Краткие сообщения по физике № 9-1989 г.

УДК 537. 311. 33

ДЕФОРМАЦИЯ ЗОН В ПОЛУПРОВОДНИКАХ СО СЛУЧАЙНЫМ ПОЛЕМ

М.Г. Галкин

Рассмотрено влияние случайного примесного поля на дисперсионные зависимости носителей в полупроводниках. Получены аналитические выражения, описывающие деформацию сферически симметричных зон произвольного вида. Приведены результаты расчетов для валентной зоны германия.

В работе /1/ при объяснении обнаруженной концентрационной зависимости сечения примесной фотоионизации было сделано предположение, что ее причиной является перенормировка зонных (конечных) состояний в случайном поле, создаваемом заряженными примесями. Такого рода нелокальное действие случайного поля на дисперсионные зависимости носителей в полупроводниках рассматривается в настоящей работе.

Действие случайного поля на невозмущенное зонное состояние с энергией E и квазиволновым вектором $\mathbf{k}$ сводится к сдвигу его энергии и перемешиванию состояний с различными $\mathbf{k}$; при этом дисперсионная зависимость $E(\mathbf{k})$ перестает быть однозначной. Тем не менее, в пределе малого возмущения, когда область неопределенности $\mathbf{k}$, определяемая обратным радиусом локализации случайного поля r_0, мала, любой физический параметр с "гладкой" зависимостью от $\mathbf{k}$ (как например, сечение фотоионизации) эффективно усредняется по этой малой области, что позволяет сохранить невозмущенное значение $\mathbf{k}$ для описания состояния с определенной энергией. Таким образом, дисперсионная зависимость $E(\mathbf{k})$ сохраняет свой функциональный смысл при выполнении условия квазиклассического типа

$$kr_0 > 1. \tag{1}$$

Полагая потенциальную энергию носителя в случайном поле $V(\mathbf{r})$ малым возмущением, изменение этой зависимости можно вычислить в рамках теории возмущений. Во втором порядке теории возмущений поправка к энергии имеет следующий вид:

$$\delta E(\mathbf{k}) = (2\pi)^3 \oint d^3q \, \frac{|V_{\mathbf{k},\,\mathbf{k+q}}|^2}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k+q})} \quad , \tag{2}$$

где матричные элементы $V_{\mathbf{k},\,\mathbf{k+q}}$ совпадают с Фурье-компонентами

$$V(\mathbf{q}) = (2\pi)^{-3} \int d^3r \, V(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{qr}).$$

Существенно, что эффект (2) определяется спектральной плотностью поля $|V(\mathbf{q})|^2$ и, следовательно, конечен и при $< V(\mathbf{r}) > = 0$.

Сходимость интеграла (2) при $q > r_0^{-1}$ (например, случайного поля, образованного экранированными кулоновскими потенциалами ионов, $|V(q)| \sim (q^2 + r_0^{-2})^{-1}$, где r_0 – радиус экранирования) позволяет, с учетом (1), при его вычислении ограничиться вкладом области $q < k$. Выполнение этого условия дает возможность вычислить поправку (2), не задаваясь ни конкретным видом случайного поля, ни исходной зависимостью $E(\mathbf{k})$, полагая ее лишь сферически симметричной.

Разложим знаменатель подынтегрального выражения в (2)

$$E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k+q}) = [\mathbf{k}^2 - (\mathbf{k+q})^2]\, dE(\mathbf{k})/d(\mathbf{k}^2). \tag{3}$$

При $q/k < 1$ угловая часть интеграла (2)

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \oint \frac{\sin\theta \, d\varphi \, d\theta}{k^2 - (\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}$$

в результате интегрирования оказывается не зависящей от $\mathbf{q}$

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = -\pi/E(\mathbf{k}),$$

и тогда, учитывая, что $\langle V^2(\mathbf{r}) \rangle = (2\pi)^3 \int d^3q|V(\mathbf{q})|$, получаем:

$$\delta E(\mathbf{k}) = -\langle V^2(\mathbf{r}) \rangle Q(\mathbf{k})/4E(\mathbf{k}), \qquad (4)$$

где множитель $Q(\mathbf{k})$ определяется только законом дисперсии

$$Q(\mathbf{k}) = (E(\mathbf{k})/k^2)\,(dE(\mathbf{k})/d(k^2))^{-1}$$

и обращается в единицу для параболической зоны.

Величину деформации закона дисперсии удобно представить в виде энергетической зависимости относительного изменения эффективных масс. При этом следует отметить, что непараболичность поправки (4) имеет следствием то, что эффективные массы, определенные различным образом, по-разному зависят от величины случайного поля. Так, в случае параболической исходной зоны, для эффективной массы, определенной как $m_1^* = \hbar^2 k^2/(2E)$, имеем

$$\frac{m_1^*(V)}{m_1^*(0)} = [1 - \langle V^2(\mathbf{r}) \rangle/4E^2(\mathbf{k})]^{-1},$$

а для эффективной массы, определенной как $m_2^* = \hbar^2 (2\, dE/d(k^2))^{-1}$,

$$\frac{m_2^*(V)}{m_2^*(0)} = [1 + \langle V^2(\mathbf{r}) \rangle/4E^2(\mathbf{k})]^{-1}.$$

Таким образом, эффективная масса во втором определении m_2^*, которая соответствует измерениям на циклотронном резонансе, уменьшается с ростом величины случайного поля. Такое уменьшение циклотронной эффективной массы действительно наблюдалось (для тяжелых дырок в германии) /2/, что является качественным подтверждением сделанных выше выводов.

