

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И МЕЖЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В СИЛЬНО ЛЕГИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А. Л. Эфрос

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	451
2. Плотность состояний вблизи дна зоны	453
а) Квазиклассическое приближение (453). б) Область применимости квази-классического приближения (457).	
3. Глубокий хвост плотности состояний	458
а) Метод оптимальной флуктуации (458). б) Приближение равномерно заряженного шара. Спектр основных носителей (460). в) Точное распределение примесей в оптимальных флуктуациях (465). 1) Вывод основных уравнений (465). 2) Вывод формулы (3.12) (466). 3) Асимптотика плотности состояний в отсутствие корреляции примесей (467). г) Спектр неосновных носителей (470). 1) Классический случай ($\gamma > E_s$) (470). 2) Квантовый случай ($\gamma < E_s$) (471). д) Асимптотика плотности состояний с учетом корреляции в распределении примесей (472).	
4. Межзонное поглощение света	473
а) О связи между коэффициентом межзонного поглощения света и плотностью состояний (473). б) Поглощение света за счет гауссовых флуктуаций в отсутствие вырождения носителей (475). в) Обсуждение экспериментальных данных (479).	
Цитированная литература	482

1. ВВЕДЕНИЕ

Современная полупроводниковая электроника широко использует сильно легированные полупроводники (СЛП), электронные свойства которых существенно отличаются от свойств чистых полупроводников, описанных в большом количестве монографий и учебников.

Серьезное изучение СЛП началось около десяти лет назад. Оно было стимулировано изобретением ряда приборов, в которых важную роль играют электронные состояния, возникающие в запрещенной зоне под действием примесей. С тех пор появилось очень большое количество оригинальных работ на эту тему и к настоящему времени вопросы теории плотности состояний и межзонного поглощения света приобрели некоторую законченность. Разработаны методы расчета и получены результаты, применимые при различных сильных неравенствах между параметрами полупроводника. К сожалению, при анализе экспериментальных данных чаще всего встречаются промежуточные случаи, поэтому ожидать численного совпадения теории с экспериментом пока не приходится. Однако анализ предельных случаев позволяет добиться физического понимания явлений, которое, разумеется, не исчезает в промежуточных случаях и позволяет составить о них качественное представление. Дальнейшее развитие теории в этой области, вероятно, главным образом пойдет по пути разработки численных методов расчета. Ясно, что аналитические результаты, полученные в предельных случаях, будут играть при этом очень важную роль.

Сложность освоения оригинальных работ заключается в том, что разные авторы используют различные приближения, не всегда четко оговаривая пределы их применимости. Поэтому требуются значительные усилия, чтобы сопоставить результаты между собой. Это часто приводит к путанице при обработке экспериментальных данных. Число обзорных работ на эту тему крайне мало (см. обзор ¹ и небольшие фрагменты обзоров ^{2, 3}, посвященные СЛП). Поэтому нам показалось целесообразным изложить современные представления о свойствах электронных состояний в СЛП с единой точки зрения.

Рассмотрим полупроводник, легированный мелкими примесями (для определенности — донорами). Электронные состояния на таких примесях можно изучать в рамках метода эффективной массы. Будем для простоты считать спектр носителей тока изотропным и квадратичным. Тогда состояния, локализованные вблизи одной изолированной примеси, оказываются водородоподобными. Энергия E_0 и радиус a основного состояния выражаются обычным образом

$$E_0 = \frac{me^4}{2\kappa^2\hbar^2}, \quad a = \frac{\hbar^2\kappa}{me^2} \quad (1.1)$$

через эффективную массу электрона m и диэлектрическую проницаемость κ (e — абсолютная величина заряда электрона).

Постараемся выяснить теперь, как устроены электронные состояния при низкой температуре, если весь объем полупроводника заполнен хаотически расположенными донорами с концентрацией N . Очевидно, что если концентрация N достаточно мала, то электроны находятся в основных водородоподобных состояниях, локализованных вблизи отдельных доноров, а концентрация электронов в зоне проводимости убывает с температурой как $\exp(-E_0/T)$, где T — температура в энергетической шкале. Очевидно также, что концентрация примесей должна быть настолько малой, чтобы волновые функции электронов, находящихся на соседних донорах, перекрывались очень слабо, т. е. необходимо условие $Na^3 \ll 1$, которое мы назовем условием слабого легирования. При этом условии разброс уровней электронов, находящихся на примесях, мал по сравнению с энергией E_0 (примесная зона узкая). С ростом концентрации примесная зона расширяется и, наконец, сливается с дном зоны проводимости.

В случае $Na^3 \gg 1$, который принято называть случаем сильного легирования и которому посвящен наш обзор, картина электронных состояний совершенно иная. Ясно, что состояний, локализованных вблизи отдельных доноров, не существует. Электроны проводимости, появившиеся в полупроводнике вместе с донорами, образуют ферми-газ. Энергия Ферми растет с концентрацией примесей быстрее, чем энергии взаимодействия электронов друг с другом и с примесями. Поэтому при $Na^3 \gg 1$ кинетическая энергия подавляющего большинства электронов велика по сравнению с потенциальной. Таким образом, в слабо компенсированном СЛП электроны образуют почти идеальный ферми-газ. Проводимость электронов при низких температурах имеет металлический характер (не зависит от температуры).

Боровский радиус a в полупроводниках может быть очень большим. Так, в n -InSb радиус $a \approx 600 \text{ \AA}$, т. е. условие сильного легирования выполняется уже при $N \approx 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Практически такие соединения, как n -InSb, n -InAs, при современных способах очистки очень трудно получить слабо легированными. (Образцы с малой концентрацией электронов обычно оказываются компенсированными.)

Важнейшей задачей теории СЛП является описание электронных состояний, энергии которых располагаются в области, являющейся для

чистого полупроводника запрещенной зоной. Электроны, находящиеся в таких состояниях, ответственны за работу целого ряда современных полупроводниковых приборов: лазеров, различных спонтанных излучателей, туннельных диодов. Уровни в запрещенной зоне возникают вследствие флуктуаций концентрации заряженных примесей и называются флуктуационными уровнями. Фактически это задача о спектре неупорядоченной системы, однако в случае СЛП она обладает следующими специфическими чертами:

1) Потенциал примесей является кулоновским, т. е. дальнедействующим.

2) Радиус экранирования потенциала, определяемый, как правило, электронами, больше среднего расстояния между примесями. Это обстоятельство не позволяет применять к СЛП модели, рассматриваемые в теории неупорядоченных систем (см., например, обзор И. М. Лифшица ⁴), в которых потенциал считается короткодействующим.

3) Из условия $Na^3 \gg 1$ следует, что одна кулоновская потенциальная яма, обрезанная на среднем расстоянии между примесями, вообще не содержит связанного состояния. Электронные состояния в запрещенной зоне образуются за счет флуктуаций, включающих большое число заряженных примесей. Чем глубже состояние, тем меньше вероятность его образования. Поэтому в СЛП плотность состояний монотонно убывает вглубь запрещенной зоны.

4) Характерные энергии, которые определяют спад плотности состояний, гораздо меньше ширины запрещенной зоны. Поэтому теория может быть построена в рамках метода эффективной массы.

Наш обзор состоит из трех частей. Гл. 2 посвящена изложению метода «искривленных зон», который позволяет описывать электронные состояния, находящиеся вблизи невозмущенного дна зоны проводимости. (Под невозмущенным дном зоны проводимости мы понимаем энергию, которая соответствует дну зоны в отсутствие примесей.) Этот метод, однако, не применим для описания состояний, энергия которых ниже дна невозмущенной зоны на величину, существенно большую, чем среднеквадратичная флуктуация дна зоны. В этой области энергий плотность состояний убывает вглубь запрещенной зоны экспоненциально, как $e^{-\Omega(\epsilon)}$, причем $\Omega(\epsilon) \gg 1$. В гл. 3 излагается метод оптимальной флуктуации, позволяющий найти показатель экспоненты, описывающей хвост плотности состояний. С помощью этого метода рассмотрены наиболее интересные, с точки зрения СЛП, случаи.

Наконец, в гл. 4 метод оптимальной флуктуации применяется для нахождения закона спада коэффициента межзонного поглощения света на частотах, меньших, чем ширина запрещенной зоны. В конце этой главы анализируются экспериментальные данные по поглощению света.

2. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ВЕЛИЗИ ДНА ЗОНЫ

а) К в а з и к л а с с и ч е с к о е п р и б л и ж е н и е. В 1962 г. на Международной конференции по физике полупроводников в Экзетере независимо Бонч-Бруевичем, Кейном и Келдышем была высказана мысль о том, что для описания плотности состояний сильно легированного полупроводника можно пользоваться квазиклассическими представлениями.

Если потенциал, созданный флуктуацией концентрации примесей, мал по сравнению с потенциалом Ферми, то экранирование таких флуктуаций можно рассматривать в дебаевском приближении. В этом приближении уравнение Пуассона линеаризовано и каждый заряженный центр экранируется независимо от остальных центров. Поэтому можно считать,

что потенциал, создаваемый всеми центрами, равен сумме потенциалов отдельных центров, экранированных дебаевским образом.

Пусть V — потенциальная энергия пробного электрона в поле примесей. Тогда

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad \varphi(r) = -\frac{e^2}{\kappa r} e^{-r/r_s}, \quad (2.1)$$

где

$$r_s = \frac{a}{2} \left(\frac{\pi}{3} \right)^{1/6} \frac{1}{(na^3)^{1/6}} \quad (2.2)$$

— радиус экранирования, \mathbf{r}_j — радиус-вектор примесного центра и суммирование ведется по всем \mathcal{N} центрам, имеющимся в кристалле. Чтобы не загромождать формулы лишними знаками сумм, мы считаем, что имеются только притягивающие примеси (доноры) с концентрацией N (компенсация отсутствует). Тогда из условия нейтральности концентрация электронов $n = N$. Как будет указано ниже, при не очень больших степенях компенсации обобщение результатов делается очень просто.

Будем считать, что электроны классические и «чувствуют» только потенциал той точки, в которой они находятся. Это значит, что мы должны вычислять плотность состояний по обычной формуле для свободных электронов⁵, однако считать, что кинетическая энергия K в некоторой точке \mathbf{r} равна $\varepsilon - V(\mathbf{r})$, где ε — полная энергия, т. е. K отсчитывается от возмущенного флуктуационным потенциалом дна зоны проводимости. (По этой причине указанную процедуру иногда называют методом «искривленных зон».) При этом для плотности состояний получим

$$\rho_{\text{кл}}(\varepsilon) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3 V_0} \int V_{\varepsilon - V(\mathbf{r})} d^3r, \quad (2.3)$$

где интеграл берется по всему объему кристалла, равному V_0 , а в точках, где $V(\mathbf{r}) > \varepsilon$, подынтегральное выражение следует считать нулем. Заменив интегрирование по объему усреднением по всем конфигурациям примесей, получим

$$\rho_{\text{кл}}(\varepsilon) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{\varepsilon} dV [V_{\varepsilon - V} F(V)], \quad (2.4)$$

где $F(V)$ — функция распределения потенциальной энергии. По определению, имеем

$$F(V) = \int \frac{d^3r_1}{V_0} \int \frac{d^3r_2}{V_0} \dots \int \frac{d^3r}{V_0} \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \delta\left(V - \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)\right). \quad (2.5)$$

Вычислим $F(V)$ с помощью метода Маркова (см. ⁶). Для этого подставим в (2.5) тождество

$$\delta\left(V - \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)\right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(V - \sum_j \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j))}. \quad (2.6)$$

Тогда получим

$$F(V) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iVt} P(t), \quad (2.7)$$

где

$$P(t) = \left[\int \frac{d^3r}{V_0} e^{-i\varphi(r)t} \right]^{\mathcal{N}} = \left[1 + \frac{f(t)}{V_0} \right]^{\mathcal{N}}, \quad (2.8)$$

а

$$f(t) = \int d^3r (e^{-i\varphi(r)t} - 1). \quad (2.9)$$

Переходя в (2.8) к пределу $\mathcal{N} \rightarrow \infty$, $V_0 \rightarrow \infty$, $\mathcal{N}/V_0 \rightarrow N$, получим окончательно

$$F(V) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iVt + Nf(t)}. \quad (2.10)$$

Предполагая t малым, разложим теперь экспоненту в (2.9). Тогда получим

$$Nf(t) = i\Gamma t - (\gamma^2 t^2/4), \quad (2.11)$$

где

$$\Gamma = -N \int \varphi(r) d^3r = 4\pi (e^2/\kappa r_s) N r_s^3 \quad (2.12)$$

и

$$\gamma^2 = 2N \int \varphi^2(r) d^3r = 4\pi (e^4/\kappa^2 r_s^2) N r_s^3. \quad (2.13)$$

Первый член (2.11) описывает сдвиг дна зоны за счет среднего потенциала заряженных примесей. Этот член точно компенсируется потенциалом электронов, и в дальнейших выкладках мы не будем его учитывать. Подставляя второй член (2.11) в (2.10), получим гауссово распределение

$$F(V) = \frac{1}{\sqrt{\pi \gamma}} e^{-V^2/\gamma^2}. \quad (2.14)$$

Физический смысл среднеквадратичного потенциала γ очень прост. Среднеквадратичная флуктуация числа примесей в объеме r_s^3 порядка $(N r_s^3)^{1/2}$, а потенциальная энергия электрона в поле такой флуктуации $(e^2/\kappa r_s) (N r_s^3)^{1/2} \approx \gamma$.

Легко показать, что сделанное нами разложение в (2.9) справедливо, если

$$N r_s^3 \gg 1 \quad \text{и} \quad V \ll (e^2/\kappa r_s) N r_s^3. \quad (2.15)$$

Смысл этих неравенств совершенно очевиден. Так как основной вклад в $F(V)$ дают флуктуации с размером r_s , из первого неравенства следует, что среднее число частиц во флуктуации должно быть большим. Представив V в виде $V = (e^2/\kappa r_s) \Delta \mathcal{N}$, где $\Delta \mathcal{N}$ — избыточное число частиц во флуктуации, мы увидим, что второе условие означает $\Delta \mathcal{N} \ll N r_s^3$, т. е. избыточное число частиц должно быть гораздо меньше среднего. Таким образом, неравенства (2.15) представляют собой обычные условия применимости гауссовой статистики к флуктуациям размера r_s .

