

Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 6 — 1969

УДК 537.311.33

А. З. БАЛУНИ, В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧ

ЛОКАЛЬНЫЕ УРОВНИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С УЗКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ

В двухзонном приближении метода эффективной массы вычислены локальные уровни, образуемые примесными центрами в полупроводниках с узкой запрещенной зоной.

Развитие метода эффективной массы и детальное исследование зонной структуры типичных полупроводников позволило решить задачу о мелких локальных уровнях [1—3], образуемых атомами примеси в полупроводниках. Эти уровни полностью определяются эффективным зарядом центра и структурой дна той энергетической зоны, вблизи которой они образуются (расстояния от других зон велики по сравнению с энергией ионизации). Количественно названные уровни описываются уравнением типа Шредингера с кулоновским потенциалом, и, вообще говоря, анизотропными эффективными массами, характерными для данной зоны.

Развитая в работе [1] теория обобщает обычный метод эффективной массы на случай, когда минимум энергии находится не в центре зоны Бриллюэна, а также на случай вырожденных зон. В последнем случае обычное уравнение метода эффективной массы заменяется системой дифференциальных уравнений.

Для теоретического описания примесных уровней в полупроводниках с узкой запрещенной зоной ($0,1—0,3$ эв) нельзя считать их принадлежащими какой-либо одной из зон—валентной или проводимости. Здесь, как и в случае глубоких уровней, нужно рассматривать обе зоны совместно. Иначе говоря, мы имеем «почти вырожденные» зоны, которые надлежит рассматривать методами, развитыми в работах [1—3].

В настоящей работе, исходя из системы уравнений, полученной в работе [4], в двухзонном приближении решена задача о локальных уровнях в полупроводниках с узкой запрещенной зоной (к числу их относятся, например $PbTe$, $PbSe$, $HgTe$ и т. д.). Задача такого типа рассматривалась также в работе [5]. Там, однако, не учитывалось влияние более высоких зон. Видимо, оно не существенно, если отличен от нуля матричный элемент импульса p_{cv} , связывающий надлежащие экстремумы зоны проводимости и валентной зоны. Если, однако, $p_{cv} = 0$, то учет высших зон становится принципиальным.

Обозначим через $W_1(k)$ и $W_2(k)$ функции, описывающие законы дисперсии в зонах проводимости и валентной (первой и второй), трактуемых как невырожденные, и совместим начало отсчета энергии с дном первой зоны. Будем считать, что ширина запрещенной зоны Δ значительно меньше расстояний E_l от существенных экстремумов данных зон до всех остальных зон ($E_l \approx 1-10$ эв).

В работе [4] получена следующая система уравнений, описывающих состояния и спектр носителей в двухзонном приближении

$$\begin{aligned} \{W_1(k) - E + u\} \psi_1 + d_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta \psi_2 &= 0, \\ \{W_2(k) - E + u\} \psi_2 + d_{\alpha\beta}^* k_\alpha k_\beta \psi_1 &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь E — собственные значения энергии, тензор $d_{\alpha\beta}$ описывает взаимодействие между зонами и дается формулой

$$d_{\alpha\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_l \rho_{l1}^\alpha \rho_{l2}^\beta \left(\frac{1}{E_l} + \frac{1}{E_l + \Delta} \right), \quad (2)$$

где l — индекс, нумерующий все зоны, кроме первой и второй, E_l — значение энергии на дне l -той зоны; ρ_{l1}^α , ρ_{l2}^β — матричные элементы операторов α -го, β -го компонентов импульса для переходов между соответствующими зонами, u — дополнительное поле примеси, действующее на электрон (помимо периодического потенциала идеального кристалла),

$$W_1(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}, \quad W_2(k) = -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2}, \quad (3)$$

m_1 , m_2 — экспериментально измеряемые эффективные массы.

В кубическом кристалле в пренебрежении экранированием свободными носителями заряда имеем $u = -\frac{ze^2}{\epsilon r}$.

