

локализованных на различных (в основном соседних) атомах примеси, и примесный уровень «размывается» в примесную зону (§ IV.7). Об этом эффекте говорят как о *квантовом уширении уровней*.

Полупроводники, в которых образовалась примесная зона, отделенная запрещенными участками как от валентной зоны, так и от зоны проводимости, называют *промежуточно легированными*.

В германии, легированном донорами V группы, эффекты, связанные с образованием примесной зоны, становятся экспериментально заметными при $N_i \simeq 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

При дальнейшем увеличении концентрации примеси примесная зона продолжает расширяться и в конце концов сливается (в образце *n*-типа) с зоной проводимости (рис. 19.1, в). Энергия активации примеси при этом обращается в нуль. В таком материале уже нельзя проводить четкое различие между зоной проводимости и примесной: имеется единая область дозванных значений энергии, проникающая в глубь запрещенной зоны*). Эту область мы тоже будем называть «примесной».

Полупроводник, в котором примесная зона слилась с ближайшей к ней «собственной» зоной кристалла, называется *сильно легированным*.

Более тщательное исследование (см. ниже § 2) показывает, что даже при легировании примесью только одного типа новая область спектра возникает у обеих собственных зон кристалла. Компенсация приводит лишь к расширению этой области и к очевидному смещению уровня Ферми (рис. 19.1, г).

§ 2. Особенности сильно легированных полупроводников

Две особенности сильно легированных полупроводников видны непосредственно из рис. 19.1, в, г.

Во-первых, в некомпенсированном материале уровень Ферми попадает в дозвленную область энергий: в сильно легированном некомпенсированном полупроводнике имеет место вырождение газа основных носителей заряда. По этой причине такие материалы часто называют вырожденными.

Во-вторых, в сильно (и промежуточно) легированном материале взаимодействие электронов и дырок с примесями играет двойную роль: формируя определенные участки энергетического спектра системы, оно вместе с тем обуславливает и рассеяние носителей заряда (в том числе и тех, которые движутся в «примесных» областях спектра). С другой стороны, в условиях слабого легирования это взаимодействие играет альтернативную роль: оно либо создает

*) Здесь и в аналогичных случаях в дальнейшем термины «запрещенная зона», «эффективная масса» и т. д. относятся к соответствующему нелегированному полупроводнику.

локальные уровни, находясь на которых электроны и дырки сами не участвуют в явлениях переноса (исключая прыжковую проводимость), либо вызывает рассеяние свободных носителей заряда, находящихся в зонах проводимости и валентной. При этом на структуру указанных зон взаимодействие электронов и дырок с ионами примеси практически не оказывает влияния.

Третья особенность сильно легированных полупроводников связана с обстоятельством, характерным для всех явлений, в которых играет роль взаимодействие носителей заряда с примесными атомами. Как отмечалось в гл. XIV, наблюдаемые на опыте величины представляют собой результат некоторого усреднения по координатам атомов примеси (о совокупности этих координат говорят как о конфигурации примеси). Действительно, из-за флуктуаций в распределении примеси ее конфигурация в разных частях образца оказывается несколько различной; выполняя измерения, мы тем самым производим усреднение по конфигурациям. Именно поэтому экспериментальные данные, относящиеся к электрическим, оптическим и другим характеристикам вещества, оказываются связанными не с координатами каждого из атомов примеси, а лишь с такими величинами, как средняя их концентрация. Чтобы ввести операцию усреднения в аппарат теории, удобно рассматривать координаты примесных атомов как случайные величины и задавать не точные их значения, а лишь вероятность того или иного распределения примеси в пространстве. Этот подход точно соответствует той информации, которой мы фактически располагаем: координаты атомов примеси в опыте не заданы, а о характере их распределения судить можно.

Возможность — и необходимость — такой статистической постановки задачи связана с тем, что в рассматриваемых материалах не имеет места полное термодинамическое равновесие. Действительно, при полном равновесии реализовалось бы упорядоченное распределение примеси, отвечающее условию минимальности свободной энергии системы. Для этого, однако, примесные атомы должны продиффундировать из тех мест, куда они случайно попали при легировании, в положения равновесия. При обычных температурах этот процесс идет очень медленно и распределение примеси остается случайным.