Подставив (2.14) в (2.4), мы получим основной результат Кейна⁷ и Келдыша⁸:

$$\rho_{\text{кп}} = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^{5/2} \hbar^3 \gamma} \int_{-\infty}^{\varepsilon} \sqrt{\varepsilon - V} e^{-V^2/\gamma^2} dV. \quad (2.16)$$

При $\varepsilon > 0$ и $\varepsilon \gg \gamma$

$$\rho_{\text{кл}} = \rho_0 - \frac{(2m)^{3/2} \gamma^2}{32\pi^2 \hbar^3 \varepsilon^{3/2}}, \quad (2.17)$$

где

$$\rho_0 = \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}}{2\pi^2 \hbar^3},$$

откуда видно, что в этом случае $\rho_{\text{кл}}$ близка к плотности состояний свободных электронов ρ_0 . При $\varepsilon < 0$ и $|\varepsilon| \gg \gamma$

$$\rho_{\text{кл}}(\varepsilon) = \frac{m^{3/2} \gamma^{1/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{\gamma}{\varepsilon}\right)^{3/2} e^{-\varepsilon^2/\gamma^2}. \quad (2.18)$$

Таким образом, плотность состояний экспоненциально убывает вглубь запрещенной зоны. Интеграл (2.16) протабулирован в ^{7, 9}. Соответствующий график представлен на рис. 1.

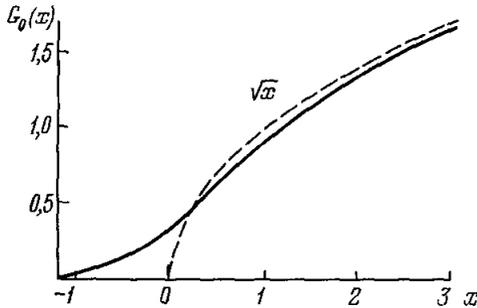


Рис. 1. Квазиклассическая плотность состояний.

Сплошная кривая — график функции $G_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-y^2} (x-y)^{1/2} dy$. Согласно (2.16)

$$\rho_{\text{кл}}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2} \gamma^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} G_0\left(\frac{\varepsilon}{\gamma}\right).$$

Легко убедиться, что при $Na^3 \gg 1$ энергия Ферми $\mu_0 = (3\pi^2)^{2/3} (\hbar^2/2m) N^{2/3}$ гораздо больше γ , т. е. уровень Ферми находится в области энергий, в которой плотность состояний близка к ρ_0 . Это обстоятельство и позволяет считать экранирование флуктуаций дебаевским.

Измерение порога Мосса — Бурштейна, а также другие эксперименты свидетельствуют о том, что энергия Ферми в СЛП несколько меньше μ_0 . Это связано с неидеальностью электронного газа. Пусть $\mu = \mu_0 - \mu_{ee} - \mu_{ei}$, где μ_{ee} и μ_{ei} — поправки за счет взаимодействия электронов друг с другом и с примесями. Основная поправка связана с обменным взаимодействием электронов. Согласно ¹⁰

$$\mu_{ee} = \frac{e^2}{\pi} \frac{\sqrt{2m\mu_0}}{\hbar}. \quad (2.19)$$

Поправка μ_{ei} может быть получена с помощью (2.16):

$$\mu_{ei} = \frac{1}{8} \frac{\gamma^2}{\mu_0}. \quad (2.20)$$

Она описывает опускание уровня Ферми за счет хвоста плотности состояний.

Обобщение полученных результатов на случай компенсированного полупроводника не представляет особого труда ⁹, если по-прежнему считать, что применимо одноэлектронное приближение и примеси экранируются дебаевским образом. Помимо положительных доноров в этом случае имеются еще отрицательные акцепторы с концентрацией N_A и концентрация электронов $n = N - N_A$. Очевидное обобщение состоит в том, что в среднеквадратичный потенциал γ (2.13) следует подставлять вместо N суммарную концентрацию заряженных центров $N + N_A$. Так как $N < N + N_A < 2N$, то в оценках мы можем игнорировать это обстоятельство. Гораздо важнее, что в радиус экранирования r_s (2.2) и энергию

Ферми μ_0 вместо N следует подставлять концентрацию электронов n , которая может быть гораздо меньше N . С уменьшением n радиус экранирования r_s и характерная величина потенциальной энергии γ возрастают, а энергия Ферми μ_0 уменьшается. Очевидно, что дебаевское приближение применимо, если

$$\alpha \equiv \gamma \mu_0 \approx (N/n)^{3/2} / (Na^3)^{-1/4} \ll 1. \quad (2.21)$$

Это условие ограничивает применимость изложенной выше теории к сильно компенсированным полупроводникам. Случай $\alpha > 1$ рассмотрен в работе ¹¹, однако его изложение выходит за рамки нашего обзора.

б) Область применимости квазиклассического приближения. На первый взгляд может показаться, что формулу (2.4) и поправки к ней можно получить с помощью разложения по постоянной Планка \hbar , считая потенциал примесей плавным. Такое разложение для статистической суммы описано в учебнике Ландау и Лифшица ¹². Формула (2.4), действительно, получается в нулевом приближении (она является чисто классической), причем $F(V)$ не обязательно выражается формулой (2.14). Однако можно показать ¹³, что отношение поправочного члена разложения, учитывающего градиенты потенциала, к нулевому вблизи дна зоны оказывается порядка a/r_s . Этот результат легко понять. Рассматриваемый потенциал (2.1) является суперпозицией экранированных кулоновских ям. Условие $a/r_s \ll 1$ означает, что каждая такая яма содержит много связанных состояний. При таком условии и справедливо указанное выше разложение. Однако из условий $Na^3 \gg 1$ и $\alpha \ll 1$ (2.21) следует, что $a/r_s \gg 1$. Таким образом, разложение по производным потенциала в случае СЛП неприменимо.

Строгий вывод формулы (2.16) для СЛП был впервые сделан Келдышем ⁸ с помощью диаграммной техники. Этот вывод не является разложением по \hbar и опирается на ультраквантовое свойство — отсутствие уровня в сильно экранированной кулоновской яме. Затем в ¹⁴ была построена специальная диаграммная техника, в которой крупномасштабные флуктуации примесного потенциала учтены во всех порядках теории возмущений, но квазиклассическим образом, а мелкомасштабные флуктуации учтены квантовомеханически, но по теории возмущений. В отличие от обычной теории возмущений, применимой только при $\varepsilon \gg \gamma$, модифицированная теория применима при всех положительных и не очень больших отрицательных энергиях. Функция Грина, полученная в нулевом приближении этой теории, приводит к формуле (2.16), а следующие приближения дают поправки к ней. С помощью такой теории легко найти параметр разложения и область применимости (2.16). Мы изложим здесь лишь качественные рассуждения, приводящие к результатам ¹⁴.

Как видно из (2.13), главный вклад в среднеквадратичный потенциал γ дают флуктуации масштаба r_s . Типичные потенциальные ямы имеют размер r_s и глубину γ . Энергия основного состояния в яме выше дна ямы на величину порядка $E_s = \hbar^2 m r_s^{-2}$. Подавляющее большинство состояний в таком потенциале может описываться квазиклассически, если $\gamma \gg E_s$. Это и есть основное условие применимости изложенной теории. Как показано в ¹⁴, разложение, приводящее к (2.16), ведется по отношению

$$\left(\frac{E_s}{\gamma} \right)^{1/2} = \frac{1}{(Na^3)^{1/24}} \left(\frac{n}{N} \right)^{5/24}. \quad (2.22)$$

Этот параметр, конечно, очень плох. (Отношение n/N согласно (2.21) не может быть очень малым.) Тем не менее разложение по нему представляется нам единственно возможным аналитическим подходом к проблеме

плотности состояний вблизи дна зоны, позволяющим, во всяком случае, понять физическую природу электронных состояний. В этом и состоит основное значение метода искривленных зон.

Однако условие $(E_s/\gamma)^{1/2} \ll 1$ не является достаточным, если речь идет об области $\varepsilon < 0$, $|\varepsilon| \gg \gamma$, где плотность состояний экспоненциально мала. В этой области основной вклад в $\rho(\varepsilon)$ дают ямы с глубиной V , очень близкой к ε . Действительно, в интеграле (2.16) в этом случае существенны

$$\varepsilon - V \approx \gamma^2/|\varepsilon|. \quad (2.23)$$

Таким образом, кинетическая энергия рассматриваемых состояний $K = \varepsilon - V$ убывает с ростом $|\varepsilon|$.

Вспомним теперь о мелкомасштабных флуктуациях. При заданной кинетической энергии K флуктуации, имеющие масштаб больший, чем длина волны \hbar/\sqrt{mK} , могут рассматриваться классически. Флуктуации меньшего масштаба усредняются на длине волны электрона. Сдвиг уровня электрона, к которому приводит мелкомасштабные флуктуации, можно оценить, вычислив среднеквадратичный потенциал этих флуктуаций. Введем величину $\gamma(R)$, определив ее как среднеквадратичный потенциал $\langle V^2 \rangle^{1/2}$, а потенциал каждой отдельной ямы $\varphi(r)$ ($V = \sum_j \varphi(r - r_j)$) будем считать обрезанным на расстоянии $R \ll r_s$. Тогда

$$\gamma^2(R) = 2N \int_{|r| < R} \varphi^2(r) d^3r \approx \frac{e^4 NR}{\kappa^2}. \quad (2.24)$$

Сдвиг энергии электрона, имеющего кинетическую энергию K за счет неклассических флуктуаций, можно оценить, подставив в (2.24) вместо R длину волны \hbar/\sqrt{mK} . Полученная таким образом величина γ_K растет с уменьшением K . Введем энергию K_c , определив ее равенством

$$K_c = \gamma_{K_c} \quad \text{или} \quad K_c = E_0 (Na^3)^{2/5}. \quad (2.25)$$

Для электронов, имеющих кинетическую энергию $K \gg K_c$, потенциал $V(r)$ может считаться классическим, ибо сдвиг энергии, происходящий из-за мелкомасштабных флуктуаций γ_K , которые нельзя учитывать классически, мал по сравнению с K . Так как $K_c > E_s$, минимальное значение кинетической энергии, при которой применимо квазиклассическое описание, есть K_c . Подставляя в левую часть (2.23) вместо $\varepsilon - V$ величину K_c , найдем энергию $\varepsilon_0 = \gamma^2/K_c$, ниже которой формула (2.16) неприменима. Согласно (2.18) при $\varepsilon < 0$, $|\varepsilon| \gg \gamma$ имеем $\rho(\varepsilon) \sim \exp(-\varepsilon^2/\gamma^2)$. Так как $\varepsilon_0/\gamma = (Na^3)^{1/5} (N/n)^{1/12} \approx 1$, условие $\varepsilon > \varepsilon_0$ практически означает, что в области, где плотность состояний экспоненциально мала, квазиклассический подход неприменим, и для описания этой области нужны новые идеи и методы. Этому и посвящена следующая глава нашего обзора.

3. ГЛУБОКИЙ ХВОСТ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

а) Метод оптимальной флуктуации. В работах Гальперина и Лакса^{15, 16}, Зиттарца и Ланджера¹⁷ и И. М. Лифшица¹⁸ был предложен изящный метод определения закона экспоненциального спада плотности состояний в области хвоста, который мы будем называть методом оптимальной флуктуации. Суть его сводится к следующему. Допустим, что радиус волновой функции флуктуационного уровня больше, чем среднее расстояние между примесями во флуктуации. (В СЛП это всегда так, поскольку $r_s < a$ и один примесный центр вообще не создает связанного состояния.) Тогда квантовомеханическое усреднение сглажи-

вае дискретность заряда отдельных примесей и флуктуацию можно характеризовать плавной функцией координат $f(\mathbf{r})$, представляющей отклонение примесной концентрации от среднего значения. Для нахождения плотности состояний $\rho(\varepsilon)$ необходимо просуммировать вклады от всех конфигураций примесей, т. е. от всех потенциальных ям, которые создают электронный уровень с заданной энергией ε . В интересующей нас области энергий все эти вероятности экспоненциально малы и указанная сумма определяется вкладом наиболее вероятных конфигураций. Представим вероятность флуктуации $f(\mathbf{r})$ в виде $\exp(-\Omega \{f\})$. Если среди всех флуктуаций, создающих уровень ε , мы найдем самую вероятную флуктуацию \tilde{f}_ε , то можно утверждать, что плотность состояний спадает с ε по закону $\exp(-\Omega \{\tilde{f}_\varepsilon\})$. При определении \tilde{f}_ε достаточно рассматривать лишь такие флуктуации, в которых уровень с энергией ε является наименьшим, так как вероятность флуктуации, в которой этот уровень является возбужденным состоянием, безусловно, меньше.

Метод оптимальной флуктуации в том виде, в каком мы его изложили, не позволяет найти предэкспоненциальный множитель в выражении для плотности состояний, однако позволяет определить главный член в показателе экспоненты, т. е. $\ln[\rho(\varepsilon)/\rho(0)]$. Практически именно эта величина и измеряется в эксперименте.

Разумеется, задача о вычислении предэкспоненциального множителя оказывается гораздо сложнее. При этом, как и в обычном методе перевала, необходимо учитывать состояния, близкие к экстремальному. Кроме того, нужно учитывать трансляционную инвариантность, т. е. тот факт, что локализованное состояние может возникнуть в любой точке координатного пространства.

Приближенный метод вычисления предэкспоненты был предложен Гальпериним и Лэксом¹⁵. Авторы предположили, что волновые функции всех состояний, имеющих заданную энергию и возникающих на флуктуациях, близких к экстремальной, совпадают с экстремальной волновой функцией. Естественно было сравнить полученный ими результат для одномерного «белого шума» с асимптотикой точного решения, существующего в этом случае. Обнаружилось различие предэкспоненциальных множителей в $1/\sqrt{5}$ раз. Во второй работе¹⁶ авторы предложили способ отыскания поправок к сделанному приближению, позволяющий значительно уменьшить указанное расхождение.