В настоящее время нет сколько-нибудь надежных сведений о компонентах тензора $d_{\alpha\beta}$. Для ориентировки примем простейшую аппроксимацию

$$d_{\alpha\beta} = b\delta_{\alpha\beta}. \quad (4)$$

В системе уравнений (1) перейдем от k к r -представлению, рассмотрим сферически-симметричные решения и введем безразмерные величины

$$\begin{aligned} \frac{m_1 \rho_0^2 E}{\hbar^2} &= -a_1, \quad a_1 > 0, \quad \frac{m_1}{m_0} = \alpha_1, \quad \frac{2m_1 b}{\hbar^2} = b_1, \\ \frac{m_2 \rho_0^2 (E + \Delta)}{\hbar^2} &= a_2, \quad a_2 > 0, \quad \frac{m_2}{m_0} = \alpha_2, \\ \frac{2m_2 b}{\hbar^2} &= b_2, \quad \rho_0 = \frac{\epsilon \hbar^2}{m_0 z c^2}, \quad \rho = \frac{r}{\rho_0}, \quad \Phi_{1,2} = r\psi_{1,2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \Phi_1'' + 2 \left(-a_1 + \frac{\alpha_1}{\rho} \right) \Phi_1 + b_1 \Phi_2'' &= 0, \\ \Phi_2'' + 2 \left(-a_2 - \frac{\alpha_2}{\rho} \right) \Phi_2 - b_2 \Phi_1'' &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Система уравнений (6) решается стандартным путем. Ее решение будем искать в виде

$$\begin{aligned}\varphi_1 &= e^{-q\rho} \sum_{\nu=0}^{\infty} f_{\nu} \rho^{\nu}, \\ \varphi_2 &= e^{-q\rho} \sum_{\nu=0}^{\infty} g_{\nu} \rho^{\nu},\end{aligned}\quad (7)$$

где f_{ν} и g_{ν} — некоторые коэффициенты. Тогда для определения дискретных значений энергии, отвечающих локальным уровням, получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned}(q^2 - 2a_1)(q^2 - 2a_2) + q^4 \gamma^2 &= 0, \\ (q^2 - 2a_2)(qn - \alpha_1) + (q^2 - 2a_1)(qn + \alpha_2) + 2q^3 \gamma^2 n &= 0.\end{aligned}\quad (8)$$

Здесь n — целое число,

$$\gamma^2 = \alpha_1 \alpha_2 \left| \sum_{l=1,2} \frac{p_{1l}^{\alpha} p_{l2}^{\alpha}}{m_0} \left(\frac{1}{E_l} + \frac{1}{E_l + \Delta} \right) \right|^2. \quad (9)$$

Общее решение системы (8) очень громоздко. Рассмотрим два предельных случая.

1. Влияние других зон мало ($\gamma^2 \ll 1$). Ограничиваясь рассмотрением только основного уровня ($n=1$), находим

$$E = E_0 \left[1 + 3 |E_0| \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \frac{\gamma^2}{\Delta} \right]. \quad (10)$$

Здесь E_0 есть значение энергии, получающееся в пренебрежении взаимодействием между зонами («водородная модель»)

$$E_0 = - \frac{z^2 m_1 e^4}{2 \varepsilon^2 \hbar^2}. \quad (11)$$

При учете взаимодействия между зонами энергия ионизации возрастает по закону $1/\Delta$.

2. $\gamma^2 \sim 1$. Легко проверить, что всегда $qn > \alpha_1$. Принимая во внимание это обстоятельство, получаем

$$E = - \Delta \frac{(\alpha_2 + \alpha_2) \alpha_2 + 2\alpha_1 \alpha_2 \gamma^2 \pm 2\alpha_1 \alpha_2 \gamma \sqrt{1 + \gamma^2}}{(\alpha_1 + \alpha_2)^2 + 4\alpha_1 \alpha_2 \gamma^2}. \quad (12)$$

В этом случае за счет сильного взаимодействия между зонами спектр локальных состояний изменяется не только количественно, но и качественно: вместо одного уровня появляются два. Можно убедиться, что этот факт не связан со сделанными ранее аппроксимациями типа (4), а составляет характерную черту узкозонных полупроводников.

ЛИТЕРАТУРА

1. Luttinger J. M., Kohn W. Phys. Rev., 97, 869, 1955.
2. Kittel C., Mitchell M. Phys. Rev. 96, 1488, 1954.
3. Дейген М. Ф., Пекар С. Тр. ин-та физ. АН УССР, вып. 7, 1956, стр. 108.
4. Бонч-Бруевич В. Л. «Физика твердого тела», 1965. (Итоги науки, Ин-т научной информации АН СССР.)
5. Келдыш Л. В. ЖЭТФ, 45, 315, 1963.

Поступила в редакцию
17.2 1969 г.

Кафедра
полупроводников