

УДК 537.311.33

ЭНЕРГИЯ И ШИРИНА ДОНОРНОГО УРОВНЯ ВБЛИЗИ ГЕТЕРОГРАНИЦЫ

© 2021 г. Т. Т. Муратов*

*Ташкентский государственный педагогический университет им. Низами,
Ташкент, 100185 Узбекистан*

**e-mail: temur-muratov@yandex.ru*

Поступила в редакцию 07.07.2020 г.

После доработки 25.09.2020 г.

Принята к публикации 30.09.2020 г.

Рассмотрено влияние гетерограницы на энергетический спектр мелких и глубоких центров. Получены формулы для уширения энергии примесного центра и времени жизни электрона в квазистационарном состоянии. Проведено уточнение соответствующих аналитических формул, полученных в других работах. Показано, что в данном случае роль эффективного радиуса мелкого центра выполняет не его борковский радиус r_B , а величина, равная $2.5r_B$.

Ключевые слова: мелкие и глубокие центры, гетерограница, ширина квазистационарного уровня, туннельный эффект.

DOI: 10.31857/S1028096021040105

ВВЕДЕНИЕ

Ситуация, когда донорный центр локализован вблизи гетероперехода, довольно часто реализуется в полупроводниковых гетероструктурах. Наличие характерных полос люминесценции в инфракрасной области спектра при очень низких температурах [1, 2] дает основание полагать, что электрон донорного центра, находящегося, например, в широкозонной части гетероперехода, сможет протуннелировать через потенциальный барьер в узкозонную часть гетероперехода с последующей рекомбинацией с дыркой. С учетом разрыва зон электрон, изначально находящийся в квазисвязанном состоянии, переходит в квазисвободное состояние. При этом его энергия не изменяется. Конечное время пребывания в связанном состоянии приводит к энергетическому сдвигу примесного уровня и эффекту перезарядки, заключающемуся в том, что вакантное место будет занято электроном соседнего донора. По сути, время перезарядки равно времени жизни электрона на центре.

В ряде работ [3–5] получены аналитические формулы для расчета различных параметров рассеяния и туннелирования носителя нейтрального центра. Эффект “диагонального туннелирования” носителя оказывается принципиально важным для работы целого ряда полупроводниковых

приборов: светодиодов, фотоприемников, биполярных транзисторов и других [1]. Основной практической задачей является стимулирование туннельных эффектов, приводящих к значительному уменьшению концентрации неосновных носителей в указанных приборах. Для этого предлагается, например, на основе теоретических оценок использовать электрические поля с напряженностью $E \sim 2 \times 10^6 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$ [3] (в гетероструктуре GaAlAs).

В глубине широкозонной части гетероперехода доминируют процессы рассеяния носителей на нейтральных центрах [4], вблизи гетероперехода — эффекты туннелирования [5]. В [5] рассчитаны ширина квазистационарного уровня и время жизни электрона в квазистационарном состоянии. Однако полученные асимптотические формулы требуют уточнения. Некоторая неточность была допущена при усреднении квазиклассической (отраженной) волновой функции по ее угловой переменной. Как будет показано в настоящей работе, замена синуса и косинуса приосевого угла θ их приближенными значениями приводит к потере важной информации об отраженной волновой функции.

Целью настоящей работы было корректное угловое усреднение отраженной квазиклассической волновой функции с последующим получе-