Одновременно с первой работой Гальперина и Лэкса появилась работа Зиттарца и Ланджера¹⁷, также посвященная отысканию асимптотики плотности состояний в экспоненциально маловероятной области. В этой работе рассмотрен потенциал типа белого шума (в случаях одного, двух и трех измерений). Получен точный результат, отличающийся от результата Гальперина и Лэкса числом в предэкспоненциальном множителе. Само это число может быть найдено только в одномерном случае, и здесь результат Зиттарца и Ланджера совпадает с асимптотикой точного решения. В трехмерном случае для отыскания этого числа предложена весьма сложная процедура.

В работе И. М. Лифшица¹⁸ рассматривается случай, когда потенциалы примесных центров перекрываются слабо (радиус действия порядка минимального расстояния между центрами). Это позволяет сделать очень важное математическое упрощение — считать, что потенциал локально связан с концентрацией $f(\mathbf{r})$. В СЛП, однако, как правило, этого делать нельзя, так как радиус экранирования больше среднего расстояния между примесями. Поэтому, как мы увидим ниже, плотность состояний в СЛП существенно отличается от полученной И. М. Лифшицем, хотя идея

«экстремальной флуктуации» оказывается весьма плодотворной и в этом случае.

Работа Гальперина и Лэкса сделана непосредственно для полупроводников. В ней, однако, рассмотрен только случай гауссовой статистики и потому результаты применимы к не очень глубоким флуктуационным уровням.

В работах Шкловского и автора^{19, 20} рассмотрена область, где гауссова статистика неприменима. Кроме того, в¹⁹ разработан простой метод приближенного определения оптимальной флуктуации и плотности состояний. В этом методе считается, что флуктуации имеют вид равномерно заряженных шаров. Шар характеризуется двумя параметрами — радиусом R и полным избыточным зарядом eZ . Один из этих параметров выбирается так, чтобы энергия основного состояния электрона в потенциале, создаваемом такой флуктуацией, равнялась заданному значению ϵ , а второй параметр варьируется, и находится оптимальная среди таких флуктуаций. Легко понять, что при таком расчете мы теряем лишь численные коэффициенты, зависящие от истинной формы оптимальной флуктуации. Простота метода позволяет легко проанализировать возможные случаи и составить их классификацию¹⁹. Этот метод изложен в следующем разделе, б), и с его помощью исследован спектр основных носителей в СЛП. В разделе в) найдено точное распределение примесей в оптимальной флуктуации и численные коэффициенты, опущенные в разделе б). В разделе г) рассмотрен спектр неосновных носителей. Распределение примесей в разделах б) — г) предполагается некоррелированным. В разделе д) показано, что корреляция, связанная с отталкиванием заряженных примесей, возникающая в процессе приготовления образца, существенно влияет на асимптотику плотности состояний по энергии.

б) **П р и б л и ж е н и е** **р а в н о м е р н о** **з а р я ж е н н о г о** **ш а р а**. Спектр основных носителей. Флуктуационные уровни в запрещенной зоне могут возникнуть вследствие скопления притягивающих примесей либо вследствие разрежения отталкивающих. Для начала мы примем во внимание только притягивающие примеси. Предположим, что флуктуации представляют собой однородные сферические скопления примесей радиуса R . Предположим также, что распределение примесей случайно. Тогда вероятность того, что k примесей попадет в объем, в котором в среднем находится \bar{k} примесей, определяется формулой Пуассона

$$W = (\bar{k})^k e^{-\bar{k}} / k! \quad (3.1)$$

Считая, что $k \gg 1$, $\bar{k} \gg 1$ и оставляя главный член логарифма вероятности, получим

$$\ln W = k \ln (\bar{k}/k) + k - \bar{k}. \quad (3.2)$$

В рассматриваемом скоплении в среднем находится $\bar{k} = NR^3$ примесей. (При изложении этого метода мы не будем писать численные коэффициенты, так как это было бы превышением точности. Выражение для \bar{k} , как и следующие ниже равенства, следует воспринимать как порядковые оценки.) Представим k в виде

$$k = Z + NR^3, \quad (3.3)$$

где Z — избыточное число примесей во флуктуации. Подставляя k и \bar{k} в (3.2), получим вероятность флуктуации как функцию R и Z :

$$\ln W(R, Z) = (Z + NR^3) \ln \frac{NR^3}{Z + NR^3} + Z. \quad (3.4)$$

Наша задача будет заключаться в том, чтобы с помощью уравнения Шрёдингера найти энергию основного состояния $\varepsilon(R, Z)$ в потенциале, создаваемом шаром с параметрами R и Z . Так как характерный размер волновой функции основного состояния оказывается гораздо больше среднего расстояния между примесями, заряд можно считать размазанным по рассматриваемому шару. Найдя $\varepsilon(R, Z)$, выразим Z через R и ε и, подставив в (3.4), получим $W(R, \varepsilon)$ — вероятность того, что однородное скопление радиуса R создает электронное состояние с энергией ε . Далее найдем $R = r_{\max}$, при котором $\ln W(R, \varepsilon)$ имеет абсолютный максимум при фиксированной энергии. Глубоко в запрещенной зоне, где плотность состояний $\rho(\varepsilon)$ очень мала, а число примесей в скоплении велико, этот максимум можно считать острым, так что

$$\ln [\rho(\varepsilon)/\rho(0)] = \ln W(r_{\max}, \varepsilon). \quad (3.5)$$

Такова схема вычислений.

Введем вспомогательную функцию $W(R, V)$, определяющую вероятность того, что скопление примесей радиуса R создает яму, максимальная глубина которой есть V . Потенциальную энергию V , как и энергию электрона ε , мы будем везде в этой главе отсчитывать вниз от невозмущенного дна зоны проводимости. Тогда, если $R \ll r_s$, то

$$V = (e^2/\kappa R) Z \quad (R \ll r_s). \quad (3.6)$$

(Мы учитываем только флуктуационный потенциал, создаваемый избыточными примесями. Средний потенциал доноров компенсируется электронами.) Если $R \gg r_s$, то вклад в потенциал дают не все примеси скопления, а лишь те, которые находятся на расстоянии, меньшем радиуса действия r_s . Концентрация избыточных примесей равна Z/R^3 , а их число в радиусе действия равно $(Z/R^3) r_s^3$. Поэтому вместо (3.6) получим

$$V = (e^2/\kappa r_s) (r_s^3/R^3) Z \quad (R \gg r_s). \quad (3.7)$$

Выражая Z через R и V с помощью (3.6) и (3.7) и подставляя в (3.4), получим $\ln W(R, V)$.

Вспомогательная функция $W(R, V)$ имеет некоторое отношение к искомой функции $W(R, \varepsilon)$. Действительно, легко сообразить, что потенциальная яма, создаваемая равномерно заряженным шаром, имеет электронный уровень ε , близкий к потенциальной энергии в центре шара V , если $V \gg \hbar^2/mR^2$. Поэтому при $R > r_q = \hbar/\sqrt{mV}$ мы можем получить $\ln W(R, \varepsilon)$ из $\ln W(R, V)$, просто заменяя V на ε . При $R \leq r_q$ в (3.4) следует подставлять функцию $Z(R, \varepsilon)$, полученную квантовомеханическим путем.

В этой и следующей главах мы будем изучать спектр основных носителей в сильно легированном и слабо компенсированном полупроводнике (для определенности n -типа). Как было показано в гл. 2, при $\varepsilon < \varepsilon_c$ плотность состояний выражается квазиклассической формулой (2.16). Так как, строго говоря, $\varepsilon_c > \gamma$, очевидно, что показатель экспоненты, полученный методом оптимальной флуктуации при не очень больших энергиях, должен совпадать с показателем в формуле (2.18).

Введем длину $r_2 = (V\kappa/Ne^2)^{1/2}$. Отношение $r_2/r_s = (V/\Gamma)^{1/2}$, где $\Gamma = (e^2/\kappa r_s) Nr_s^3$. Согласно (2.12) Γ есть средняя потенциальная энергия, создаваемая донорами. Так как $\Gamma > \gamma$, отношение r_2/r_s в области, где плотность состояний экспоненциально мала, может быть произвольным. График функции $\ln W(R, V)$ при $V < \Gamma$ и $V > \Gamma$ схематически изображен на рис. 2.

Рассмотрим сначала случай $V < \Gamma$. Легко убедиться, что область $R > r_2$ на рис. 2, а соответствует гауссовой статистике. Действительно, условие применимости гауссовой статистики есть $Z \ll NR^3$. Если $R < r_s$, то, воспользовавшись (3.6), получим

$$\frac{Z}{NR^3} = \frac{V}{(e^2/\kappa R)NR^3} = \left(\frac{r_2}{R}\right)^2. \quad (3.8)$$

При $R > r_2$

$$\ln W = -Z^2/NR^3. \quad (3.9)$$

Подставляя (3.6) и (3.7) в (3.9), получим

$$\ln W = -\frac{V^2}{[(e^2/\kappa R)(NR^3)^{1/2}]^2} \quad (r_2 < R < r_s) \quad (3.10)$$

и

$$\ln W = -\frac{V^2 R^3 \kappa^2}{e^4 N r_s^4} \quad (R > r_s). \quad (3.11)$$

Таким образом, при $R > r_2$ функция $\ln W(R, V)$ растет с R вплоть до $R = r_s$, а затем убывает, что и изображено на рис. 2, а. Спад $\ln W(R, V)$

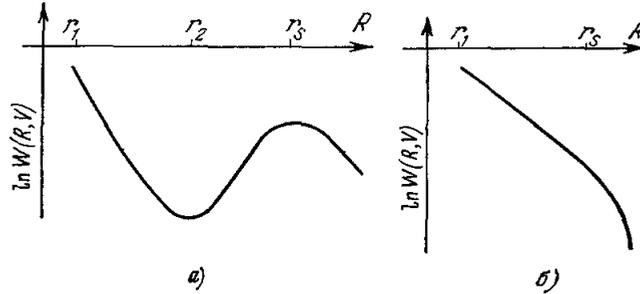


Рис. 2. Логарифм вероятности создания потенциальной ямы глубиной V скоплением радиуса R как функция R при $V < \Gamma$ (а) и $V > \Gamma$ (б).

при $R > r_s$ вполне понятен. Увеличение радиуса шара R за пределы радиуса действия r_s бессмысленно, так как потенциал периферийных примесей все равно не достигает центра. Таким образом, мы показали, что функция $\ln W(R, V)$ имеет относительный максимум в точке $R = r_s$. Из неравенства $r_q/r_s = (\gamma/V)(E_s/\gamma)^{1/2} < 1$ следует, что этот максимум находится в области $R > r_q$, т. е. там, где энергия основного состояния ϵ совпадает с дном ямы V . Тогда в соответствии с (3.5) подставим $R = r_s$ в (3.10) или (3.11) и получим вклад в плотность состояний от только что найденного максимума:

$$\ln [\rho(\epsilon)/\rho(0)] = -\epsilon^2/\gamma^2. \quad (3.12)$$

Эта формула совпадает с результатом квазиклассической теории (2.18), однако, как мы увидим, она имеет гораздо более широкую область применимости¹⁹.

Как видно из рис. 2, максимум при $R = r_s$ существует, и формула (3.12) имеет место только при $\epsilon < \Gamma$. Подставляя в (3.8) $R = r_s$, мы убеждаемся в том, что при $V = \Gamma$ флуктуации в яме размера r_s перестают быть гауссовыми. Легко показать, что значения V , бóльшие, чем Γ , вообще не могут быть получены с помощью гауссовых флуктуаций (на кривой рис. 2, б совсем нет гауссова участка). Однако еще при $\epsilon < \Gamma$ флуктуации, лежащие левее минимума на рис. 2, а, могут оказаться более вероятными, чем флуктуации с $R = r_s$. Для этого необходимо (но не

достаточно), чтобы при $V = \epsilon$ выполнялось неравенство $r_q \leq r_2$. Тогда $\ln W(R, \epsilon)$ возрастает с уменьшением R вплоть до $R \approx \hbar/\sqrt{m\epsilon}$.

При $R \ll r_2$, учитывая (3.8), из (3.4) получим

$$\ln W = -Z \ln(Z/NR^3). \quad (3.13)$$

Подставляя (3.6) в (3.13), найдем

$$\ln W(R, V) = -\frac{VR\kappa}{e^2} \ln \frac{V\kappa}{e^2 NR^2}. \quad (3.14)$$

Функция (3.14) убывает с уменьшением R , что и изображено на рис. 2, а. При этом Z уменьшается, обращаясь в единицу при $R = r_1 \equiv e^2/V\kappa$. Ясно, однако, что если $V > E_0$, яма станет квантовой (не будет содержать связанного состояния) при гораздо больших значениях R , чем r_1 . Действительно, $r_1/r_q = (E_0/V)^{1/2} < 1$.

Легко сообразить, как выглядит функция $\epsilon(R, Z)$, если $R \ll \hbar/\sqrt{m\epsilon}$. В этом случае флуктуация представляет почти точечное ядро атома, наимизший терм которого реализует энергию ϵ . С поправкой на неточечность ядра имеем

$$\epsilon = Z^2 E_0 \left(1 - \frac{R^2}{(a/Z)^2}\right). \quad (3.15)$$

Таким образом, при $R \ll \hbar/\sqrt{m\epsilon}$ энергия основного состояния ϵ отнюдь не совпадает с максимальной глубиной V (3.6), стремящейся к бесконечности при $R \rightarrow 0$, а стремится к постоянной величине $Z^2 E_0$.