Статистическая постановка задачи о взаимодействии носителей заряда с примесными атомами уже использовалась нами в § XIV.5. Там, однако, операция усреднения носила тривиальный характер, сводясь просто к умножению вероятности рассеяния одним атомом примеси на полное их число. Дело в том, что в условиях слабого легирования (1.1) в каждый данный момент электрон, как правило, взаимодействует только с одним из атомов примеси. При этом энергия взаимодействия остается всегда одной и той же, несмотря на случайный характер распределения примеси в пространстве

(рис. 19.2, а). При промежуточном и, особенно, сильном легировании положение меняется: потенциальная энергия носителя заряда зависит уже от координат сразу нескольких атомов примеси и потому становится случайной величиной (рис. 19.2, б). Силовые поля, характеристики которых заданы только статистически, называются случайными.

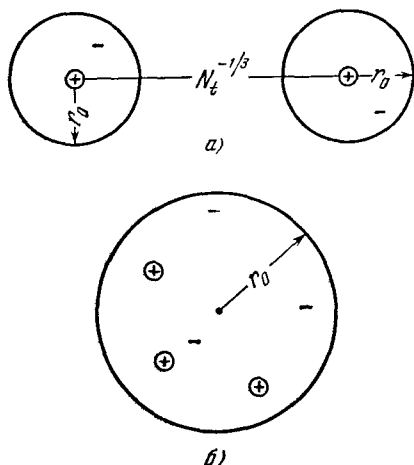


Рис. 19.2. Случайное распределение примеси и случайный характер потенциальной энергии. а) Слабое легирование: распределение примеси случайно, но потенциальная энергия электрона в поле примеси не случайна. Символом «+» обозначены атомы примеси, символом «-» — электроны. б) Промежуточное и сильное легирование: случайное распределение примеси приводит к случайному характеру потенциальной энергии электрона. Символом «+» обозначены атомы примеси, символом «-» — электроны.

Итак, третья особенность сильно (и промежуточно) легированных полупроводников состоит в том, что носители заряда в них движутся в случайном поле примеси. Это поле представляет собой совокупность случайно расположенных трехмерных потенциальных ям и горбов случайной высоты и формы (см. ниже рис. 19.5). Ямы можно наглядно представлять себе как результат случайных скоплений примесных ионов в областях, линейные размеры которых меньше r_0 ; горбам соответствуют области обеднения. Такие скопления иногда называют *кластерами* *).

Случайное поле рассматриваемого типа (даже при одном типе примеси) действует на носители заряда обоих знаков. Действительно, потенциальная яма для электрона есть вместе с тем и потенциальный горб для дырки, и наоборот. Именно по

этой причине примесные области спектра возникают, вообще говоря, как у верхней, так и у нижней границы запрещенной зоны.

Четвертая особенность сильно (и промежуточно) легированных полупроводников вытекает из второй и третьей. Она состоит в том, что носители заряда в них, вообще говоря, нельзя характеризовать каким бы то ни было законом дисперсии $E(\mathbf{p})$ **. Действительно, квазиимпульс \mathbf{p} сохраняется и, следовательно, характеризует стационарные состояния электрона только в идеально периодиче-

*) Английское слово «cluster» означает «скопление».

**) В этом состоит одно из важных различий между примесной зоной и энергетической зоной в чистом материале.

ском поле. При наличии еще случайного поля происходит рассеяние, в результате которого квазиимпульс изменяется во времени. Иначе говоря, состояния с заданными значениями p оказываются нестационарными. В принципе так обстоит дело при любых процессах рассеяния. Однако, как мы увидим в § 3, в рассматриваемых материалах не при всех существенных значениях энергии электрона выполняется условие малости неопределенности энергии $\hbar/\tau(E)$ по сравнению с самой этой энергией:

$$\frac{\hbar}{\tau(E)} \ll E - E_c \quad (\text{для электронов})$$

или

$$\frac{\hbar}{\tau(E)} \ll E_v - E \quad (\text{для дырок}).$$

(2.1)

Между тем это условие необходимо для того, чтобы можно было рассматривать состояния с данным квазиимпульсом как почти стационарные (ср. § XIV.2). В условиях, когда неравенство (2.1) не выполняется, энергию взаимодействия, ответственного за столь малые значения времени релаксации, приходится принимать во внимание уже при определении энергетического спектра носителей заряда. В рассматриваемом сейчас случае речь идет о взаимодействии электронов и дырок со случайным полем. Этот фактор особенно важен в области энергий $E_v \leq E \leq E_c$: в отсутствие примеси там вообще нет дозволенных состояний. С другой стороны, по мере удаления от границы зоны проводимости вверх (или от границы валентной зоны вниз), когда растет полная энергия электрона или дырки, роль случайного поля должна постепенно ослабевать. При достаточно больших значениях разностей $E - E_c$ и $E_v - E$ условия (2.1) будут выполнены. Это означает, что достаточно глубоко в зонах проводимости и валентной представление о законе дисперсии носителей заряда вновь обретает приближенный смысл.