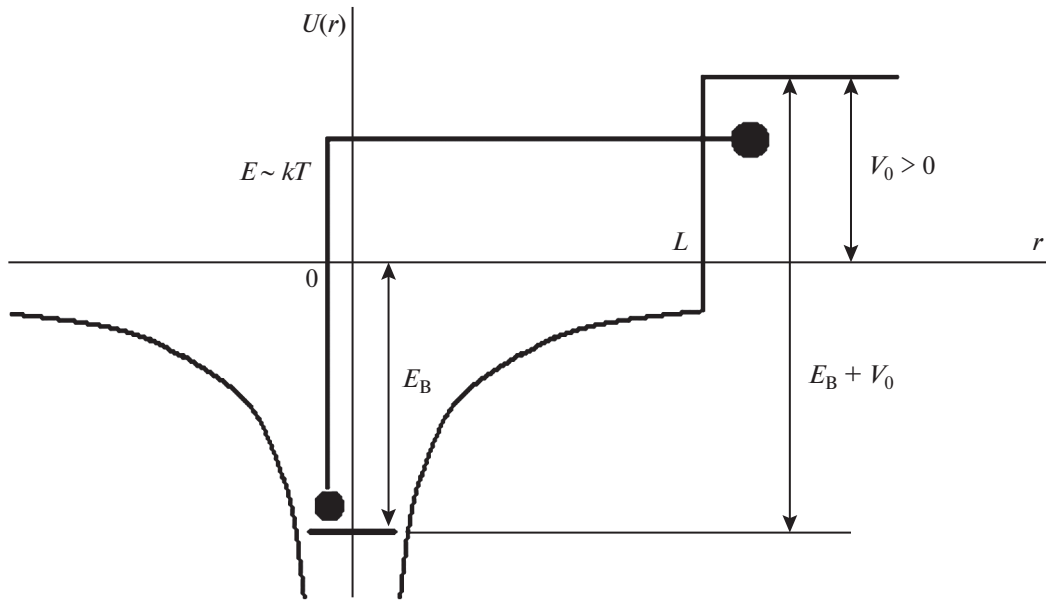


Рис. 1. Переход квазисвязанного электрона в зону проводимости узкозонного полупроводника возможен за счет его перехода в зону проводимости широкозонного материала с последующим термостимулированным просачиванием через барьер.

нием исходных “точных” формул для ширины квазистационарного уровня и времени жизни электрона на этом уровне. Для сравнения рассматривается аналогичная процедура расчета для донорного центра, описываемого потенциалом нулевого радиуса (потенциалом Луковского [4, 6]).

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Рассмотрим донорный центр вблизи гетероперехода, моделируемого потенциальным барьером $\pm V_0$ (рис. 1, 2). Гамильтониан электрона на таком центре имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} + V(z), \quad V(z) = \begin{cases} 0, & z < L \\ V_0, & z > L. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь m^* – эффективная масса электрона, ϵ – диэлектрическая проницаемость.

Волновая функция основного состояния при $L \rightarrow \infty$ (барьер находится на очень большом расстоянии от центра) имеет вид:

$$\psi_B(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right), \quad (2)$$

где r_B – боровский радиус основного состояния мелкой примеси ($\sim 10 \text{ \AA}$) с энергией связи E_B ($\sim 10^{-2}$ эВ). Наличие барьера на конечном расстоянии от центра приводит к изменению асимптотического поведения волновой функции (2) и, как следствие, к сдвигу энергии основного состо-

яния. Как видно из рис. 2, при $E_B < -V_0$ основное состояние примеси квазистационарное и возможен туннельный переход электрона в состояние сплошного спектра.

Решения уравнения Шредингера для областей $z < L$ и $z > L$ выражаются через вырожденные гипергеометрические функции: $F(-n + l + 1, 2l + 2; \rho)$. По разные стороны от барьера решения отличаются только значениями параметров гипергеометрической функции. Вдали от центра можно пренебречь вкладом возбужденных состояний и рассматривать только s -состояния [5], которые мало отличаются от (2), т.е.

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} \exp(-\sqrt{1 - \Delta} \rho) \times F\left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \Delta}}, 2; 2\sqrt{1 - \Delta} \rho\right), \quad (3)$$

где введены обозначения: $\rho = r/r_B$ и $\Delta = E/E_B + 1$. При $\rho \gg 1$ и $|\Delta| \ll 1$ можно воспользоваться асимптотикой F [7]:

$$\psi_s(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} \left(\exp(-\rho) + \frac{(2\rho)^{-2}}{\Gamma(-\Delta/2)} \exp(\rho) \right), \quad (4)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция.