Рассмотрим полученные результаты в приложении к валентной зоне германия, ограничившись двумя верхними подзонами: тяжелых и легких дырок. В сферическом приближении их законы дисперсии имеют следующий вид:

$$E_-(\mathbf{k}) = (1-\mu)E_1(\mathbf{k}), \; E_1(\mathbf{k}) = \gamma_1\hbar^2 k^2/(2m_e), \qquad (5)$$

$$E_+(\mathbf{k}) = (1/2)\left\{(2+\mu)E_1(\mathbf{k}) + \Delta - [(\Delta - \mu E_1(\mathbf{k}))^2 + 8(\mu E_1(\mathbf{k}))^2]^{1/2}\right\},$$

где знак + относится к легким дыркам, знак − к тяжелым; при этом параметры имеют следующие значения: $\Delta = 0{,}29$ эВ, $\mu = 0{,}766$, $\gamma_1 = 13{,}3$ /3/, $\mu^* = 0{,}89$, $\gamma_1^* = 12{,}4$. Параметры, обозначенные звездочкой, использованы для описания подзоны легких дырок, поскольку прямые кейновские вычисления /4/ дают несколько завышенное значение энергии в области заметной непараболичности /5/.

На рис. 1 представлены кривые, рассчитанные для значения $(\langle V^2(\mathbf{r}) \rangle)^{1/2} = 25$ мэВ, которые иллюстрируют изменение эффективных масс обеих подзон в зависимости от энергии в зоне. Видно, что непараболичность подзоны легких дырок приводит к значительному усилению эффекта деформации зоны в области больших энергий. Так, в области максимума при $E = 200$ мэВ относительные величины деформации для обеих подзон различаются на порядок.

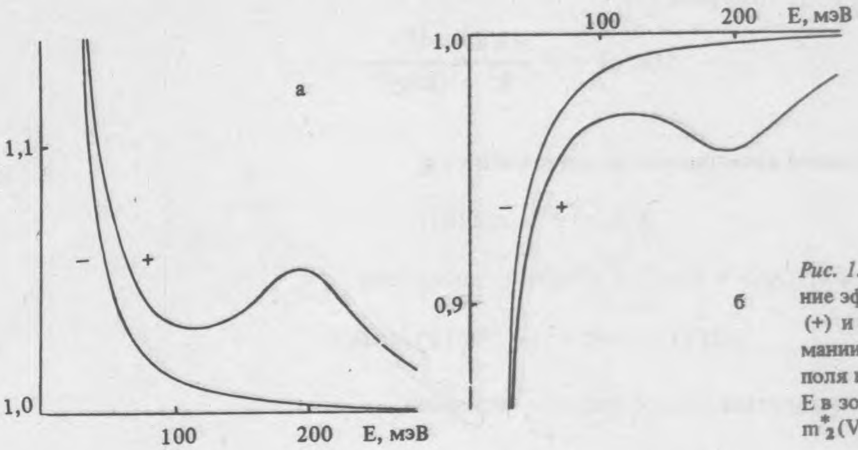

Рис. 1. Относительное изменение эффективных масс легких (+) и тяжелых (–) дырок в германии под действием случайного поля в зависимости от энергии E в зоне: а) $m^*_1(V)/m^*_1(0)$, б) $m^*_2(V)/m^*_2(0)$.

Для зон с непараболичностью кейновского типа разложение (3) оказывается очень точным, поскольку оно сводится к разложению корня в (5) по заведомо малым параметрам – qk/Δ при малых энергиях и q/k в области энергий, сопоставимых с Δ. Что же касается минимальной энергии в зоне, для которой справедливо настоящее рассмотрение, то для валентной зоны германия она ограничена малостью величины относительной деформации (на уровне 0,1 – 0,2); ограничение, связанное с выполнением условия (1), существенно только для зон с эффективной массой $m^* < 0{,}04 m_e$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Галкин М. Г., Курбатов В. А., Соловьев Н. Н. ФТП, 22, № 6, 1122 (1988).
2. Bagguley D. M. S., Stradling R. A., Whiting J. S. S. Proc. Roy. Soc., A262, № 1310, 340 (1961).
3. Lawaetz P. Phys. Rev., B4, 3460 (1971).
4. Kane E. O. J. Phys. Chem. Sol., 1, 82 (1956).
5. Fawcett W. Proc. Phys. Soc., 85, 931 (1965).

Поступила в редакцию 15 мая 1989 г.