

4. Рыбалов Е.А., Солнцева Р.К., Степанова И.В. О загустителях для водонаполненных взрывчатых веществ. — М.: Недра, 1975 — С. 163–166.

© Лебедева Е.А., Галиакберова Ф.Н., Праздникова Т.Н., Деньга В.В., 2005

УДК 539.2

Канд. физ.-мат. наук. ЩЕРБАК Я.Я. (ДонНТУ)

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НЕОДНОРОДНЫХ ИЗОВАЛЕНТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ РАСТВОРОВ

Свойства полупроводниковых материалов с неоднородным распределением примесных центров в значительной степени отличаются от свойств, которые предсказывает теория для материалов с однородным их распределением. Происходит, например, размытие края оптического поглощения, уширение полос излучения, изменение характера зависимости коэффициента поглощения света от частоты [1,2].

Влияние крупномасштабных флуктуаций состава твердого раствора на спектр «мелких» центров, а также свойства макронеоднородных систем изучались в работах [2,3].

В реальных полупроводниковых системах преобладающими будут мелкомасштабные флуктуации состава, обусловленные взаимодействием примесных центров между собой и с атомами исходного соединения, а также технологическими причинами [4]. Размеры таких флуктуаций порядка длины волны электрона, т.е. реализуется микронеоднородное распределение примесных центров.

В модели направленной кристаллизации, например, распределение концентрации можно представить в виде [5]

$$x(g) = kx_0(1-g)^{k-1}, \quad (1)$$

здесь $x(g)$ — концентрация примеси в той части твердой фазы, где закристаллизовалась доля g расплава; x_0 — исходная концентрация примеси в расплаве; k — коэффициент распределения, равный отношению концентрации примеси в твердой и жидкой фазах у границы раздела.

Локальная плотность состояний, как функция энергетического параметра ω и концентрации $x(g)$, может быть представлена в виде:

$$\rho_0(\omega, x(g)) = \rho_1(\omega, x(g)) + \rho_2(\omega, x(g)),$$

где ρ_1 представляет плотность состояний в области «хвоста» зоны; ρ_2 — плотность токовых состояний в однородном растворе с концентрацией $x(g)$.

Согласно [6] для изовалентных растворов у границы плотности токовых состояний:

$$\rho_2(\omega, x) = \frac{2(m(x))^{3/2}}{4\pi^2} (\omega - E(x))^{1/2},$$

здесь $E(x)$ — граница состояний, $m(x)$ — эффективная масса носителей. Зависимость последней от x связана с изменением постоянной решетки при введении примеси.

Для ρ_1 воспользуемся соотношением [7]:

$$\rho_1(\omega, x(g)) \approx \exp(\lambda(\omega - E')^{-\frac{3}{2}} \ln(x(g))),$$

где E' — истинная граница спектра, $\lambda > 0$.

Тогда усредненное по распределению (1) значение плотности состояний в области «хвоста» при $k > 1$ будет равно:

$$\rho_1(\omega) = \int_0^1 \rho_1(\omega, x(g)) dg \approx \frac{\exp(\lambda(\omega - E')^{-\frac{3}{2}} \ln kx_0)}{1 + \lambda(\omega - E')^{-\frac{3}{2}}(k-1)},$$

т.е. характер зависимости от ω практически не изменяется.

В случае, когда $k > 1$ (жидкая фаза в процессе затвердения обогащается примесью), производя в (1) замену x на $(1-x)$ и k на k' (теперь уже $k' > 1$) для $\rho_1(\omega)$ получим:

$$\rho_1(\omega) = (\omega - E')^{\frac{3}{2(k'-1)}} \cdot \varphi(k'), \quad (2)$$

Из соотношения (2) следует, что при $k < 1$ плотность состояний в окрестности истинной границы спектра перестает быть экспоненциально малой ($\varphi(k') \approx 1$).