Из квазиклассической волновой функции (4) нетрудно выделить ее падающую и отраженную компоненты: $\psi_s^- = C_1 \exp(-\rho)$, $\psi_s^+ = C_2 \exp(\rho)$. Множитель перед растущей экспонентой в (4)

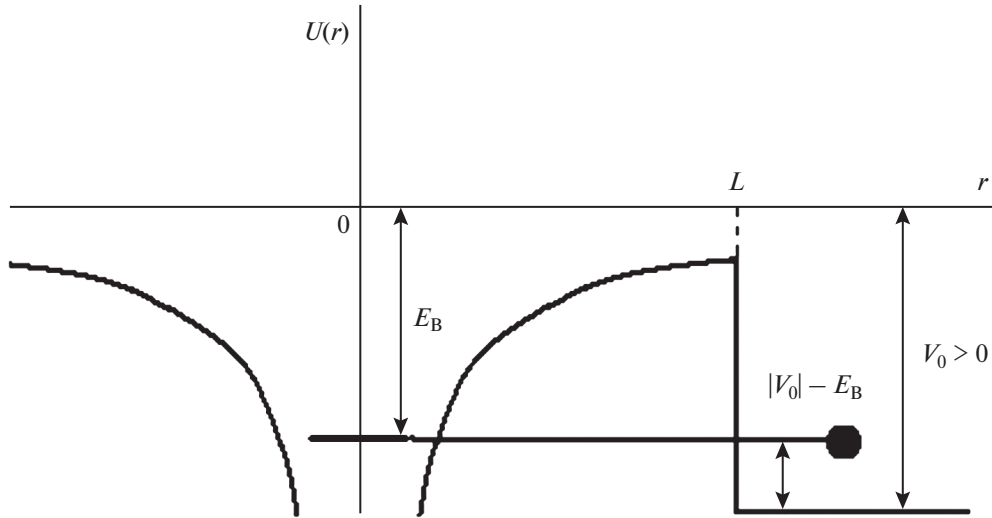


Рис. 2. Переход квазисвязанного электрона в состояние сплошного спектра за счет туннельного эффекта.

есть отношение амплитуд “падающей” и “отраженной” s -волн:

$$\frac{(2\rho)^{-2}}{\Gamma(-\Delta/2)} \approx -\frac{\Delta}{8\rho^2} = \frac{C_2}{C_1}, \quad |\Delta| \ll 1. \quad (5)$$

На основе (5) можно найти сдвиг примесного уровня Δ . Для этого надо сконструировать отраженную от плоскости $z = L$ волну и выделить из нее s -компоненту, т.е. практически определить отношение C_2/C_1 .

Рассмотрим квазиклассические траектории, расположенные под углом θ к оси z (рис. 3). Амплитуда отраженной волны в точке C на сфере $r = L$ отличается от амплитуды падающей волны в точке A фактором $G \exp\left(-\frac{r_{AB} + r_{BC}}{r_B}\right)$, где G – стандартный коэффициент, равный

$$G(V_0) = \frac{\sqrt{E_B} - \sqrt{V_0 + E_B}}{\sqrt{E_B} + \sqrt{V_0 + E_B}}. \quad (6)$$

Для суммы расстояний в экспоненте $r_{AB} + r_{BC} \approx 2r_{AB} = 2L(1 - \cos\theta)/\cos\theta$. В отличие от [5] косинус угла не заменяется на $1 - \theta^2/2$. Следовательно, уравнение отраженной на сфере радиуса $r = L$ волны имеет вид:

$$\psi_+(\theta, L) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} G(V_0) \exp\left(-\frac{2L}{r_B \cos\theta}\right) \exp\left(\frac{L}{r_B}\right). \quad (7)$$