Обращая (3.15), получим

$$Z = \sqrt{\frac{\epsilon}{E_0}} \left(1 + \frac{R^2}{a^2} \frac{\epsilon}{E_0}\right), \quad R \ll \frac{\hbar}{\sqrt{m\epsilon}} \approx a \sqrt{\frac{E_0}{\epsilon}}. \quad (3.16)$$

Подставляя (3.16) в (3.13), увидим, что при $R \rightarrow 0$ функция $\ln W(R, \epsilon) \rightarrow -\infty$. Так как при $R \gg \hbar/\sqrt{m\epsilon}$ для $\ln W(R, \epsilon)$ применима формула (3.14), в которой можно положить $V = \epsilon$, это означает, что $\ln W(R, \epsilon)$ имеет второй максимум (рис. 3). Он определяется конкуренцией комбинаторного логарифма в (3.13), который показывает, что более вероятны «рыхлые» ядра и поправки на неточечность ядра в (3.16), которая свидетельствует о том, что точечные ядра могут обеспечить заданную энергию при меньшем Z . Так как поправка на неточечность входит в (3.13) степенным образом, она влияет сильнее и оптимальное ядро оказывается точечным ($r_{\max} < \hbar/\sqrt{m\epsilon}$). Поэтому для нахождения r_{\max} достаточно подставить (3.16) в (3.13) и найти максимум по R . В результате для оптимальной флуктуации имеем

$$r_{\max} \approx \frac{\hbar}{\sqrt{m\epsilon}} \frac{1}{\sqrt{\ln \left[\left(\frac{\epsilon}{E_0}\right)^2 \frac{1}{Na^3} \right]}}. \quad (3.17)$$

При выводе предполагалось, что аргумент логарифма в (3.17) много больше единицы. При энергиях, для которых плотность состояний определяется рассматриваемым максимумом ($\epsilon > E_i$; см. ниже), это условие выполняется.

Таким образом, размер оптимального скопления мал по сравнению с его боровским радиусом, т. е. это скопление представляет собой почти точечное ядро атома.

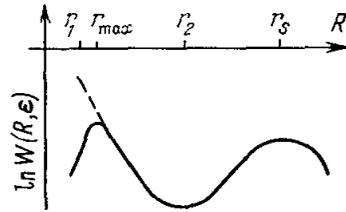


Рис. 3. Логарифм вероятности создания электронного состояния с энергией ϵ скоплением радиуса R как функция R ($E_s < \epsilon < \Gamma$).

Подставляя $Z = \sqrt{\varepsilon/E_0}$ и r_{\max} из (3.17) в (3.13), получим ²⁰

$$\ln \frac{\rho(\varepsilon)}{\rho(0)} = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{E_0}} \ln \left[\left(\frac{\varepsilon}{E_0} \right)^2 \frac{D(\varepsilon)}{Na^3} \right], \quad (3.18)$$

где

$$D(\varepsilon) \approx \left\{ \ln \left[\left(\frac{\varepsilon}{E_0} \right)^2 \frac{1}{Na^3} \right] \right\}^{3/2}. \quad (3.19)$$

Из сравнения (3.18) и (3.12) видно, что (3.18) имеет место при $\varepsilon > E_1$, а (3.12) при $\varepsilon < E_1$, где

$$E_1 = \frac{\gamma^{4/3}}{E_0^{1/3}} \left\{ \ln \left[\left(\frac{\gamma}{E_0} \right)^2 \frac{1}{Na^3} \right] \right\}^{2/3}. \quad (3.20)$$

легко убедиться в том, что в рассматриваемом случае $E_1 < \Gamma$. Если $\varepsilon > \Gamma$, то, как уже говорилось, максимум при $R = r_s$ исчезает, а рассуждения, относящиеся к максимуму при $R = r_{\max}$ (3.17), совершенно не меняются. Таким образом, формула (3.18) справедлива при всех энергиях $\varepsilon > E_1$, лежащих в пределах метода эффективной массы. Обсудим теперь предположения, сделанные при выводе этой формулы.

При выводе (3.18) мы рассматривали Z как непрерывную переменную. Это верно, если ширина максимума функции $\ln W(Z, \varepsilon)$ по переменной Z велика по сравнению с единицей. Легко убедиться в том, что это имеет место, если

$$\left(\frac{\varepsilon}{E_0} \right)^{1/4} > \ln \left[\left(\frac{\varepsilon}{E_0} \right)^2 \frac{1}{Na^3} \right]. \quad (3.21)$$

Формула (3.18) получена в приближении равномерно заряженного шара. При определении размера оптимальной флуктуации мы не учитывали численных множителей, так как в действительности они зависят от распределения плотности по флуктуации. Однако утверждение, что $r_{\max} < a/Z$, не зависит от сделанного приближения. Поэтому логарифмический множитель в (3.18) не содержит никаких дополнительных чисел, что и подтверждается теорией, развитой в разделе в), в которой определяется истинное распределение заряда во флуктуации и точно находится функция $D(\varepsilon)$. К этому следует добавить, что в рамках метода эффективной массы множитель перед логарифмом не зависит от вида спектра (если понимать под E_0 не (1.1), а точное значение энергии основного состояния). Действительно, вид этого множителя является следствием того, что $\varepsilon \sim Z^2$. Но это выполняется всегда, когда гамильтониан есть квадратичная форма компонент импульса.

Все рассуждения этой главы основывались на одноэлектронном приближении и предположении, что примеси экранируются дебаевским образом. Однако, по существу, дебаевское экранирование требовалось нам только при выводе (3.12). Так как в слабо компенсированном полупроводнике $E_1 < \mu_0$, где μ_0 — энергия Ферми, предположение о дебаевском экранировании не накладывает ограничений на область применимости (3.12). Что же касается формулы (3.18), то учет электрон-электронного взаимодействия не влияет на нее и при $\varepsilon > \mu_0$. Рассмотренное нами образование представляет собой многоэлектронный атом, наимизший терм которого реализует требуемую энергию ε . Но, как известно ²¹, при большом заряде ядра внешние электроны слабо меняют энергию этого термина.

Таким образом, (3.18) является асимптотическим выражением для плотности состояний при больших энергиях, находящихся в рамках метода эффективной массы. Важно, однако, что мы считали примеси распределенными случайно. Как мы увидим в разделе д), эффекты корре-

ляции (если они есть), меняют асимптотику плотности состояний. Для использования формулы Пуассона необходимо также, чтобы среднее расстояние между примесями в скоплении было гораздо больше постоянной решетки. Однако легко убедиться в том, что энергии, при которых это условие нарушается, сравнимы с шириной запрещенной зоны.

Итак, мы рассмотрели плотность состояний основных носителей в сильно легированном и слабо компенсированном полупроводнике и доказали, что она описывается формулами (3.12) и (3.18), переходящими друг в друга при $\epsilon \approx E_1$.

в) Точное распределение примесей в оптимальных флуктуациях. 1) *Вывод основных уравнений.* В предыдущем разделе мы произвели качественный анализ, в котором предполагалось, что флуктуации представляют собой однородно заряженные шары, отличающиеся друг от друга только радиусом и плотностью заряда. Мы переходим теперь к изложению строгой теории, позволяющей найти истинную форму оптимальных флуктуаций.

Введем функцию $f(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}) - N$, где $N(\mathbf{r})$ — концентрация примесей в точке \mathbf{r} , усредненная по объему, большему, чем N^{-1} . Найдем вероятность флуктуации $f(\mathbf{r})$, считая, что корреляция в распределении примесей отсутствует. Для этого рассмотрим элемент объема ΔV , достаточно малый, чтобы считать внутри него $N(\mathbf{r})$ постоянной, но содержащий большое число примесей $\mathcal{N} = N(\mathbf{r}) \Delta V \gg 1$. Для подсчета числа состояний допустим, что примеси могут находиться только в узлах решетки, причем концентрация этих узлов $p \gg N(\mathbf{r})$. Найдем число способов, которым можно разместить \mathcal{N} примесей по узлам решетки, находящимся в объеме ΔV . Число узлов $\mathcal{P} = p \Delta V$, а искомое число способов $\Gamma_{\Delta V}$ есть число сочетаний из \mathcal{P} по \mathcal{N} :

$$\Gamma_{\Delta V} = \mathcal{P}! / \mathcal{N}! (\mathcal{P} - \mathcal{N})!. \quad (3.22)$$

Для энтропии объема ΔV получим

$$S_{\Delta V} = \ln \Gamma_{\Delta V} = \mathcal{N} \ln (\mathcal{P} e / \mathcal{N}). \quad (3.23)$$

Введем теперь плотность энтропии:

$$S_{\Delta V} = \sigma(\mathbf{r}) \Delta V, \quad \sigma(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}) \ln (pe / N(\mathbf{r})). \quad (3.24)$$

Полная энтропия кристалла, имеющего объем V_0 ,

$$S = \int_{V_0} d^3r \sigma(\mathbf{r}). \quad (3.25)$$

Найдем энтропию такого распределения примесей, когда в некотором объеме V , составляющем ничтожную долю V_0 , имеет место флуктуация $f(\mathbf{r})$, вообще говоря, сравнимая с $N(\mathbf{r})$, а в остальной части объема $f(\mathbf{r}) \ll \ll N$. Из закона сохранения числа частиц имеем

$$\int_{V_0-V} f(\mathbf{r}) d^3r = - \int_V f(\mathbf{r}) d^3r. \quad (3.26)$$

Энтропия такой флуктуации

$$S = \int_V (N + f) \ln \frac{pe}{N + f} d^3r + (V_0 - V) N \ln \frac{pe}{N} + \int_{V_0-V} \left(\frac{d\sigma}{dN(\mathbf{r})} \right)_{N(\mathbf{r})=N} f d^3r. \quad (3.27)$$

Преобразуя последний член с помощью (3.26), найдем, что отличие S от энтропии равномерного распределения примесей $S_0 = V_0 N \ln (pe / N)$

равно

$$S - S_0 = \int_V \left[(N + f) \ln \frac{N}{N + f} + f \right] d^3r. \quad (3.28)$$

Если $f(\mathbf{r})$ убывает достаточно быстро, так что интеграл (3.28) сходится, интегрирование можно распространить до бесконечности. Тогда вероятность того, что в некоторой части объема возникла флуктуация $f(\mathbf{r})$, есть $\exp(-\Omega\{f\})$, где

$$\Omega\{f\} = - \int \left[(N + f) \ln \frac{N}{N + f} + f \right] d^3r. \quad (3.29)$$

Введем теперь функционалы $V_r\{f\}$ и $\lambda_0\{f\}$, первый из которых есть потенциальная энергия пробного электрона в точке r , созданная флуктуацией f , а второй есть энергия основного состояния электрона, определяемая из уравнения Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V_r\{f\} \psi = \lambda_0 \psi. \quad (3.30)$$

В приближении дебаевского экранирования

$$\begin{aligned} V_r\{f\} &= \int f(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3r', \\ \varphi(r) &= -(e^2/\kappa r) e^{-r/rs}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Оптимальная флуктуация $\tilde{f}(\mathbf{r})$ должна осуществлять минимум $\Omega\{f\}$ при условии

$$\lambda_0\{f\} = -\varepsilon. \quad (3.32)$$

Соответствующее уравнение имеет вид

$$\delta(\Omega\{f\} + \beta\lambda_0\{f\}) = 0, \quad (3.33)$$

где β — множитель Лагранжа, который следует находить из (3.32).

Варьируя (3.29) и учитывая, что

$$\delta\lambda_0\{f\} = \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 d^3r' \int \varphi(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \delta f(\mathbf{r}'') d^3r'', \quad (3.34)$$

получим окончательно уравнение ¹⁸

$$\ln \frac{N + \tilde{f}}{N} + \beta \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3r' = 0, \quad (3.35)$$

которое вместе с (3.30) определяет оптимальную флуктуацию \tilde{f} . Главный член логарифма плотности состояний выражается формулой

$$\ln \frac{\rho(\varepsilon)}{\rho(0)} = -\Omega\{\tilde{f}\}. \quad (3.36)$$

Теперь мы приведем строгий вывод формул (3.12) и (3.18) и определим численные множители, зависящие от формы флуктуации.

2) *Вывод формулы* (3.12). Оптимальная флуктуация, соответствующая (3.12), описывается гауссовой статистикой. В этом случае ($f \ll N$) (3.29) имеет вид

$$\Omega\{f\} = (1/2N) \int f^2 d^3r, \quad (3.37)$$

а вместе (3.35) получим

$$\tilde{f} = -N\beta \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3r'. \quad (3.38)$$

где

$$\chi(r) = (\beta e^2 / \kappa) \int |\psi(r')|^2 e^{i r - r' / r_s} d^3 r'. \quad (3.47)$$

Мы покажем теперь, что в области больших энергий существует сферически-симметричное решение уравнений (3.30), (3.46). Это решение обладает тем свойством, что функция \tilde{f} экспоненциально спадает на расстоянии x , малом по сравнению с длиной волны электрона в основном

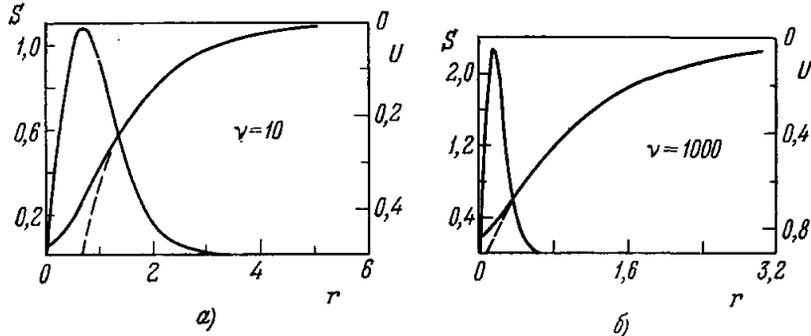


Рис. 4. Зависимости безразмерного потенциала $U(r)$ и волновой функции $S(r)$ от r/r_s , полученные в работе¹⁵ с помощью ЭВМ.

Штриховой линией показан потенциал, вычисленный по формуле (3.41), в области, где он отличается от $V(r)$; а) $\nu = 10$; б) $\nu = 10^3$; $\nu = \varepsilon/E_s$.