Усреднение по распределению (1) величины $\rho_2(\omega, x(g))$ произведем в предположении, что

$$m^*(x) = m_0 + x(m_1^* - m_0^*);$$

$$E(x) = E_0 + x(E_1 - E_0),$$

где m_0^*, E_0, m_1^*, E_1 — эффективные массы носителей и положения границы токовых состояний при $x = 0$ и $x = 1$ соответственно.

$$\begin{aligned} \rho_2(\omega) &= \int_0^1 \rho_2(\omega, x(g)) dg = \\ &= \int_0^1 \frac{[2(m_0^* + kx_0(1-g)^{k-1}(m_1^* - m_0^*))J]^{\frac{3}{2}} [\omega - E_0 - kx_0(1-g)^{k-1}(E_1 - E_0)]^{\frac{1}{2}} dg}{4\pi^2} \end{aligned} \quad (2)$$

Вычисление этого интеграла для произвольных k может быть проведено только численно (в реальных системах k изменяется в пределах от 10^{-1} до 10)

Для системы $GaAs:P$, например, k близко к 2, а $|m_1^* - m_0^*|x \ll m_0^*$. В этом случае ($k = 2$) из (2) следует, что в окрестности границы токовых состояний плотность состояний $\approx (\omega - E_0)^{\frac{3}{2}}$, причем граница состояний сохраняется. Ее сдвиг определяется знаком величины $(E_1 - E_0)$.

Рассмотрим влияние неоднородности состава раствора, обусловленные малыми флуктуациями состава (случай, например, распадающегося твердого раствора) на функцию плотности состояний вблизи границы токовых состояний.

Пусть локальный состав раствора изменяется в пределах от x_0 до $x_0 + \Delta x$ ($\Delta x \ll x_0$).

Тогда усредненная плотность состояний равна:

$$\rho(\omega) = \int_{x_0}^{x_0+\Delta x} F(x)(\omega - E(x))^{1/2} dx,$$

здесь $F(x)$ — функция, определяемая характером распределения примеси и эффективной массой $m^*(x)$.

В растворах $ZnS : ZnSe$; $GaP : AlP$; $AlSb : ZnSb$ [8] ширина запрещенной зоны с изменением состава изменяется по линейному закону:

$$E(c) = \omega_0 + E_1 c, \quad (3)$$

где $c = x - x_0$, $\omega_0 = E(x_0)$.

С учетом (3) усредненная плотность в этом случае имеет вид:

$$\rho(\alpha) = \int_0^{c(\alpha)} F(c)(\alpha - E_1 c)^{1/2} dc, \quad (4)$$

где $\alpha = \omega - \omega_0$, а верхний предел определяется из условия положительной определенности величины $\alpha - E_1 c$.

Из (4) для $\rho(\alpha)$ - имеет:

$$\rho(\alpha) = F\left(\theta \frac{\alpha}{E_1}\right) \cdot \frac{2}{3E_1} \alpha^{3/2}, \quad (0 < \theta < 1),$$

откуда следует, что при $\alpha \rightarrow 0$ (т.е. вблизи границы со стороны токовых состояний) $\rho(\alpha) = \rho(\omega - \omega_0) \approx (\omega - \omega_0)^{3/2}$.

Аналогичный характер зависимости $\rho(\alpha)$ имеет место и для квадратичной зависимости ширины щели от состава ($ZnS : ZnTe$; $ZnSe : ZnTe$; $HgTe : CdTe$; $GaAs : ZnAs$; $GaAs : GaP$ ($x_0 > 0,5$)).

Если на кривой $E(c)$ есть экстремум, то вблизи экстремума асимптотическое поведение $\rho(\alpha)$ при $\alpha \rightarrow 0$ имеет вид $\rho(\alpha) \approx \alpha = \omega - \omega_0$.

$$(GaAs : GaSb(x_0 = 0,2), GeTe : PbTe(x_0 = 0,4), ZnS : ZnTe(x_0 = 0,8),$$

$$ZnSe : ZnTe(x_0 = 0,6)).$$

Изменения характера зависимости плотности токовых состояний вблизи края зоны, обусловленное флуктуациями состава раствора, должно проявиться, например, на спектральных зависимостях краевого поглощения и излучения.