Для того чтобы выделить из $\psi_+(\theta, L)$ ее s -компоненту, следует усреднить (7) по полному телесному углу первого октанта:

$$\begin{aligned} \langle \psi_+(\theta, L) \rangle_\Omega &= \int_0^{\pi/2} \psi_+(\theta, L) \sin\theta d\theta \Big/ \int_0^{\pi/2} \sin\theta d\theta = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} G(V_0) \exp\left(\frac{L}{r_B}\right) \int_0^{\pi/2} \exp\left(-\frac{2L}{r_B \cos\theta}\right) \sin\theta d\theta = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} G(V_0) \exp\left(-\frac{L}{r_B}\right) \times \\ &\quad \times \left\{ 1 - \frac{2L}{r_B} \exp\left(\frac{2L}{r_B}\right) \left[-Ei\left(-\frac{2L}{r_B}\right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $-Ei(-x)$ – интегральная показательная функция. Так как $L/r_B \gg 1$,

$$\langle \psi_+(\theta, L) \rangle_\Omega = \frac{G(V_0)}{2L\sqrt{\pi r_B}} \exp\left(-\frac{L}{r_B}\right). \quad (9)$$

Как видно из (9), результирующее значение получилось вдвое больше, чем то, что следует из [5]. Компонента (8) примечательна еще и тем, что при $2L/r_B \geq 5$ соответствует минимальному расстоянию от центра, за которым допускается квазиклассическое рассмотрение [8–11]. Параксиальное приближение, используемое в [5], не дает возможности указать критерий перехода от волновой функции (2) к квазиклассической волновой функции (4). Согласно (8) переход начинается примерно с расстояния $L = 2.5r_B$. На таких расстояниях ($L > 2.5r_B$) отраженная волна (8) почти отсутствует. Подстановка (9) в (5) с учетом $C_1 = 1/\sqrt{\pi r_B^3}$ дает для энергетического сдвига формулу:

$$\delta E_B = E_B \Delta = 4 \left(\frac{L}{r_B} \right) \frac{\sqrt{E_B + V_0} - \sqrt{E_B}}{\sqrt{E_B + V_0} + \sqrt{E_B}} \exp\left(-\frac{2L}{r_B}\right) E_B. \quad (10)$$

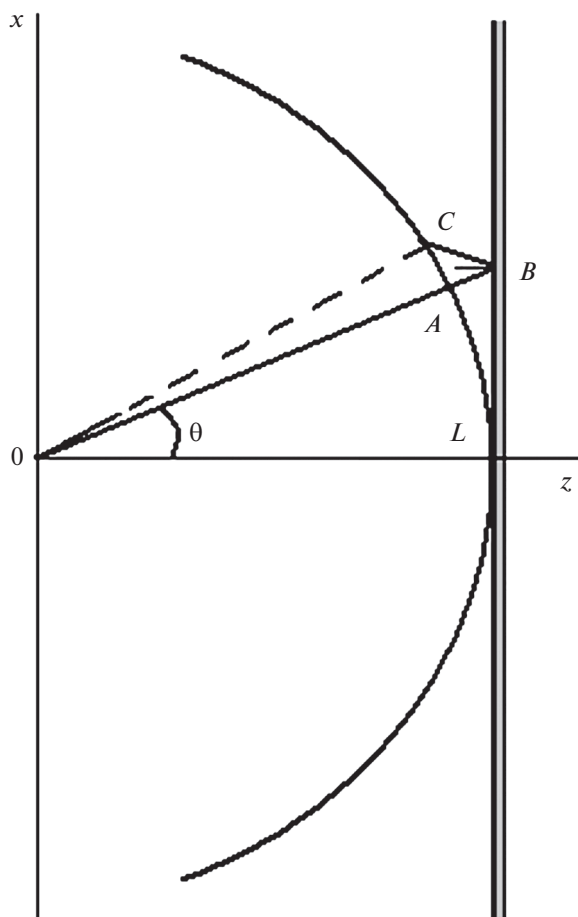


Рис. 3. Отражение волновой функции связанного на центре электрона от потенциального барьера. На отрезках *AB* и *BC* используется квазиклассическое описание падающей и отраженной от барьера волн. На сфере $r = L$ квазиклассическое решение сшивается с s -компонентой волновой функции примесного центра. Угол падения θ равен углу отражения в точке *B*.