состоянии λ . (По порядку величины x совпадает с r_{\max} (3.17).) Кроме того, оказывается, что $\lambda \ll r_s$. Предположив все это заранее, мы должны считать, что флуктуация образует почти точечное ядро иона с зарядом

$$Z = \int \tilde{f}(r) d^3 r, \quad (3.48)$$

а волновая функция основного состояния имеет вид

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \lambda^{3/2}} e^{-r/\lambda}, \quad (3.49)$$

причем $\lambda = a/Z$. Поскольку основное состояние должно иметь энергию ε ,

$$Z = (\varepsilon/E_0)^{1/2}, \quad \lambda = a(E_0/\varepsilon)^{1/2}. \quad (3.50)$$

Докажем, что такое решение удовлетворяет уравнениям. Для этого подставим (3.49) в (3.47) и найдем явный вид $\chi(r)$ и $\tilde{f}(r)$. Для определения \tilde{f} подставим \tilde{f} в (3.48) и воспользуемся (3.50).

Подставляя (3.49) в (3.47) и разлагая по r/λ , получим

$$\chi(r) = t - (r^2/x^2), \quad (3.51)$$

где

$$t = \frac{\beta e^2}{\kappa \lambda}, \quad x^2 = \frac{3}{2} \frac{\lambda^2}{t}. \quad (3.52)$$

Видно, что сделанное выше предположение о резком спаде $\tilde{f}(r)$ на малых расстояниях эквивалентно предположению $t \gg 1$. Если, действительно, $t \gg 1$, то при $r < \lambda$ показатель экспоненты в (3.46) велик и

$$\tilde{f}(r) = N e^t e^{-r^2/x^2}. \quad (3.53)$$

Предположим, что характерный размер волновой функции $\lambda \ll r_s$. Тогда

$$\tilde{f} = -N\beta\varphi(r) \quad (r \gg \lambda), \quad (3.39)$$

а потенциальная энергия оптимальной ямы согласно (3.31) равна

$$V_r\{\tilde{f}\} = -N\beta \int \varphi(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{r}') d^3r' \quad (3.40)$$

или

$$V_r\{\tilde{f}\} = -\frac{e^4 N \beta r_s}{\kappa^2} \cdot 2\pi e^{-r/r_s}. \quad (3.41)$$

Потенциальная энергия спадает на расстоянии порядка r_s , и при $\varepsilon \gg E_s = \hbar^2/mr_s^2$ энергия основного состояния близка к дну ямы. Поэтому можно определить β из условия

$$V_r\{\tilde{f}\}|_{r=0} = -\varepsilon. \quad (3.42)$$

Тогда

$$\beta = \frac{\varepsilon \kappa^2}{2\pi e^4 N r_s}. \quad (3.43)$$

Подставляя (3.43), (3.39) и (3.37) в (3.36), получим формулу (3.12), причем численный коэффициент в γ оказывается таким же, как в (2.13).

Найдем теперь длину волны электрона в основном состоянии λ . Для этого заметим, что согласно (3.38) при $r \ll \lambda$

$$\tilde{f} \approx N\beta e^2/\kappa\lambda \quad (3.44)$$

и не зависит от r . Таким образом, внутренняя часть флуктуации ($r < \lambda$) представляет собой равномерно заряженный шар. Для того чтобы решение было самосогласованным, радиус шара должен быть таким, чтобы в потенциале, созданном шаром, был электронный уровень с длиной волны порядка радиуса шара. Шар радиуса λ и с плотностью заряда (3.44) создает потенциальную яму глубиной $N\beta (e^2/\kappa) \lambda$. Радиус λ можно найти, приравняв эту величину к $\hbar^2/m\lambda^2$. В результате получим

$$\lambda \approx r_s (E_s/\varepsilon)^{1/3}. \quad (3.45)$$

При $\varepsilon \gg E_s$ предположенное при выводе неравенство $\lambda \ll r_s$ выполняется.

В работе Гальперина и Лэкса¹⁵ уравнения (3.30), (3.38) решались численно. Интересно сравнить приведенное выше аналитическое решение с результатами этих расчетов. На рис. 4 представлены оптимальный потенциал и волновая функция, полученные в¹⁵ на ЭВМ при $\nu = \varepsilon/E_s \gg 1$.

На графиках отложены безразмерный потенциал $U(r) = V_r \kappa^2 / 2\pi e^4 N \beta r_s$ и безразмерная волновая функция $S(r) = \sqrt{4\pi} \varphi(r) r r_s^{1/2}$. В соответствии с (3.41) в тех местах, где $S(r)$ мала, $V(r)$ точно совпадает с графиком функции e^{-r/r_s} , который нанесен на рис. 4 пунктиром. Так как мы не получили точного вида волновой функции, то можем лишь приближенно сравнить (3.45) с рис. 4. Для этого допустим, что длина волны λ пропорциональна координате максимума $S(r)$. Отношение полученных таким образом длин волн при $\nu = 10$ и $\nu = 10^3$ $\lambda_{10}/\lambda_{1000} = 4,4$. Согласно (3.45) это отношение равно $(100)^{1/3} = 4,6$. Таким образом, аналитическое и численное решения прекрасно согласуются друг с другом.

3) *Асимптотика плотности состояний в отсутствие корреляции примесей.* Перепишем (3.35) в виде

$$\tilde{f} = N (\varepsilon \kappa(r) - 1), \quad (3.46)$$

Подставив (3.53) и (3.50) в (3.48), получим трансцендентное уравнение для определения t :

$$t = \ln \left[\left(\frac{\varepsilon}{E_0} \right)^2 \frac{t^{3/2}}{Na^3} \left(\frac{2}{3\pi} \right)^{3/2} \right]. \quad (3.54)$$

Отсюда при достаточно больших энергиях

$$t \approx \ln [(\varepsilon/E_0)^2 / Na^3] \gg 1, \quad (3.55)$$

что и оправдывает сделанное предположение. Таким образом, предсказанное решение действительно существует.

Для вычисления $\Omega \{ \tilde{f} \}$ учтем, что $\tilde{f} \gg N$ и (3.29) можно представить в виде

$$\Omega \{ \tilde{f} \} = \int \tilde{f} \ln (\tilde{f}/Ne) d^3r. \quad (3.56)$$

Подставляя (3.53) в (3.56), легко получить

$$\Omega \{ \tilde{f} \} = Z(t - 1) - (3/2)Z. \quad (3.57)$$

В этом выражении имеются члены порядка Zt и Z . Поэтому сюда нельзя подставлять $Z = \sqrt{\varepsilon/E_0}$, а следует учесть поправки к этому выражению порядка t^{-1} . Энергия основного состояния с поправкой на неточность ядра имеет вид ²²

$$\varepsilon = Z^2 E_0 \left(1 - \frac{4}{3} \frac{\langle r^2 \rangle}{\lambda^2} \right). \quad (3.58)$$

Отсюда

$$Z = \sqrt{\frac{\varepsilon}{E_0}} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{\langle r^2 \rangle}{\lambda^2} \right); \quad (3.59)$$

здесь

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{Z} \int \tilde{f}(r) r^2 d^3r. \quad (3.60)$$

Подставляя (3.53) в (3.60) и (3.59), получим

$$Z = \sqrt{\frac{\varepsilon}{E_0}} \left(1 + \frac{3}{2t} \right). \quad (3.61)$$

Поправки к уравнению (3.54), полученные с помощью (3.59), порядка t^{-1} , и их можно не учитывать. Подставляя (3.61) в (3.57), найдем

$$\Omega \{ \tilde{f} \} = (\varepsilon/E_0)^{1/2} (t - 1). \quad (3.62)$$

Подстановка (3.62) в (3.63) приводит к результату (3.18)²⁰, причем

$$D(\varepsilon) = (2/3\pi)^{3/2} t^{3/2} e^{-1}, \quad (3.63)$$

а t определяется уравнением (3.54).

Заметим, однако, что экспоненциальный спад $\tilde{f}(r)$, описываемый (3.53), происходит только при $r < \lambda$. На больших расстояниях он оказывается более плавным. При $r \gg \lambda$ из (3.47) получим

$$\chi(r) = \frac{\beta e^2}{\chi r} e^{-r/r_s}. \quad (3.64)$$

Подставляя $\beta e^2/\chi$ из (3.52), убеждаемся, что при $r \gg \lambda$ величина $\chi(r) \ll 1$ и, следовательно,

$$\tilde{f}(r) = t(\lambda/r) e^{-r/r_s} \quad (r \gg \lambda). \quad (3.65)$$

Потенциал, создаваемый этой частью заряда в центре флуктуации, приводит к классическому сдвигу уровня на величину

$$\frac{e^2}{\kappa} \int \frac{j(r')}{r'} d^3r' \approx \frac{e^2}{\kappa} tN\lambda r_s. \quad (3.66)$$

(Сдвиг можно считать классическим, так как основной вклад в интеграл дает область, где $r \approx r_s \gg \lambda$.) Изложенная выше теория справедлива, если правая часть (3.66) мала по сравнению с ϵ . Для этого необходимо условие $\epsilon > E_1$, где E_1 определяется (3.20). Кроме того, разумеется, необходимо еще условие $\lambda < r_s$, т. е. $\epsilon > E_s$. Этих двух условий также достаточно для того, чтобы выражение, стоящее под знаком логарифма, было велико.

Таким образом, область применимости формулы (3.18) в предыдущем разделе была получена правильно.

г) Спектр неосновных носителей. Как будет показано в следующей главе, в вырожденном полупроводнике частотная зависимость коэффициента межзонного поглощения света на частотах ниже пороговой определяется именно спектром неосновных носителей. Задача о вычислении плотности состояний имеет в этом случае две важные особенности:

а) Основные примеси являются для неосновных носителей отталкивающими центрами (например, заряженный донор для дырки).

б) Обычно массы электрона и дырки резко отличаются друг от друга. Это обстоятельство привносит в задачу значительное разнообразие. Как мы видели при выводе формулы (3.12), было существенное условие $\gamma > E_s = \hbar^2/mr_s^2$, означающее, что типичная потенциальная яма с размером r_s содержит квантовые уровни. Если речь идет о неосновных носителях, то в выражение для E_s следует подставлять их массу, а в выражение для r_s — массу основных носителей, осуществляющих экранирование. При этом возможны различные ситуации, которые мы сейчас и анализируем.

1) *Классический случай* ($\gamma > E_s$). Рассмотрим спектр дырок в электронном полупроводнике, предполагая, что масса дырки m_h больше массы электрона m . Предположим сначала, что компенсация вообще отсутствует, т. е. имеются только донорные примеси, причем для электронов выполняется условие сильного легирования $Na^3 \gg 1$, где $a = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус электрона. Условие $\gamma > E_s$ теперь выполняется легче, поскольку оно имеет вид $\hbar^2/m_h r_s^2 < \gamma$, или $(m_h/m) (Nr_s^3)^{1/6} > 1$.

Так как по отношению к дыркам доноры являются отталкивающими примесями, глубокие дырочные состояния создаются не скоплениями, а разрежениями доноров. В гауссовой статистике скопления и разрежения равновероятны. Легко поэтому убедиться в том, что вывод, приводящий к формуле (3.12), остается без изменений. Согласно (2.15) гауссова статистика применима при $\epsilon \ll \Gamma$. При больших скоплениях симметрия скоплений и разрежений нарушается. Очевидно, что спектр одноэлектронной задачи имеет точку окончания при $\epsilon = \Gamma$. Действительно, если доноры полностью освободят область с линейным размером $R \gg r_s$, то в центре этой области останется только потенциал, создаваемый положительным фоном, который повышает энергию дырки на величину Γ . Больше повысить нельзя.

Вблизи точки окончания одноэлектронное приближение справедливо только, если энергия Ферми $\mu \gg \Gamma$. Это имеет место, если электронов гораздо больше, чем доноров (например, если электроны создаются под-

светкой). Если $n = N$, то μ и Γ совпадают с точностью до численных коэффициентов. Поэтому вблизи точки окончания одноэлектронное приближение неприменимо. В областях с пониженной концентрацией доноров окажется понижена и концентрация электронов. Из-за этого возрастет радиус экранирования и, следовательно, размер области, которую нужно очистить от доноров, чтобы получить требуемое повышение дна зоны проводимости и верха валентной зоны (рис. 5). Вблизи точки окончания радиус экранирования стремится к бесконечности и потому плотность состояний обращается в нуль экспоненциально.

Найдем вид плотности состояний дырок вблизи точки окончания¹³. Допустим, что вследствие флуктуации образовалась область с концентрацией доноров $\tilde{N} \ll N$. Энергетическая схема контакта с такой областью изображена на рис. 5. Контактная разность потенциалов, создающая повышение дна зоны проводимости и верха валентной зоны на величину ϵ , определяется со-

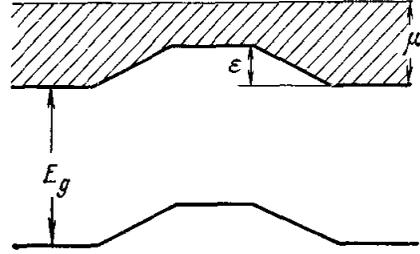


Рис. 5. Изгиб зон в области, обедненной донорами. Заполненные состояния зоны проводимости заштрихованы.

отношением $\mu - \epsilon \approx \hbar^2 \tilde{N}^{2/3} / m$. Такое повышение действительно имеет место, если размер области, в которой произошла флуктуация, больше радиуса экранирования в этой области $\tilde{r}_s = r_s (N/\tilde{N})^{1/6}$. Вероятность такой флуктуации есть $\exp(-N\tilde{r}_s^3)$. Выражая \tilde{r}_s через $(\mu - \epsilon)$, получим для плотности состояний дырок

$$\ln \frac{\rho(\epsilon)}{\rho(0)} \approx -Nr_s^3 \left(\frac{\mu}{\mu - \epsilon} \right)^{3/4}. \quad (3.67)$$

(Изучая $\rho(\epsilon)$ для дырок, мы отсчитываем ϵ вверх от вершины валентной зоны. Химпотенциал μ в (3.67) отсчитан, конечно, от дна зоны проводимости.) Если μ и ϵ одного порядка и $\mu - \epsilon$ порядка μ , то результат (3.67) совпадает с (3.12), как и следовало ожидать. Заметим, однако, что при выводе (3.67) мы предполагали электронный газ во флуктуации идеальным. Для этого необходимо условие $\tilde{N}a^3 \gg 1$ или $\mu - \epsilon \gg E_0$. (Во все эти формулы, разумеется, входит эффективная масса электрона.) Так как $E_0 \ll \mu$, формула (3.67) описывает спад $\rho(\epsilon)$ в довольно широком интервале.

