

УДК 537. 311. 322

А.М. Король,
д-р фіз.-мат. наук, проф.
Національний університет
харчових технологій

**ВПЛИВ ДОМІШКОВОЇ ЗОНИ
НА ПОЛОЖЕННЯ ГЛІБОКОГО
РІВНЯ В СИЛЬНОЛЕГОВАНИХ
НАПІВПРОВІДНИКАХ ТИПУ $A_3 B_5$.**

Розглядається сильнолегований мілкими домішками напівпровідник, в якому є також глибокий домішковий центр; потенціал останнього задається моделлю Слетера-Костера. Показано, що положення глибокого рівня в даній системі істотно відрізняється від його положення в нелегованому напівпровіднику. Конкретний розрахунок проведено для напівпровідників типу $A_3 B_5$ (використано кейнівський закон дисперсії).

Ключові слова: напівпровідники, глибокі рівні, домішкова зона, функції Гріна, схема Кейна

Як відомо, аналізуючи вольт-амперні та інші характеристики тунельних діодів, необхідно врахувати вплив на них глибоких електронних станів. При цьому слід мати на увазі, що положення глибокого рівня тієї самої природи (наприклад, домішкової) в нелегованому та сильнолегованому напівпровіднику є різним. В даній роботі розраховується середня величина зсуву глибокого рівня за рахунок сильного легування в напівпровідниках типу $A_3 B_5$.

Провести зазначений розрахунок можна, знаючи функцію Гріна системи: сильнолегований напівпровідник — глибокий центр. Для того, щоб знайти цю функцію, запишемо для неї відповідне рівняння Дайсона:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = G_o(\vec{r}, \vec{r}') + \int d\vec{r}'' G_o(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}'') G(\vec{r}'', \vec{r}') \quad (1)$$

де $G_o(\vec{r}, \vec{r}') = G_c(\vec{r}, \vec{r}') + G_s(\vec{r}, \vec{r}')$, $G_c(\vec{r}, \vec{r}')$ — функція Гріна електронів зони провідності, — $G_s(\vec{r}, \vec{r}')$ — функція Гріна домішкової зони, $U(\vec{r})$ — потенціал глибокого центра. Використаємо для останнього модель Костера — Слетера [1] в к — представленні:

$$\langle \vec{n} \vec{k} | U(\vec{r}) | n' \vec{k}' \rangle = U_0 \delta_{nn'} \quad (2)$$

Представимо рівняння (1) в матричному вигляді

$$\begin{aligned} \langle \vec{k} | G(\vec{r}, \vec{r}') | \vec{k}' \rangle &= \langle \vec{k} | G_o(\vec{r}, \vec{r}') | \vec{k}' \rangle + \int d\vec{k}'' d\vec{k}''' \langle \vec{k} | G_o(\vec{r}, \vec{r}'') | \vec{k}''' \rangle \langle \vec{k}''' | U(\vec{r}'') | \vec{k}' \rangle \times \\ &\times \langle \vec{k}''' | G(\vec{r}', \vec{r}') | \vec{k}' \rangle \end{aligned} \quad (3)$$

де

$$L_{kk'} = \langle \vec{k} | L(\vec{r}, \vec{r}') | \vec{k}' \rangle = \iint d\vec{r} d\vec{r}' e^{-i\vec{k}\vec{r}} L(\vec{r}, \vec{r}') e^{i\vec{k}'\vec{r}'} \quad (4)$$

Із врахуванням (2) рівняння (3) перетворюється до вигляду:

$$G_{kk'} = G_{okk'} + U_0 \int dk''' G_{okk''} \int dk'' G_{k''k'} \quad (5)$$

Це рівняння розв'язується стандартним способом [2] і дає такий результат:

$$G_{kk'} = G_{okk'} + U_0 \frac{\int dk'' G_{okk''} \int dk G_{okk'}}{1 - U_0 \int dk dk' G_{okk'}} \quad (6)$$

Нарешті, власні значення енергії — положення глибокого рівня — є розв'язком алгебраїчного рівняння:

$$U_0^{-1} = \int dk dk' (G_{chh'} + G_{shh'}) \quad (7)$$

Функція Гріна для сильнолегованого напівпровідника в залежності від параметрів, що його описують, знайдена в роботі [3]. Скористаємося результатом розрахунків [3] для одного з найважливіших випадків, а саме для випадку гаусового розподілу домішок, здійснених в наближенні лінійного екронування домішок; тоді рівняння для визначення енергії запишеться так (в атомних одиницях):

$$U_0^{-1} = \int \frac{d^3 k}{E - E_c(k) + i\delta} - \frac{e}{\gamma\sqrt{\pi}} \int \frac{d^3 k d\phi \exp(-e^2 \phi^2 \gamma^{-2})}{E - \frac{k^2}{2m^*} + e\gamma + i\delta} \quad (8)$$

де $E_c(k)$ — закон дисперсії для зони провідності, k і m^* — квазіімпульс та ефективна маса електронів зони провідності відповідно, γ — сумарний потенціал, створюваний всіма домішками із врахуванням електронного екронування, γ^2 — подвоєний середній квадрат потенціальної енергії електрона, e — заряд електрона. Другий доданок в правій частині рівняння (8) відноситься до домішкової зони.