Энергетический сдвиг оказался в два раза больше сдвига, полученного в [5]. При очень низких температурах (~ 4 К), может реализоваться ситуация, указанная на рис. 2, и δE_B становится комплексным. Используя (10), нетрудно найти время жизни частицы на квазистационарном уровне:

$$\begin{aligned} \tau_B &= \frac{\hbar}{2 \operatorname{Im}(\delta E)} = \\ &= \frac{\hbar}{16 E_B \sqrt{E_B(|V_0| - E_B)}} \left(\frac{r_B}{L} \right) \exp\left(\frac{2L}{r_B} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Оценки на основе (11) для параметров мелких примесей (Ge, Si) дают времена жизни порядка $10^{-11} - 10^{-10}$ с, что находится в разумном согласии с экспериментальными данными [2, 6].

В отличие от мелких примесных уровней, потенциал центра с большой энергией ионизации (глубокие центры) нельзя рассматривать как медленно меняющийся [12, 13]. По этой причине его можно смоделировать δ -функцией: $U(r) = -U_0 \delta(r)$ [6]. Качественно понятно, что частота изменения потенциала глубокого центра гораздо больше частоты перехода частицы в состояние сплошного спектра, т.е. гетерограница не успевает “следить” за электроном, и его время жизни на глубоком центре существенно возрастает по сравнению со временем жизни на мелком центре (11). Расчеты, аналогичные проведенным выше, дают отличие примерно в $2(L/r_0)^2$, где r_0 – радиус связанного состояния мелкого центра ($r_0 \sim 10^{-6}$ см). Оценки показывают, что $\tau_0 \sim 10^{-9} - 10^{-8}$ с.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основное содержание работы можно резюмировать формулами (9), (10) и (11), уточняющими соответствующие формулы, полученные в [5]. Анализ (8) указывает на наличие определенной границы ($L \leq 2.5r_B$), в пределах которой энергетический спектр мелкого центра еще не возмущен. В случае глубоких примесей влияние гетерограницы примерно на два порядка меньше, чем в случае мелких примесей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алферов Ж.И. // ФТП. 1998. Т. 32. С. 3.
2. Бреслер М.С., Гусев О.Б., Михайлова М.П. и др. // ФТП. 1991. Т. 25. С. 298.
3. Пахомов А.А. // ФТТ. 1992. Т. 34. С. 3417.
4. Гейлер В.А., Маргулис В.А., Чучаев И.И. // ФТТ. 1995. Т. 37. С. 837.
5. Иванов М.Г., Меркулов И.А., Эфрос А.Л. // ФТП. 1988. Т. 22. С. 628.
6. Абакумов В.Н., Перель В.И., Ясиевич И.Н. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. С.-Пб.: ПИЯФ РАН, 1997. 376 с.
7. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Специальные функции математической физики. М.: Наука, 1978. 320 с.
8. Арфкен Г. Математические методы в физике. М.: Атомиздат, 1970. 712 с.
9. Федоров М.В. // ЖЭТФ. 2016. Т. 149. С. 522.
10. Михайлова М.П., Иванов Э.В., Данилов Л.В. и др. // ФТП. 2020. Т. 54. С. 1267.
11. Торхов Н.А. // ФТП. 2021. Т. 55. С. 16.
12. Татохин Е.А., Буданов А.В., Бутусов И.Ю. и др. // Вестн. ВГУ. Сер. Физика. Математика. 2008. № 2. С. 60.
13. Миронов А.Г., Серов А.С. // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 2011. № 3. С. 65.

Energy and Donor Level Width Near the Heterointerface

T. T. Muratov*

Tashkent State Pedagogical University, Tashkent, 100185 Uzbekistan

**e-mail: temur-muratov@yandex.ru*

The influence of the heterointerface on the energy spectrum of shallow and deep centers is considered. Formulae are obtained for the broadening of the impurity center energy and the electron lifetime in a quasistationary state. The corresponding analytical formulae obtained in other works are refined. It is shown that in this case the effective radius of a shallow center is not its Bohr radius r_B , but $2.5r_B$.

Keywords: shallow and deep centers, heterointerface, quasi-stationary level width, tunneling effect.