Если допустить, что в полупроводнике имеются компенсирующие акцепторы, то плотность состояний будет отличной от нуля сколь угодно глубоко. При достаточно большом значении ϵ оказывается применимой формула (3.18), в которую вместо N , a и E_0 следует подставлять N_A , $a_h = \hbar^2 \kappa / m_h e^2$ и $E_h = \hbar^2 / 2m_h a_h^2$. (Подробнее см. ¹³, ¹⁹.)

2) *Квантовый случай* ($\gamma < E_s$). В типичных полупроводниках масса тяжелых дырок значительно больше массы электрона. Поэтому условие квантового случая $\gamma < E_s$ легко реализуется, когда в полупроводнике p -типа изучается спектр электронов. Мы по-прежнему будем считать, что для основных носителей выполняется условие сильного легирования $N_A a_h^3 \gg 1$. Так как это эквивалентно условию $N_A r_s^3 \gg 1$, то из неравенства $\gamma < E_s$ следует, что $r_s \ll a$, где a — боровский радиус электрона. (Напомним, что экранирование определяется дырками, а $E_s = \hbar^2 / m r_s^2$, причем m — эффективная масса электрона.) Это означает, что отдельная донорная примесь не имеет связанного состояния.

Как и в классическом случае, при малых энергиях оказываются существенными флуктуации, к которым применима гауссова статистика ($|Z| \ll N_A R^3$). Поэтому мы можем пользоваться формулами (3.6) и (3.7),

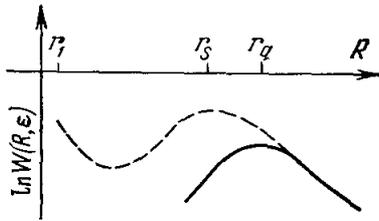


Рис. 6. Сплошная кривая — то же, что на рис. 3, для случая $\epsilon < E_s$, штриховая — $-\ln W(R, V)$.

уровнем). Подставляя в это условие (3.7) и выражая Z через R , получим

$$Z = aR/r_s^2, \quad (3.68)$$

$$\ln W(R, \epsilon) = -\frac{Z^2}{N_A R^3} = -\frac{a^2}{N_A R r_s^4}. \quad (3.69)$$

Отсюда видно, что при $R < \hbar/\sqrt{m\epsilon}$ функция $\ln W(R, \epsilon)$ убывает с уменьшением R (рис. 6). Легко показать, что она продолжает убывать и при $R < r_s$. Таким образом, оптимальная флуктуация имеет радиус $R = \hbar/\sqrt{m\epsilon}$. Подставляя этот радиус в (3.69), получим¹⁵⁻¹⁹

$$\ln \frac{\rho(\epsilon)}{\rho(0)} = -\left(\frac{\epsilon}{E_0}\right)^{1/2} \frac{E_s}{\Gamma} \quad (\epsilon < E_s). \quad (3.70)$$

Таким образом, в отличие от классического случая, где экспоненциальный спад $\rho(\epsilon)$ начинается при $\epsilon = \gamma$ и описывается (3.12), в квантовом случае спад начинается при $\epsilon = E_0 (\Gamma/E_s)^2$ и описывается (3.70).

Дальнейший ход $\rho(\epsilon)$ зависит от соотношения E_s и Γ . Если $E_s < \Gamma$, то при $\epsilon = E_s$ длины r_q и r_s сравниваются, (3.70) переходит в (3.12) и дальнейший ход $\rho(\epsilon)$ такой же, как в классическом случае. Если же $E_s > \Gamma$, то гауссова статистика нарушается при $r_q > r_s$ и (3.12) вообще не имеет места. Если притягивающие центры отсутствуют, спектр электронов обрывается при $\epsilon \approx \Gamma$. При наличии компенсации плотность состояний отлична от нуля и при больших энергиях и определяется флуктуациями доноров. Асимптотика по энергии по-прежнему описывается формулой (3.18)*.

д) Асимптотика плотности состояний с учетом корреляции в распределении примесей. В предыдущих рассуждениях предполагалось, что корреляция в распределении заряженных центров отсутствует. Если центры созданы с помощью облучения при низких температурах, это предположение может быть правильным. Если же образец подвергался высокотемпературной обработке, в процессе которой примеси могли свободно перемещаться, в их распределении возникает корреляция, связанная со взаимодействием. Коэффициент диффузии примесей очень резко убывает с температурой. Так как образцы остывают достаточно быстро, можно считать, что распределение примесей является мгновенной фотографией плазмы, суще-

*) Переход от (3.70) к (3.18) происходит довольно сложным образом (подробности см. в работе¹⁹).

ствовавшей при некоторой температуре T_0 , соответствующей прекращению диффузии²³. Эта температура близка обычно к температуре плавления.

Учет корреляции оказывается важным при вычислении асимптотики $\rho(\varepsilon)$ при больших ε . Действительно, мы считали, что вероятность образования ядра из Z примесей, имеющего радиус R , есть $\exp[-Z \ln(Z/NR^3)]$. Однако при температуре T_0 эти примеси отталкивались друг от друга. Для того чтобы их собрать, необходимо совершить работу $Z^2 e^2/\kappa R$. Поэтому вероятность такой флуктуации есть

$$\exp\left(-Z \ln \frac{Z}{NR^3}\right) \exp\left(-\frac{Z^2 e^2}{\kappa R T_0}\right). \quad (3.71)$$

При достаточно большом Z второй множитель обязательно станет важнее первого. Найдем размер оптимальной флуктуации в этом случае. Если $R > \hbar/\sqrt{m\varepsilon}$, яма классическая и $\varepsilon \approx Ze^2/\kappa R$. (Имеются в виду значения R , малые по сравнению с радиусом экранирования.) Отсюда $Z \approx \kappa R \varepsilon/e^2$, а вероятность такой ямы $\exp(-\kappa R \varepsilon^2/e^2 T_0)$ убывает с увеличением R . Если $R < \hbar/\sqrt{m\varepsilon}$, яма представляет точечное ядро, $Z = \sqrt{\varepsilon/E_0}$, а вероятность равна $\exp(-\varepsilon e^2/E_0 \kappa R T_0)$ и убывает с уменьшением R . Таким образом, оптимальная флуктуация имеет размер $R \approx \hbar/\sqrt{m\varepsilon}$, равный по порядку величины радиусу первой орбиты. Тем не менее $Z \approx \sqrt{\varepsilon/E_0}$. Подставляя эти значения R и Z во второй множитель, получим^{20,24}

$$\ln \frac{\rho(\varepsilon)}{\rho(0)} = -C \frac{\varepsilon^{3/2}}{E_0^{1/2} T_0}, \quad (3.72)$$

где C — численный коэффициент. Это и есть асимптотика плотности состояний с учетом корреляции примесей. В работе²⁰ получено безразмерное уравнение, определяющее форму оптимальной флуктуации и величину C . Формула (3.18) сменяется формулой (3.72) при $\varepsilon > T_0 \ln[(T_0/E_0)^2 D(T_0)/Na^3]$.

4. МЕЖЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА

а) О связи между коэффициентом межзонного поглощения света (КМПС) и плотностью состояний. Наиболее важным способом исследования флуктуационных уровней являются эксперименты по межзонному поглощению света вблизи порога. Типичные экспериментальные данные, полученные на n -GaAs, представлены на рис. 7. Видно, что КМПС убывает на четыре порядка при уменьшении энергии кванта на величину, ничтожную по сравнению с шириной запрещенной зоны ($E_g = 1,51$ эв при $T = 77^\circ$ К). С увеличением концентрации электронов кривые сдвигаются в коротковолновую область и становятся более пологими. Сдвиг кривых связан с заполнением зоны проводимости (эффект Мосса — Бурштейна). В СЛП n -типа при низких температурах переход происходит на уровень Ферми (рис. 8), так как все лежащие ниже состояния заполнены. Пороговая энергия оказывается при этом больше ширины запрещенной зоны E_g на величину энергии Ферми μ , если учитывать переходы со дна валентной зоны, происходящие с изменением импульса (непрямые переходы) или на величину $\mu [1 + (m/m_h)]$, если учитывать только прямые переходы (см. рис. 8). Непрямые переходы оказываются возможными из-за наличия примесей, причем, как правило, в СЛП их вероятность слабо отличается от вероятности прямых переходов. Поэтому в дальнейшем мы будем

понимать под пороговой энергией минимальную энергию непрямого перехода.

При конечной температуре КМПС может быть отличным от нуля на частотах ниже пороговой за счет дырок в ферми-заполнении. Так как вероятность существования дырки с энергией, меньшей μ на величину ϵ ,

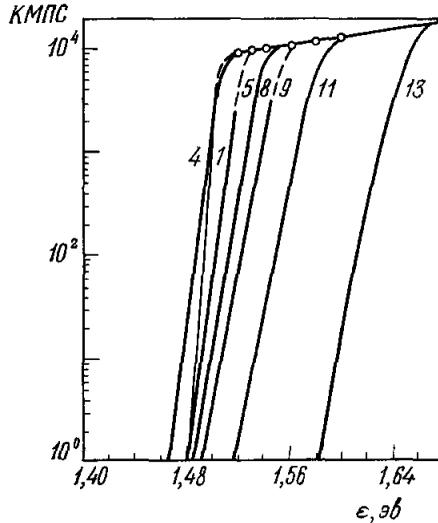


Рис. 7. КМПС (в см^{-1}) как функция энергии кванта (в эВ) в образцах n -GaAs с концентрациями электронов (см^{-3}): $2 \cdot 10^{16}$ (1); $2,2 \cdot 10^{17}$ (4); $5,3 \cdot 10^{17}$ (5); $1,2 \cdot 10^{18}$ (8); $1,62 \cdot 10^{18}$ (9); $3,15 \cdot 10^{18}$ (11) и $6,5 \cdot 10^{18}$ (13) (по данным ⁴⁰; $T = 77^\circ \text{K}$).

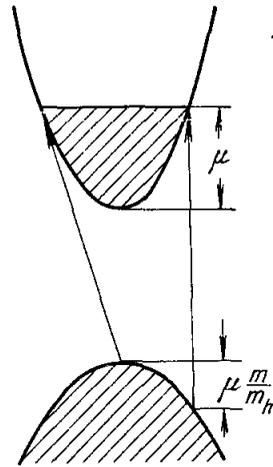


Рис. 8. Переходы с пороговой энергией кванта. Вертикальная стрелка — прямой переход, наклонная стрелка — не прямой переход.

пропорциональна $\exp(-\epsilon/T)$, КМПС убывает с частотой ω как $\exp\left[\frac{\mu + E_g - \hbar\omega}{T}\right]$ *).

При понижении температуры этот механизм поглощения оказывается мало вероятным **). Единственным механизмом поглощения, существующим при нулевой температуре, являются переходы с флуктуационных уровней, лежащих выше верха валентной зоны. Для определенности мы будем по-прежнему говорить о полупроводнике n -типа.

При поглощении кванта света с энергией $\hbar\omega < E_g + \mu$, должна образоваться дырка, находящаяся выше верха невозмущенной валентной зоны на величину, не меньшую, чем $\epsilon_h = E_g + \mu - \hbar\omega$. Схема таких переходов при наличии флуктуационного потенциала, изгибающего границы обеих зон, изображена на рис. 9. Число флуктуационных уровней дырок экспоненциально убывает с ростом ϵ_h . Вследствие этого КМПС экспоненциально убывает с уменьшением частоты.

Однако КМПС пропорционален не только вероятности существования глубокого дырочного уровня, но и вероятности межзонного перехода. Последняя также может быть экспоненциально малой, поскольку дыроч-

*) При учете только прямых переходов получим

$$\exp\left\{\left[-\mu - \frac{m_h}{m + m_h}(E_g - \hbar\omega)\right] T^{-1}\right\}.$$

**) Аналогичным образом при низких температурах вымораживается механизм поглощения, представляющий переходы с одновременным поглощением фононов.

ный уровень создается скоплением отрицательно заряженных акцепторов и волновая функция электрона в этой области может быть сильно обеднена. Как было показано в гл. 3, в области гауссовых флуктуаций потенциал слабо искажает электронные состояния вблизи уровня Ферми (мы пользовались этим, когда считали экранирование дебаевским). В этом случае вероятность перехода на уровень Ферми не мала и показатель экспоненты КМПС получается из показателя экспоненты плотности состояний дырок путем замены ϵ на $\epsilon_h = E_g + \mu - \hbar\omega$ ²⁵.

В области негауссовых флуктуаций основную роль в плотности состояний дырок играют скопления акцепторов, образующие ядра многозарядных ионов, основное состояние которых имеет энергию ϵ . При $\epsilon > \mu$ обеднение волновой функции электрона с энергией μ может быть значительным. Однако это обеднение происходит в сравнительно малой области пространства, и можно показать²⁰, что оно не влияет на частотную зависимость КМПС.

Итак, в сильно легированном и слабо компенсированном полупроводнике с вырожденными носителями тока частотная зависимость КМПС воспроизводит плотность состояний неосновных носителей (например, дырок в рассмотренном выше случае полупроводника *n*-типа).

