

ТУННЕЛЬНАЯ ПРИМЕСНАЯ АВТОЛОКАЛИЗАЦИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ.

ПРИРОДА АНОМАЛЬНЫХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ $Pb_{1-x}Sn_xTe$ С ПРИМЕСЬЮ In

Ю.Калан, К.А.Кикоин

Показано, что возникновение примесных автолокализованных состояний, связанных с захватом электрона собственной ямой примеси при деформации, приводит к появлению подбарьерной кинетики, объясняющей аномальные свойства соединения $Pb_{1-x}Sn_xTe$ (In)

1. Недавно двумя экспериментальными группами [1, 2] была обнаружена совершенно необычная картина кинетики в полупроводниках $Pb_{1-x}Sn_xTe$ (In). Если принять во внимание нетривиальный характер неравновесных характеристик этих соединений [3 — 5], то можно выделить ряд свойств, резко отличающих данную систему. а) Введение In в сплавы с $x < 0,2$ приводит к появлению уровня $\epsilon_0(x)$ в зоне проводимости, фиксирующего энергию Ферми ϵ_F , если концентрация In превышает концентрацию других дефектов [3, 4]. б) ϵ_0 уменьшается линейно с x , пересекает энергетическую щель и выходит в валентную зону, причем пересечение с краями зон $\epsilon_c(x)$ и $\epsilon_v(x)$ не сопровождается особенностями в зависимости $\epsilon_0(x)$ — уровень движется, как бы не осязая зонной структуры [5]. в) Если импульсно изменить ϵ_F , нарушив условие $\epsilon_0 = \epsilon_F$, то наблюдается аномально медленное перетекание электронов с уровня в зону проводимости ($\epsilon_0 > \epsilon_F$) или наоборот ($\epsilon_0 < \epsilon_F$), которое при гелиевых температурах может продолжаться часами [1]. Это время резко уменьшается уже при $T \approx 20$ К. г) В диэлектрическом состоянии при малых T эти соединения обладают уникальной фоточувствительностью — при очень слабом по интенсивности освещении сопротивление ρ падает на много порядков [2]. С ростом T ρ возрастает, и только при $T \approx 20$ К восстанавливается активационное падение $\rho(T)$.

Развиваемые ниже представления о туннельном примесном состоянии автолокализационной природы позволяют с единых позиций объяснить все эти аномальные свойства.

2. Рассмотрим полупроводник, легированный донорными примесями замещения. В результате ухода электрона с примеси в потенциальном рельефе на ее месте возникает более глубокая "потенциальная воронка". За счет влияния окружения она оказывается уже и ниже по высоте, чем потенциал свободного иона, в силу чего не содержит дискретного уровня. Однако, если деформировать решетку вокруг примесного атома, то уширение ямы и увеличение ее высоты приведет к появлению в ней уровня, который будет становиться все глубже по мере увеличения деформации. После того, как этот уровень ϵ_d окажется ниже химического потенциала μ , в системе появится локализованное состояние. При дальнейшем увеличении деформации уровень пересечет щель и уйдет

в валентную зону. Если уменьшение ϵ_d с ростом деформации будет идти быстрее, чем рост упругой энергии, то в системе возникнет примесное автолокализованное состояние (ПАС), отвечающее конечной деформации (об автолокализации в идеальных кристаллах см. обзор [6]). Возникновение ПАС, отделенного от состояния кристалла без деформации потенциальным барьером, и ведет к появлению низкотемпературных аномалий отмеченного выше характера.

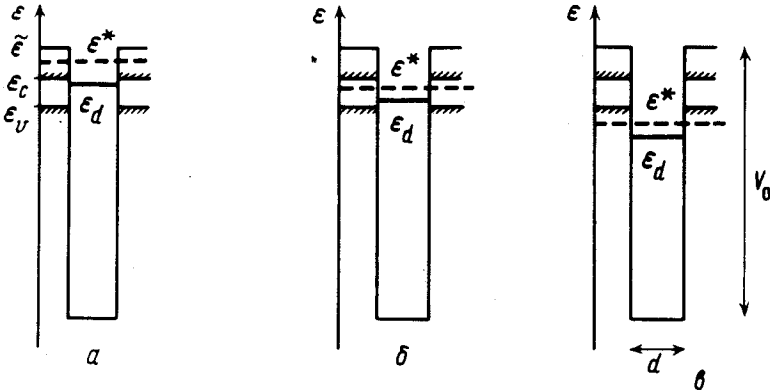


Рис.1

3. Для анализа картины воспользуемся модельным описанием, выбрав примесный потенциал в виде прямоугольной ямы (рис.1) и приняв для определенности, что смещение окружающих атомов вызовет только увеличение ее диаметра d . Будем считать, что наиболее существенная деформация связана с симметричным расширением ближайшей координационной сферы, описываемым одним параметром u . Предполагая изменения $\epsilon_d(u)$ малыми по сравнению с глубиной уровня в свободной яме, запишем приближенно

$$\epsilon_d(u) \approx \tilde{\epsilon} - \frac{\pi^2}{4} V_0 \delta^2 + \frac{\pi^4}{16} V_0 \delta^3, \quad \delta = [d(u) - d_c] / d_c. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{\epsilon}$ — положение "бруствера" потенциальной ямы (см. рис. 1) (предполагается, что $\tilde{\epsilon} > \mu$).