Наконец, пятая особенность сильно легированных полупроводников связана с ролью экранирования поля заряженных атомов примеси. Причины, обуславливающие эффект экранирования, могут быть различными: перераспределение свободных носителей заряда в пространстве (§ VI.7), преимущественное расположение отрицательно заряженных ионов примеси около положительных (при наличии компенсации) и т. д. Для нас сейчас существенны не причины эффекта, а следствия из него. Именно, как мы видели в XVII.8, при $r_0 \lesssim a_B$, экранирование приводит к исчезновению дискретных уровней, создаваемых примесным ионом. Согласно формулам (1.3а, б) именно такая ситуация может возникнуть в сильно легированных полупроводниках. Действительно, в отсутствие компенсации в названных материалах $n \simeq N_i$ и условие $r_0 \lesssim a_B$ достигается (в вырожденном материале) при $N_i \simeq a_B^{-3}$. Аналогичное —

по порядку величины — условие получается и для компенсированных полупроводников. Экранирование там может быть обусловлено, например, второй из указанных выше причин; при этом для оценки отношения r_0/a_B можно воспользоваться формулой (1.3а), заменяя в ней n на N_i , а температуру опыта T — на температуру, при которой примеси вводятся в решетку.

Очевидно, в условиях исчезновения примесных уровней не может возникнуть и примесная область спектра. Следует, однако, иметь в виду, что рассматриваемая сейчас задача отличается от изучавшейся в § XVII.8. Там исследовался энергетический спектр примесного атома при условии, что в образце уже создана (например, подсветкой) определенная концентрация экранирующих свободных носителей заряда. Здесь эти носители поставляются в основном самими атомами примеси. Предположив заранее, что все они ионизованы, мы действительно придем к выводу об исчезновении создаваемых ими локальных уровней. Если, однако, предположить, что электроны в некомпенсированном полупроводнике уже занимают примесные уровни, то эффект экранирования резко ослабнет: атомы примеси окажутся нейтральными, а число свободных зарядов будет невелико. Это означает, что мы не вправе заранее предполагать ни того, ни другого. Дело в том, что роль экранирования определяется концентрациями свободных носителей заряда и заряженных атомов примеси, а эти величины зависят от характера энергетического спектра системы — от того, существуют ли, и в каком количестве, примесные уровни. С другой стороны, сам энергетический спектр надо определять с учетом экранирования. Иначе говоря, энергетический спектр сильно легированного полупроводника следует определять самосогласованным путем.

В этом и состоит пятая особенность названных материалов. Она приводит к необходимости ставить задачу об энергетическом спектре сильно легированного полупроводника в рамках современной теории многих тел. Вообще говоря, это приводит к большим математическим трудностям. Избежать их удастся, лишь если какие-либо типы взаимодействия оказываются сравнительно несущественными. При этом важно заранее представить себе характер «самосогласованных» состояний. В связи с этим отметим два обстоятельства. В условиях, обратных (1.1), состояние, в котором все доноры заполнены электронами, не может быть самосогласованным — даже в отсутствие компенсации и при нулевой температуре. Действительно, при $N_i a_B^3 \gtrsim 1$ заведомо возникает примесная зона, т. е. наступает хотя бы частичная делокализация электронов, расположенных на примесных атомах, с неизбежным появлением эффекта экранирования.

Во-вторых, при $r_0 > N_i^{-1/3}$, $a_B > N_i^{-1/3}$ скопление ионов примеси, расстояние между которыми много меньше a_B , можно рассматривать как один «эффективный ион» с зарядом Ze . Энергия

ионизации электрона, захваченного таким ионом, есть $Z^2 E_B$, а характерный «радиус орбиты» равен a_B/Z . Он может оказаться меньше r_0 даже в условиях сильного легирования. Далее, вероятность образования кластера тем меньше, чем больше в нем ионов. Следовательно, при достаточно большом значении Z среднее расстояние между кластерами будет значительно больше $N_i^{-1/3}$; оно может заметно превысить и «радиус орбиты» a_B/Z . Таким образом, «эффективные ионы» с достаточно большими значениями Z могли бы создавать дискретные локальные уровни, даже когда обычные донорные уровни исчезают. Чтобы эта возможность осуществилась, энергия ионизации должна быть меньше ширины запрещенной зоны *):

$$Z^2 E_B < E_g. \quad (2.2)$$

У таких полупроводников, как германий, кремний, арсенид галлия и др., отношение E_g/E_B составляет $70 \div 100$. Поэтому допускаемые неравенством (2.2) значения Z могут удовлетворять поставленным выше условиям; при этом взаимодействие кластеров друг с другом и с отдельными ионами примеси приводит лишь к классическому уширению уровней.