б) Поглощение света за счет гауссовых флуктуаций в отсутствие вырождения носителей. Рассмотрим сильно легированный полупроводник, у которого уровень Ферми лежит глубоко в запрещенной зоне. Это может быть следствием высокой температуры или сильной компенсации. Сюда же относится ситуация (существующая, например, в германии), когда при поглощении кванта происходит переход электрона в незаполненную зону, расположенную над валентной зоной, а электроны образуют ферми-заполнение в боковом экстремуме, и уровень Ферми проходит гораздо ниже дна незаполненной зоны, в которую переходит электрон. Пусть, далее, в образце имеются заряженные доноры и акцепторы с суммарной концентрацией $N_t = N + N_A$. Их потенциал мы будем считать кулоновским вплоть до некоторого расстояния r_0 , а затем быстро спадающим. Этот спад может быть вызван как электронным экранированием, так и корреляцией в расположении примесей. Для нас будет существенно только то, что в гауссовых флуктуациях, имеющих размер $R \ll r_0$, корреляцию примесей можно не учитывать и что длина r_0 велика, так что флуктуационный потенциал можно считать по терминологии гл. 3 классическим и для электронов, и для дырок, т. е.

$$\frac{\hbar^2}{mr_0^2} \ll \gamma, \quad \frac{\hbar^2}{m_h r_0^2} \ll \gamma, \quad \gamma \sim \frac{e^2}{\kappa r_0} (N_t r_0^3)^{1/2}. \quad (4.1)$$

Как мы показали, в этом случае плотность состояний электронов и дырок спадает вглубь запрещенной зоны по закону (3.12), а оптимальные флуктуации представляют собой ямы размера r_0 , имеющие много уровней. Легко понять, что в этом случае коэффициент поглощения не повторяет плотности состояний. Это хорошо видно из рис. 10. Допустим, что мы

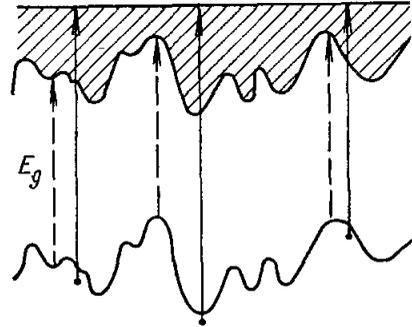


Рис. 9. Схема межзонных переходов в вырожденном полупроводнике при $T = 0$.

Извилистые линии — границы зон, искривленные потенциалом флуктуаций. Занятые состояния зоны проводимости заштрихованы.

изучаем переход, в результате которого образовались электрон и дырка с энергиями ε_e и ε_h (мы отсчитываем их вверх от дна зоны проводимости и вершины валентной зоны). При этом поглощается квант с дефицитом $\Delta = \varepsilon_h - \varepsilon_e$. (Дефицитом кванта Δ мы называем энергию, на которую этот квант меньше ширины запрещенной зоны, т. е. $\Delta = E_g - \hbar\omega$.)

Как видно из рис. 10, если $\Delta > 0$, то области, в которых находятся электрон и дырка, пространственно разделены. Действительно, область

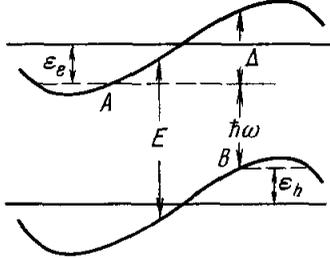


Рис. 10. Схема поглощения кванта с дефицитом Δ в невырожденном полупроводнике.

Сплошные горизонтальные прямые — границы невозмущенных зон, изогнутые линии — границы зон, искривленные потенциалом примесей (E_g обозначено как E).

правее точки A является классически недоступной для электрона, а область левее точки B классически недоступна для дырки. Коэффициент поглощения содержит интеграл перекрытия волновых функций электрона и дырки. Устремим массу электрона и дырки к бесконечности (при фиксированном r_0). При этом вероятность туннелирования обратится в нуль и поглощение кванта с $\Delta > 0$ окажется невозможным. В то же время плотность состояний, определяемая только вероятностью создания потенциальной ямы, выражается классической формулой (3.12), которая вообще не содержит массы. Таким образом, поглощение света в этом случае требует специального рассмотрения. По существу, это есть эффект Франца — Келдыша,

но не во внешнем электрическом поле, а в случайном поле заряженных примесей.

Мы получим решение этой задачи методом оптимальной флуктуации²⁶, т. е. найдем конфигурацию примесей, дающую максимальный вклад в поглощение света с заданным дефицитом. В области больших дефицитов, где коэффициент поглощения $K(\Delta)$ экспоненциально мал, максимум, соответствующий оптимальной флуктуации, оказывается очень резким. Поэтому главный член $\ln K(\Delta)$ определяется вкладом оптимальной флуктуации. Разумеется, такой метод не позволяет определить предэкспоненциальный член в $K(\Delta)$.

Мы приведем лишь упрощенный вывод, аналогичный приближению равномерно заряженного шара (гл. 3), позволяющий определить показатель экспоненты в $K(\Delta)$ с точностью до численного множителя. Этот множитель находится в строгой теории, построенной в работе²⁶.

Допустим, что вследствие флуктуации концентрации примесей в объеме с линейным размером R возникло однородное электрическое поле \mathcal{E} . Будем считать, что R и \mathcal{E} связаны соотношением $e\mathcal{E}R = \Delta$. Это необходимо для того, чтобы в поле такой флуктуации мог поглотиться квант с дефицитом Δ . (Поглощение кванта произойдет и при $R > \Delta/e\mathcal{E}$, однако, разумеется, такая флуктуация мало вероятна.) Избыточное число примесей, необходимое для создания требуемой флуктуации, определяется из условия $\mathcal{E} = Ze/\kappa R^2$, т. е.

$$Z = \mathcal{E} \kappa R^2/e = \kappa R\Delta/e^2.$$

(Здесь мы не пишем численных множителей, зависящих от формы флуктуации.) Вклад в коэффициент поглощения от такой флуктуации пропорционален величине

$$\exp\left(-\frac{Z^2}{N\kappa R^3}\right) \exp\left(-\frac{R\sqrt{m\Delta}}{\hbar}\right). \quad (4.2)$$

Первый множитель представляет собой вероятность появления Z избыточных примесей в объеме R^3 . Второй множитель есть вероятность

туннелирования электрона на глубину R (мы предполагаем для простоты, что масса дырки больше, чем масса электрона, и что дырка не туннелирует). Выразив Z через R и Δ , перепишем (4.2) в виде

$$\exp\left(-\frac{\kappa^2 \Delta^2}{e^4 N_t R} - \frac{R \sqrt{m\Delta}}{\hbar}\right), \quad (4.3)$$

откуда ясно, что при заданном Δ вероятность туннелирования растет с уменьшением R , в то время как вероятность образования флуктуации падает.

Найдем размер оптимальной флуктуации \tilde{R} из условия максимума показателя экспоненты в (4.3):

$$\tilde{R} = a \left(\frac{\Delta}{E_0}\right)^{3/4} \frac{1}{(N_t a^3)^{1/2}}. \quad (4.4)$$

Подставляя (4.4) в (4.3), получим вклад в $K(\Delta)$ от оптимальной флуктуации. В соответствии со сказанным выше, окончательно получим

$$\ln \left[\frac{K(\Delta)}{K(0)} \right] = -\beta \left(\frac{\Delta}{E_0}\right)^{5/4} \frac{1}{(N_t a^3)^{1/2}}. \quad (4.5)$$

Здесь β — численный множитель, который не может быть получен из столь упрощенного вывода. В работе²⁶ показано, что если $m_h \gg m$, то $\beta = 2/5\sqrt{\pi}$. В дальнейшем Меркулов и Перель³⁷ показали, что при сравнимых массах электрона и дырки в (4.5) следует представлять приведенную массу $mm_h/(m + m_h)$, а коэффициент β не меняется. Из (4.5) видно, что закон спада коэффициента поглощения существенно отличается от закона спада плотности состояний (3.12).

Исследуем теперь область применимости (4.5). В проделанном выше выводе было очень существенно, что потенциал примесей является кулоновским, по крайней мере на расстоянии порядка \tilde{R} . Поэтому результат справедлив, если только $\tilde{R} < r_0$ или, учитывая (4.4),

$$\Delta < \Delta_1, \quad \Delta_1 = E_0 (r_0/a)^{4/3} (N_t a^3)^{2/3}. \quad (4.6)$$

С другой стороны, для применимости (4.5) необходимо условие $|\ln [K(\Delta)/K(0)]| \gg 1$, или

$$\Delta \gg \Delta_2, \quad \Delta_2 = E_0 (N_t a^3)^{2/5}.$$

Из первого неравенства (4.1) следует, что $\Delta_1 > \Delta_2$, т. е. область применимости (4.5) существует и тем шире, чем больше r_0 .

Рассмотренная нами флуктуация, как видно из рис. 10, представляет потенциальную яму для электрона и расположенную рядом с ней потенциальную яму для дырки. В нашем выводе также предполагалось, что энергия электрона опущена, а энергия дырки поднята на величину Δ , т. е. потенциальные ямы имеют уровень с энергией порядка их глубины. Для этого достаточно неравенства $\hbar^2/m\tilde{R}^2 \ll \Delta$, которое вытекает из (4.7) и не накладывает дополнительных ограничений.

Выясним теперь, что произойдет при $\Delta > \Delta_1$. Если $\tilde{R} > r_0$, то при $R = r_0$ второй член в (4.3) мал по сравнению с первым, т. е. туннелирование несущественно. Как мы видели в разделе б) гл. 3, вероятность создания потенциальной ямы глубиной Δ и размером R убывает при $R > r_0$ с ростом R (потенциал далеких примесей не достигает центра). Поэтому, как и в теории плотности состояний, размер оптимального скопления

в этом случае есть r_0 . Подставляя в (4.3) $R = r_0$, получим при $\Delta > \Delta_1$

$$\ln \frac{K(\Delta)}{K(0)} = -\frac{\Delta^2}{\gamma^2}, \quad (4.8)$$

что воспроизводит плотность состояний.

Возможно, что еще при $\Delta < \Delta_1$ негауссовы флуктуации типа атома будут давать больший вклад в КМПС, чем гауссовы флуктуации, рассмотренные выше. В этом случае (4.8) вообще не имеет области применимости.

Вопросу о поглощении света в компенсированных полупроводниках посвящено много работ, в которых использованы различные методы. Ниже мы постараемся сопоставить их результаты. Обсудим сначала работы Рэдфилда и др.²⁷⁻³⁰. Идея этих работ состоит в том, что КМПС с дефицитом Δ в однородном электрическом поле \mathcal{E} усредняется с функцией распределения электрического поля $F(\mathcal{E})$, создаваемого заряженными примесями:

$$K(\Delta) = \int K_{\mathcal{E}}(\Delta) F(\mathcal{E}) d\mathcal{E}. \quad (4.9)$$

Согласно Келдышу³¹ и Францу³²

$$K_{\mathcal{E}}(\Delta) \sim \exp\left(-\frac{\sqrt{m\Delta}}{\hbar e} \frac{\Delta}{\mathcal{E}} \eta\right), \quad (4.10)$$

где η — численный коэффициент.

В работах^{27, 28} в качестве функции $F(\mathcal{E})$ использовалось распределение Хольцмарка. При больших \mathcal{E} ³³

$$F(\mathcal{E}) \sim 1/\mathcal{E}^{5/2}. \quad (4.11)$$

Поэтому при больших Δ в интеграле (4.9)₁ существенно $\mathcal{E} \approx \mathcal{E}_c = \sqrt{m\Delta} \Delta / \hbar e$ и, в противоположность (4.5), интеграл не является экспоненциально малым. Причина этого расхождения очевидна. Формула (4.10) применима, если только поле \mathcal{E} однородно, по крайней мере на расстоянии $\Delta/e\mathcal{E}$, на котором набирается дефицит Δ (см. рис. 10). С другой стороны, асимптотика (4.11) соответствует полю, создаваемому одной примесью, находящейся на расстоянии $R(\mathcal{E}) = \sqrt{(e/\kappa)\mathcal{E}}$ от точки наблюдения. Это поле можно считать однородным на расстоянии $R \ll R(\mathcal{E})$. При $\mathcal{E} = \mathcal{E}_c$ имеем $\Delta/e\mathcal{E}_c = R(\mathcal{E}_c) (\Delta/E_0)^{1/4}$. Отсюда видно, что при $\Delta > E_0$ указанная процедура противоречива.

В работе³⁰ (см. также³⁴) отмечается, что при вычислении $K_{\mathcal{E}}(\Delta)$ важно принимать во внимание взаимодействие электрона и дырки. Ясно, что если дефицит кванта достаточно велик, то это взаимодействие несущественно и асимптотика (4.10) применима. Однако численные расчеты, проведенные в работе²⁹, показали, что существует довольно широкая промежуточная область Δ , где

$$K_{\mathcal{E}}(\Delta) \sim \exp(-\Delta/\mathcal{E} C), \quad (4.12)$$

причем C не зависит от \mathcal{E} и Δ . В работе³⁰ предполагается, что $F(\mathcal{E}) \sim \exp(-3\mathcal{E}^2/2 \mathcal{E}_{ms}^2)$. Тогда из (4.9) и (4.12) следует, что $K(\Delta) \sim \exp(-\Delta/C \mathcal{E}_{ms})$. Нам кажется, однако, что представление $F(\mathcal{E})$ гауссовой функцией необоснованно, поскольку для кулоновских центров средний квадрат поля \mathcal{E}_{ms}^2 расходится на малых расстояниях.

Как показано в работе Меркулова и Переля³⁵, учет взаимодействия электрона и дырки добавляет малый член к показателю экспоненты (4.10), если $\Delta^2 \gg e^3 \mathcal{E}$. Подставляя в это неравенство $e\mathcal{E} = \Delta/\bar{R}$, где \bar{R} дается

формулой (4.4), легко убедиться в том, что при выводе (4.5) взаимодействие электрона и дырки действительно можно не учитывать.

Результат работы Бонч-Бруевича³⁶ также несколько отличается от (4.5), однако выяснить причину расхождения в этом случае трудно, так как наиболее важная формула этой работы (формула (12)) приведена без вывода, а физическая интерпретация результата отсутствует.

В заключение отметим интересную работу Меркулова и Переля³⁷, в которой с помощью изложенного выше метода оптимальной флуктуации построена теория электропоглощения в СЛП.

в) О б с у ж д е н и е э к с п е р и м е н т а л ь н ы х д а н н ы х .

«О нет, с тобою схож
Лишь дух, который сам ты познаешь.
Не я!»
«Фауст» Гете (перевод Б. Пастернака)

В этом разделе мы попытаемся применить изложенные выше теоретические представления для объяснения экспериментальных данных по межзонному поглощению света.

