Н. Nishimura. Phys. Rev., **138** (3A), A815 (1965).
- [3] Л.П. Гинзбург. ФТП, **11** (2), 338 (1977); ФТП, **12** (3), 564 (1978); ФТП, **23** (9), 1629 (1989).
- [4] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло, Г. Бискупски. ФТП, **33** (4), 415 (1999).
- [5] Е.М. Гершензон, Ф.М. Исмагилова, Л.Б. Литвак-Горская. ФТП, **28** (4), 671 (1994).
- [6] N.A. Poklonski, V.F. Stelmakh, V.D. Tkachev, S.V. Voitkov. Phys. Status Solidi B, **88** (2), K165 (1978).
- [7] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1990).
- [8] С.Л. Арутюнян. ФТТ, **47** (4), 581 (2005).
- [9] A.G. Zabrodskii. Phil. Mag. B, **81** (9), 1131 (2001).
- [10] К.Я. Штивельман. ФТП, **8** (4), 817 (1974).
- [11] Б.А. Волков, В.В. Матвеев. ФТТ, **8** (3), 717 (1966).
- [12] A. Chatterjea, J.R. Hauser. J. Phys. Chem. Sol., **37** (11), 1031 (1976).
- [13] D.K. Pickard. J. Applied Probability, **19** (2), 444 (1982).
- [14] Н.Л. Лаврик, В.П. Волошин. ЖФХ, **73** (4), 710 (1999).
- [15] F. Williams. Phys. Status Solidi, **25** (2), 493 (1968).
- [16] J. Mycielski. Phys. Rev., **123** (1), 99 (1961).
- [17] J. Monecke. Phys. Status Solidi B, **103** (2), K115 (1981).
- [18] И.А. Драбкин, Б.Я. Мойжес. ФТП, **15** (4), 625 (1981).
- [19] Г. Беге, Э. Солпитер. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М., ГИФМЛ, 1961).
- [20] Т.М. Лифшиц. ПТЭ, № 1, 10 (1993).
- [21] J. Monecke, W. Siegel, E. Ziegler, G. Kuhnel. Phys. Status Solidi B, **103** (1), 269 (1981).
- [22] В.Д. Каган. ФТТ, **42** (5), 805 (2000).
- [23] J. Bethin, T.G. Castner, N.K. Lee. Sol. St. Commun., **14** (12), 1321 (1974).
- [24] T.G. Castner, N.K. Lee, H.S. Tan, L. Moberly, O. Symko. J. Low Temp. Phys., **38** (3–4), 447 (1980).
- [25] D.E. Phelps, K.K. Bajaj. Phys. Rev. B, **26** (2), 912 (1982).
- [26] V.I. Shklovskii, A.L. Efros. *Electronic properties of doped semiconductors* (Berlin, Springer, 1984).
- [27] А.П. Мельников, Ю.А. Гурвич, Л.Н. Шестаков, Е.М. Гершензон. Письма ЖЭТФ, **71** (1), 28 (2000).
- [28] N.A. Poklonski, V.F. Stelmakh. Phys. Status Solidi B, **117** (1), 93 (1983).
- [29] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин, А.Г. Забродский. ФТТ, **42** (3), 432 (2000).
- [30] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин. ФТТ, **43** (12), 2126 (2001).
- [31] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин. ФТТ, **40** (10), 1805 (1998).
- [32] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло. ФТП, **33** (4), 402 (1999).
- [33] Е.М. Гершензон, Ю.А. Гурвич, А.П. Мельников, Л.Н. Шестаков. ФТП, **25** (1), 160 (1991).
- [34] J.A. Chroboczek, F.H. Pollak, H.F. Staunton. Phil. Mag. B, **50** (1), 113 (1984).
- [35] Ф.М. Исмагилова, Л.Б. Литвак-Горская, Г.Я. Луговая, И.Е. Трофимов. ФТП, **25** (2), 255 (1991).
- [36] S. Abboudy. Physica B, **212** (2), 175 (1995).
- [37] H. Fritzsche. Phys. Rev., **99** (2), 406 (1955).
- [38] Е.М. Гершензон, Ф.М. Исмагилова, Л.Б. Литвак-Горская, А.П. Мельников. ЖЭТФ, **100** (3(9)), 1029 (1991).
- [39] Е.М. Гершензон, Л.Б. Литвак-Горская, Г.Я. Луговая. ФТП, **15** (7), 1284 (1981).
- [40] Е.М. Гершензон, Л.Б. Литвак-Горская, Г.Я. Луговая, Е.З. Шапиро. ФТП, **20** (1), 99 (1986).
- [41] H. Fritzsche. Phys. Rev., **125** (5), 1552 (1962).
- [42] E.A. Davis, W.D. Compton. Phys. Rev., **140** (6A), A2183 (1965).
- [43] M. Kobayashi, Y. Sakaida, M. Taniguchi, Sh. Narita. J. Phys. Soc. Japan, **47** (1), 138 (1979).
- [44] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский. ФТТ, **46** (6), 1071 (2004).

Редактор Т.А. Полянская

A dipole model of the band gap narrowing between Hubbard bands in low compensated semiconductors

N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii*

Belorussian State University,
220050 Minsk, Belorussia

* Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The model of band gap narrowing between the Hubbard bands (A^0 and A^+ bands for acceptors and D^0 and D^- bands for donors) due to an increase of the concentration of doping hydrogenlike impurity in low compensated semiconductors is proposed. The width of the impurity bands is assumed to be small as compared to the band gap between them. It is taken into account, that the local Coulomb interaction of the ions of electric dipole formed due to transition of hole (electron) between two electrically neutral impurity atoms lowers the gap value. The calculated values of the thermal activation energy of hopping transition of holes (electrons) between impurity bands are in agreement with the experimental data on low compensated crystals p -Si:B, p -Ge:Ga, and n -Ge:Sb.