При $r_0 \gg N_i^{-1/3}$ дискретные уровни могут возникать и в достаточно глубоких потенциальных ямах, созданных совокупным действием многих не слишком близких друг к другу ионов примеси. Отличие их от уровней, создаваемых «эффективными ионами», не принципиально: оно состоит лишь в зависимости энергии ионизации от параметров вещества.

Вывод о существовании дискретных локальных уровней в сильно легированном полупроводнике имеет принципиальное значение: оказывается, что при некоторых значениях энергий E'_c и E'_v в примесных областях происходит перестройка энергетического спектра электронов и дырок (рис. 19.3) **). При $E > E'_c$ ($E < E'_v$) состояния носителей заряда принадлежат непрерывному спектру, при

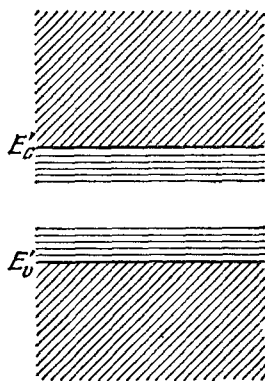


Рис. 19.3. Области непрерывного и дискретного спектров в сильно легированном полупроводнике. Горизонтальная штриховка указывает область дискретного спектра, косяя — непрерывного.

*) Принимая для E_B выражение (IV.7.7), т. е. пользуясь методом эффективной массы, мы должны поставить в (2.2) знак сильного неравенства. Однако дискретные уровни могут возникать и в условиях, когда метод эффективной массы уже неприменим.

***) Этот вывод представляет собой частный случай общего утверждения о перестройке спектра элементарных возбуждений в неупорядоченных системах [1].

$E'_v < E < E'_c$ — дискретному. Соответственно меняется и вид волновых функций: носители заряда, находящиеся в состояниях первого типа, можно с отличной от нуля вероятностью обнаружить в любой точке образца; в состояниях второго типа они локализованы вблизи соответствующих потенциальных ям. При изучении явлений переноса именно величины E'_c и E'_v надо рассматривать как границы запрещенной зоны.

§ 3. Иерархия энергий

В различных явлениях относительная роль носителей заряда различных энергий оказывается различной. Так, при вычислении уровня Ферми важен вклад электронов от всех возможных состояний; в явлениях переноса в вырожденном материале главную роль играют носители заряда с энергией, близкой к фермиевской; при исследовании края оптического поглощения важны электроны и дырки вблизи границ зон и в примесных областях спектра. Особенности сильно легированных полупроводников, рассмотренные в предыдущем параграфе, по-разному сказываются на поведении носителей заряда различных энергий и, следовательно, в разных эффектах проявляются по-разному.

Рассмотрим сначала некомпенсированный и, следовательно, вырожденный материал (для определенности n -типа).

При вычислении уровня Ферми следует принять во внимание три характерные величины: отсчитанную от дна зоны среднюю энергию электронов, которой бы они обладали в идеальном кристалле, E_k (мы будем для краткости называть ее «кинетической»), среднюю потенциальную энергию взаимодействия их друг с другом E_{ee} и с примесью E_{et} . По порядку величины мы имеем (при параболическом законе дисперсии) *)

$$E_k \simeq \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m}, \quad E_{ee} \simeq \frac{e^2 n^{1/3}}{\varepsilon}, \quad E_{et} \simeq \frac{e^2}{\varepsilon} N_t^{1/3}. \quad (3.1)$$

Следовательно,

$$\frac{E_k}{E_{ee}} \sim a_B n^{1/3}, \quad \frac{E_k}{E_{et}} \sim a_B n^{1/3} \left(\frac{n}{N_t} \right)^{1/3}. \quad (3.2)$$

Видим, что относительная роль «кинетической» энергии повышается при увеличении концентрации носителей заряда. Это есть следствие параболичности закона дисперсии и того факта, что электроны подчиняются статистике Ферми (§ V.6). Величины $a_B n^{1/3}$ и $a_B N_t^{1/3}$ называются параметрами сильного легирования. Теорию сильно легированных некомпенсированных полупроводников обычно строят в предположении, что

$$a_B n^{1/3} \gg 1, \quad a_B N_t^{1/3} \gg 1. \quad (3.3)$$

*) Мы опускаем несущественные для дальнейшего численные коэффициенты.