Обычно в полупроводниках экспериментально наблюдаемый КМПС на частотах ниже пороговой хорошо описывается формулой

$$\ln \frac{K(\omega)}{K(\omega_p)} = - \frac{\hbar(\omega_p - \omega)}{\Delta_0}, \quad (4.13)$$

где $\hbar\omega_p$ — пороговая энергия, а Δ_0 — характерная энергия, не зависящая от частоты. Первая трудность, с которой мы сталкиваемся, состоит в том, что ни в одном из рассмотренных выше случаев поглощения за счет флуктуационных уровней не возникала линейная зависимость $\ln K(\omega) \sim \sim -(\omega_p - \omega)$. Однако все полученные законы были асимптотическими, а измерения всегда проводятся в довольно узком интервале частот, в котором зависимости $\sqrt{\Delta} \ln \Delta$, $\Delta^{5/4}$ трудно отличить от линейной.

Наиболее полные экспериментальные данные, включающие измерения при гелиевой температуре, существуют для арсенида галлия *n*-типа. Их анализом мы и ограничимся. На рис. 11, заимствованном из работ Панкова³⁸, представлена зависимость Δ_0 от концентрации электронов в GaAs *n*-типа. Кружками обозначены результаты Панкова, полученные при $T = 5^\circ \text{K}$, а остальные данные получены при азотных температурах в работах^{39, 40}. При $T = 77^\circ \text{K}$ образцы с концентрацией электронов $n > 10^{17} \text{ см}^{-3}$ вырождены. Поэтому коэффициент поглощения воспроизводит плотность состояний валентной зоны.

Допустим, что образцы не компенсированы, т. е. имеются только электроны и положительно заряженные доноры. Как мы знаем, в этом случае плотность состояний выше невозмущенной валентной зоны убывает как $\exp(-\epsilon^2/\gamma^2)$. Это справедливо, если $\epsilon \ll \mu$, где μ — энергия Ферми, а при ϵ , близких к μ , плотность состояний обращается в нуль по закону (3.67). Отношение μ/γ с точностью до числа равно $(N_T^3)^{1/2}$. Поэтому наличие гауссова участка существеннейшим образом связано

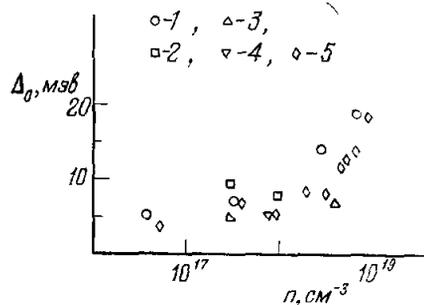


Рис. 11. Зависимость Δ_0 от концентрации носителей в *n*-GaAs по данным: ³⁸ (1), ^{39а} (2), ^{39б} (3), ^{39в} (4) и ⁴⁰ (5).

с выполнением условия $Nr_s^3 \gg 1$, т. е. с наличием газового параметра. В GaAs *n*-типа $(4\pi/3)Nr_s^3 = (1/2)(N/10^{18})^{1/2}$, откуда видно, что при изученных в ³⁸⁻⁴⁰ концентрациях газовый параметр практически отсутствует. Это означает, что дебаевская теория неприменима и радиус действия r_s следует считать близким к среднему расстоянию между электронами. Поэтому отсутствует дальное действие, столь существенное для гауссова участка. Энергии μ и γ при замене r_s на $N^{-1/3}$ становятся величинами одного порядка. Если вычислить γ по формуле (2.13), то мы увидим, что во всей области концентраций, представленной на рис. 11, $\gamma > \Delta_0$. Так, при $N = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ $\gamma = 15 \text{ мэв}$, а при $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ $\gamma = 47 \text{ мэв}$. Кроме того, видно, что на рис. 11 Δ_0 зависит от N не степенным, а логарифмическим образом. Все это приводит нас к очень важному выводу. Флуктуации концентрации доноров вызывают лишь сужение запрещенной зоны на величину порядка γ . Хвост же коэффициента поглощения следует, по-видимому, связывать с флуктуациями неосновных примесей¹⁹.

Допустим, что образцы компенсированы. Благодаря большей массе тяжелой дырки радиус основного акцепторного состояния мал по сравнению с r_s . Поэтому существуют состояния на одном акцепторе. По мере углубления в запрещенную зону в плотности состояний становятся существенными скопления двух, трех и т. д. акцепторов. Достаточно глубоко в запрещенной зоне справедлива формула (3.18) (с концентрацией акцепторов и массой дырки), которую воспроизводит КМПС*).

Сравнение формулы (4.18) с экспериментом затруднено по двум причинам. Во-первых, концентрация акцепторов в использованных образцах неизвестна. Обычные способы, позволяющие судить о степени компенсации (например, измерение подвижности) пригодны, только когда концентрации доноров и акцепторов близки. Если коэффициент поглощения при больших дефицитах действительно определяется акцепторами, он должен их чувствовать независимо от доноров и при очень малых концентрациях. Поэтому мы можем только вычислить концентрацию акцепторов, необходимую для образования наблюдаемого хвоста плотности состояний, и посмотреть, насколько она разумна.

Вторая причина состоит в том, что формула (3.18) представляет асимптотическое выражение, справедливое при $\epsilon/E_h \gg 1$. В экспериментах, о которых идет речь, наблюдалась область $\epsilon/E_h < 5$. Этого явно недостаточно, чтобы считать заряд ядра непрерывной переменной (см. раздел б) гл. 3). Тем не менее из (3.18) можно получить порядковую оценку. В наблюдаемой области зависимость (3.18) от ϵ мало отличается от линейной. Для вычисления Δ_0 можно воспользоваться следующей формулой:

$$\frac{1}{\Delta_0} = -\frac{d \ln K(\Delta)}{d\Delta} = \frac{1}{E_h} \left\{ 1 + \frac{1}{4} \ln \left[\frac{16D(4E_h)}{N_A a_h^3} \right] \right\}. \quad (4.14)$$

(Мы положили здесь $\epsilon/E_h = 4$. Так как зависимость близка к линейной, производная слабо зависит от выбора точки.) Расчет по формуле (4.14) с $a_h = 30 \text{ \AA}$ дает $\Delta_0 = 9,1 \text{ мэв}$ при $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $\Delta_0 = 12,3 \text{ мэв}$ при $N_A = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и $\Delta_0 = 20,3 \text{ мэв}$ при $N_A = 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Эти результаты согласуются с экспериментальными данными, представленными на рис. 11, если предположить, что концентрация акцепторов в образцах растет с увеличением концентрации доноров и сравнима с ней по порядку величины.

Указанием на роль акцепторов в формировании хвоста коэффициента поглощения является значительный разброс точек на рис. 11. Так, для

*) Температура замораживания диффузии в *n*-GaAs порядка 900° К. Оценки показывают, что в рассматриваемой области энергий корреляция в распределении примесей не приводит к замене (3.18) на (3.72).

двух образцов с одинаковой концентрацией электронов, равной $6,8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ в работах Панкова³⁸ и Хилла⁴⁰, получены Δ_0 , отличающиеся на 30%. Такой разброс вряд ли можно объяснить погрешностями экспериментов. Правда, эксперимент Панкова был сделан при 5° К , а Хилла при 78° К . Однако ясно, что при равных условиях $\Delta_0(5^\circ \text{ К}) \leq \Delta_0(78^\circ \text{ К})$, а в этом случае наблюдалось обратное неравенство. Поэтому можно предположить, что использованные в³⁸ образцы были более компенсированными.

С этой точки зрения интересно обсудить результаты Вонга (см. ⁴¹). Экспериментальные кривые, полученные при 77° К , представлены на рис. 7. Найденные нами с помощью этой кривой Δ_0 приведены в таблице. Номера образцов соответствуют номерам на рис. 7.

№	1	4	5	8	9	11	13
$n, \text{ см}^{-3}$	$2 \cdot 10^{18}$	$2 \cdot 10^{17}$	$5,3 \cdot 10^{17}$	$1,2 \cdot 10^{18}$	$1,6 \cdot 10^{18}$	$3,1 \cdot 10^{18}$	$6,5 \cdot 10^{18}$
$\Delta_0, \text{ мэв}$	2,6	4,3	4,6	5,7	6,3	6,6	6,6

Прежде всего привлекает внимание, что при увеличении легирования Δ_0 стремится к $6,6 \text{ мэв}$ и не зависит от концентрации. Это значение Δ_0 , безусловно, температурного происхождения, так как $T = 6,6 \text{ мэв}$ (77° К). Из того, что таким наклоном обладают только достаточно легированные образцы, а у слабо легированных наклон гораздо круче, следует, что это не переходы с поглощением фононов, а температурное размытие порога Мосса — Бурштейна. Связанный с этим сдвиг кривых поглощения четко виден на рис. 7. Заметим теперь, что у образца № 13, например, концентрация доноров не меньше, чем $6,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, и, следовательно, по формуле (2.13) величина γ не меньше, чем 38 мэв , что гораздо больше T . Это подтверждает точку зрения о том, что флуктуация концентрации доноров не создает хвоста коэффициента поглощения в вырожденном $n\text{-GaAs}$. Из эксперимента Вонга следует также, что характерная энергия хвоста валентной зоны в его образцах №№ 11—13 была меньше, чем $6,6 \text{ мэв}$, иначе коэффициент поглощения воспроизводил бы этот хвост, а не тепловое размытие уровня Ферми. С другой стороны, в эксперименте Панкова при $T = 5^\circ \text{ К}$ на образце с близкой концентрацией электронов ($6,8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) наблюдалась величина $\Delta_0 = 19 \text{ мэв}$. Этот факт также можно объяснить, предполагая, что хвост КМПС формируется акцепторами и что образцы работы³⁸ были более компенсированными.

Итак, единственную возможность объяснения экспериментальных данных в $n\text{-GaAs}$ мы видим в гипотезе о том, что хвост КМПС возникает за счет акцепторов. К сожалению, известные нам эксперименты не дают решающего доказательства этой гипотезы. Данные, относящиеся к другим полупроводникам, значительно беднее, и их анализ дает мало информации¹³. Первоочередная задача в этой области состоит, на наш взгляд, в экспериментальном выяснении роли неосновных примесей в формировании хвоста КМПС. Если обсуждавшаяся выше гипотеза подтвердится, потребуются новые теоретические исследования, имеющие целью численный расчет КМПС в области не очень больших дефицитов кванта.

Автор пользуется случаем выразить благодарность Б. И. Шкловскому за многочисленные обсуждения затронутых здесь вопросов.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В. Л. Бонч-Бруевич, сборник «Физика твердого тела», М., Изд. ВИНТИ, 1965.
2. N. F. Mott, W. D. Twose, Adv. Phys. 10, 107 (1961) (см. перевод: УФН 79, 691 (1963)).
3. N. F. Mott, *ibid.* 16, 49, 1967 (см. перевод: Н. Мотт, Электроны в неупорядоченных структурах М., «Мир», 1969).
4. И. М. Лифшиц, УФН 83, 617 (1964).
5. А. И. Ансельм, Введение в теорию полупроводников, М., Физматгиз, 1962, стр. 132.
6. С. Чандрасекар, Стохастические проблемы в физике и астрономии, М., ИЛ, 1947, стр. 19.
7. Е. О. Кане, Phys. Rev. 131, 79 (1963).
8. Л. В. Келдыш, Докт. диссертация (ФИАН, 1965).
9. М. И. Дуакопов, A. L. Efros, D. L. Mitchell, Phys. Rev. 180, 813 (1969).
10. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., Физматгиз, 1962, стр. 255.
11. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ЖЭТФ 61, 816 (1971).
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Статистическая физика, М., «Наука», 1964, § 33.
13. А. Л. Эфрос, Докт. диссертация (ФТИ АН СССР, 1971).
14. А. Л. Эфрос, ЖЭТФ 59, 880 (1970).
15. В. I. Halperin, M. Lax, Phys. Rev. 148, 722 (1966).
16. В. I. Halperin, M. Lax, *ibid.* 153, 802 (1967).
17. J. Zittartz, J. S. Langer, *ibid.* 148, 741 (1966).
18. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ 53, 743 (1967).
19. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ФТП 4, 305 (1970).
20. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ЖЭТФ 58, 657 (1970).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963, стр. 291.
22. Г. Бете, Э. Солпитер, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, М., Физматгиз, 1960, стр. 163.
23. Л. В. Келдыш, Г. П. Прошко, ФТТ 5, 3378 (1963).
24. А. А. Рогачев, Н. И. Саблина, ФТТ 8, 866 (1966).
25. М. И. Дуакопов, A. L. Efros, D. L. Mitchell, Phys. Rev. 180, 819 (1969).
26. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, ЖЭТФ 59, 1343 (1970).
27. D. Redfield, Phys. Rev. 130, 916 (1963).
28. М. А. Афронович, Д. Редфилд. Труды IX Международной конференции по физике полупроводников, т. 1, Л., «Наука», 1969, стр. 103.
29. J. D. Dow, D. Redfield, Phys. Rev. B1, 3358 (1970).
30. J. D. Dow, D. Redfield, *ibid.* B5, 594 (1972).
31. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ 34, 1138 (1958).
32. W. Franlz, Zs. Naturforsch. 13a, 484 (1958).
33. См. ⁶, стр. 130.
34. J. D. Dow, Comm. Sol. State Phys. 4, 35 (1972).
35. I. A. Merkulov, V. I. Perei, Phys. Lett. (1973).
36. V. L. Bonch-Bruевич, Phys. Stat. Sol. 42, 35 (1970).
37. И. А. Меркулов, В. И. Перель, ФТП 7, 1197 (1973).
38. J. I. Rankove, Phys. Rev. A140, 2059 (1965).
39. а) W. J. Turner, W. E. Reese, J. Appl. Phys. 35, 350 (1964); б) C. M. Chang, Stanford Electronics Laboratories Technical Report No. 5064-2; в) G. Lucovskiy, Appl. Phys. Lett. 5, 37 (1964).
40. D. E. Hill, Phys. Rev. A133, 866 (1964).
41. C. J. Hwang, J. Appl. Phys. 40, 3731 (1969).