Конкретні розрахунки проведемо для напівпровідника *GaAs* з кейнівським законом дисперсії [4], для якого

$$k^2(E) = \frac{E(E + E_g)}{p^2 - a(E + E_g)} \quad (9)$$

причому $p = 1,07$, $a = 13$, E_g — ширина забороненої зони (атомні одиниці, див. [5]). Крім того, скористаємося одним з наближень роботи [3], а саме $|E| >> \gamma$, ($E < 0$). В цьому випадку, обчислюючи інтегали в формулі (8) (другий методом перевалу), одержимо таке рівняння для енергії E :

$$V = \frac{K^3}{3(|E| - \frac{p^2 - aE_g}{a})} - 2m^*(K - \sqrt{2m^*|E|} \operatorname{arctg} \frac{K}{\sqrt{2m^*|E|}}), \quad (10)$$

тут другий і третій доданки відносяться до домішкової зони, K — радіус сфери, що за об'ємом дорівнює першій зоні Брилюена, V — перенормований (із врахуванням інтегрування по кутових координатах) «потенціал» глибокого центра. Його величину знайдемо, задаючись конкретним значенням $E = E_r$, з рівняння

$$V = \frac{K^3}{3(E_r - \frac{p^2 - aE_g}{a})}, \quad (11)$$

в якому не враховується домішкова зона. Тепер, повертаючись до рівняння (10), знаходимо зсув глибокого рівня за рахунок домішкової зони ΔE_r . Для прийнятих

значень параметрів задачі розрахунок дає $\Delta E_r \approx 0,06 \text{ eV}$ для $E_r = 0,1 \text{ eV}$ і $\Delta E_r \approx 0,05 \text{ eV}$ для $E_r = 0,5 \text{ eV}$, тобто існування домішкової зони приводить до велими істотного зниження глибокого рівня. Зазначимо, що прийняті в даній роботі наближення мають достатній ступінь загальності, а використана в конкретних розрахунках кейнівська схема добре описує зонну структуру напівпровідників типу A_3B_5 .

Висновки. Таким чином, дана робота свідчить про те, що при розгляді електронних процесів в тунельних діодах необхідно враховувати факт істотного зсуву глибокого рівня за рахунок домішкової зони.

ЛІТЕРАТУРА

1. Koster G.F., Slater I.C. The model potential for impurity centers in semiconductors // Phys. Rev. 1954. — Vol. 95. — P.1167—1174 .
2. Каллумай Дж. Теория энергетической зонной структуры. — Москва: Мир. 1969. — С. 420
3. Эфрос А.Л. Примесная зона в сильнолегированных полупроводниках // ЖЭТФ. 1970. — Т.59. — С.880 — 887.
4. Kane E.O. The band structure of some semiconductors // J. Phys. Chem. Sol. 1957. — Vol.1. — P. 249 — 259.
5. Шека Д.И., Шека В.И., Король А.Н. Диэлектрическая функция узкозонных полупроводников // ФТТ. 1977. — Т.19. — С. 3155 — 3162.

A. Король

Влияние примесевой зоны на положение глубокого уровня

в сильнолегированных полупроводниках типа A_3B_5

Рассматривается сильнолегированный мелкими примесями полупроводник, в котором существует также глубокий примесный центр; потенциал последнего задается моделью Слэтера-Костера. Показано, что положение глубокого уровня в данной системе существенно отличается от его положения в нелегированном полупроводнике. Конкретный расчет проведен для полупроводников типа A_3B_5 (использован кейновский закон дисперсии).

Ключевые слова: полупроводники, глубокие уровни, примесная зона, функции Грина, схема Кейна.

A. Korol

The effect of impurity band on the location of the deep level

in the heavily doped semiconductors of A_3B_5 type

We consider the heavily doped by shallow impurities semiconductor which contains the deep impurity centre as well. The interaction between the shallow impurities band and the deep impurity level is evaluated. The analysis is based on the solution of the Dyson equation. It allows for determination of the Green function for a system: heavily doped semiconductor — deep centre. The Green function for an impurity band is found elsewhere. The Koster — Slater model for a deep state is used in κ — representation. Using the above scheme one can obtain the algebraic equation for the eigenvalues of the problem considered. Special calculations were carried out for the GaAs semiconductor where Kane dispersion law was explored. It is shown that the location of the deep level in the system under consideration differs significantly from its location in the undoped semiconductor.

Key words: semiconductors, deep levels, impurity band, Green functions, Kane's scheme.

e-mail: jimp@ukr.net

Надійшла до редколегії 10.03.2012 р.