Так в работе [9] при изучении краевого поглощения в сплаве $Bi : Sb$ было обнаружено, что коэффициент поглощения пропорционален $(\omega - \omega_0)^{3/2}$, а не $(\omega - \omega_0)^{1/2}$, как ожидалось для прямых междузонных переходов. Аналогичный вывод о характере краевого поглощения в растворе $AlGa : AlAs$ может быть сделан на основании данных, полученных в [10].

Полученные в работе результаты о характере зависимости $\rho(\omega - \omega_0)$ могут быть использованы как при интерпретации экспериментальных результатов иссле-

дования кинетических характеристик таких систем, так и при разработке новых систем с заранее прогнозируемыми свойствами.

Библиографический список

1. **Петросян С.Г., Шик А.Я.** Фотопроводимость неоднородных полупроводниковых твердых растворов. — Письма в ЖЭТФ, 1982. — Т. 35. — №9. — С. 357–359.
2. **Артеменко С.Н., Шульман А.Я.** Влияние плавных флуктуаций состава полупроводникового твердого раствора на форму края собственного поглощения. — Письма в ЖЭТФ, 1974. — Т. 19. — вып. 3. — С. 145–149.
3. **Шлимак Н.С., Эфрос А.Л., Янгев Н.Я.** Исследования роли флуктуаций состава в твердых растворах $Ge:Si$, ФТП, 1977. — Т. 11. — Вып. 2. — С. 257–261.
4. **Фистуль В.Н.** Распад пересыщенных полупроводниковых твердых растворов. — М.: Металлургия, 1977. — 240 с.
5. **Пфани В.Г.** Зонная плавка. — М.: Металлургия, 1970. — 336 с.
6. **Захаров А.Ю., Иванченко Ю.М.** Теория электропроводности неупорядоченных сплавов. — ФНТ. — Т. 4. — Вып. 1. — С. 41–53.
7. **Лифшиц Н.М.** О структуре энергетического спектра и квантовых состояниях неупорядоченных конденсированных систем. — УФН, 1964. — Т. 83. — Вып. 4. — С. 617–663.
8. **Твердые растворы в полупроводниковых системах.** (Справочник). — М.: Наука, 1978. — 198 с.
9. **Абдуллаев А.А., Алексеева В.Е., Заец Н.Ф. и др.** Оптические свойства сплавов висмут-сурьма. — Письма в ЖЭТФ, 1973. — Т. 17. — Вып. 6. — С. 292–293.
10. **Зембатов Х.Б., Кравченко А.Ф., Машуков Ю.П.** Край поглощения варизонных эпитаксиальных пленок $Al_xGa_{1-x}As$. ФТП, 1975. — Т. 9. — № 7. — С. 1314–1318.

© Щербак Я.Я., 2005

УДК 539.2

Канд. физ.-мат. наук. ЩЕРБАК Я.Я. (ДонНТУ)

СТРУКТУРА КРАЯ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ В ИЗОВАЛЕНТНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

В технике для изменения электрофизических свойств материалов в нужную сторону широко применяют легирование их различными примесями. Примеси оказывают влияние на закон дисперсии электронов — происходит как изменение границ и структуры спектра исходного материала, так и возникновение дополнительных уровней и зон в его запрещенной зоне.

В последнее время возрос интерес к легированию полупроводников изоэлектронными примесями, в особенности таких как Si , Ge , полупроводниковых соединений A^3B^5 , A^2B^6 и др. Такое легирование позволяет плавно изменять их свойства (например, ширину запрещенной зоны), что очень важно для промышленного применения таких материалов.

В работе [1] показано, что в некоторых случаях (8 из рассмотренных 47) примеси изовалентного замещения могут привести к появлению в запрещенной зоне исходного соединения локальных уровней, из которых при повышении концентрации примеси формируется примесная зона. Даже если таковых и не возникает, то вблизи краев зон могут возникать, так называемые, флуктуационные уровни, приводящие к появлению «хвостов» зон.

Наряду с образованием примесной зоны и «хвостов» зон, примеси могут привести к существенной перестройке зон исходного (беспримесного) кристалла.