Рассмотрим полупроводник n -типа с числом электронов в зоне N_e . Адиабатическое изменение энергии кристалла при деформации есть

$$\Delta E(u) = E(N_e, u) - E(N_e, 0), \quad (2)$$

До смещения $u \sim u_c$, при котором $\epsilon_d \sim \mu$, ΔE определяется только упругой деформацией

$$\Delta E(u) = \frac{1}{2} a u^2, \quad u < u_c. \quad (3)$$

При $u > u_c$

$$\Delta E(u) = E(N_e - 1, u) + \epsilon_d(u) - E(N_e, 0) \approx \epsilon_d(u) - \mu, \quad (4)$$

$$\epsilon(u) = \frac{1}{2} \alpha u^2 + \epsilon_d(u). \quad (4)$$

Реально при $u \sim u_c$ происходит плавный переход от (3) к (4),

Приняв линейную связь между диаметром ямы и смещением, $d = d_0 + \gamma u$, из условия $d(\Delta E)/du = 0$ находим значения смещений $u_{1,2}$, отвечающих максимуму и минимуму кривой $\Delta E(u)$. Высота барьера $\Delta E_{max}(u_1)$ равна

$$\Delta E_{max}(u_1) \approx \frac{\pi^2}{4} V_0 \eta \left[\delta_0 + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\tilde{\epsilon} - \mu}{V_0} \right)^{1/2} \right]^2 \quad \eta = \hbar^2 \alpha / 4 \gamma^2 m_0 V_0^2, \quad (5)$$

$$\delta_0 = \left| \delta(u=0) \right|.$$

Значение $\Delta E(u)$ (4) с $u = u_2$ определяет энергетический уровень ПАС

$$\epsilon^* \equiv \epsilon(u_2) \approx \tilde{\epsilon} - \frac{16 V_0}{27 \pi^2} (1 - \eta)^3 + \frac{4}{3} V_0 \eta (1 - \eta) \delta_0. \quad (6)$$

Минимум на кривой $\Delta E(u)$ существует при условиях

$$\eta < 1, (1 - \eta)^2 > \frac{3 \pi^2}{2} \eta \delta_0, (1 - \eta)^2 > \frac{9 \pi^2}{16} \frac{\tilde{\epsilon} - \mu}{V_0}, \quad (7)$$

совместных при $\eta \ll 1$, $\delta_0 \ll 1$. Из (6) видно, что взаимное расположение ϵ^* и ϵ_c в принципе произвольно. Если $\epsilon^* > \epsilon_c$, то ϵ^* является уровнем стабилизации ϵ_F при $N_e < N_{imp}$, что сразу следует из обращения ΔE в нуль при условии

$$\mu = \epsilon^* \quad (8)$$

(см. кривую 2 на рис. 2, а). Если при фиксированном N_e нарушить условие равновесия (8), то при $\mu < \epsilon^*$ (кривая 1 на рис. 2, а) электроны будут перетекать из автолокализованных состояний, пока μ снова не сравняется с ϵ^* . При $\epsilon^* < \mu$ (кривая 3 рис. 2, а) будет наблюдаться обратная картина.

Если ϵ^* попадает в запрещенную зону (рис. 1, б), то электроны оказываются автолокализованными с энергией термической активации $\epsilon_c - \epsilon^*$ (диэлектрическое состояние) и отделенными от зонных состояний потенциальным барьером $\Delta E(u)$ (3), (4) (с заменой $\mu \rightarrow \epsilon_c$) — см. рис. 1, б, рис. 2, б. Подчеркнем, что во всех случаях уровень в яме ϵ_d лежит ниже ϵ^* (рис. 1). При $\epsilon^* < \epsilon_v$ валентные электроны с $\epsilon_v < \epsilon < \epsilon^*$ переходят в ПАС и ϵ^* стабилизирует μ дырочной поверхности Ферми (рис. 1, в).

5. В силу того, что ПАС отделены от зонных состояний потенциальным барьером, при $T \rightarrow 0$ кинетика переходов носит чисто туннельный

характер. Для нахождения вероятности подбарьерного перехода W введем оператор кинетической энергии \hat{T} , который приближенно можно связать с движением только ближайшей координационной сферы

$$\hat{T} = \sum_n \frac{1}{2} M u_n^2 = \frac{1}{2} Z M \dot{u}^2, \quad (9)$$

где M — масса соседних атомов, Z — координационное число. Обобщенный импульс равен $P_u = Z M \dot{u}$, и в квазиклассическом приближении

$$W \approx \omega_0 \exp \left\{ - \frac{2}{\hbar} \int_{u'}^{u''} (2 Z M [\Delta E(u) - \hbar \omega_0 / 2])^{1/2} du \right\} \quad (10)$$

(ср. [7], а также [8]). Здесь ω_0 — частота нулевых колебаний в яме, отвечающей исходному состоянию. При переходе слева направо (рис.2) она совпадает с характерной фононной частотой. Как правило, время перехода $\tau = W^{-1}$ оказывается очень большим. С ростом температуры τ начинает падать уже при сравнительно малых T , что связано с формой барьера и его малой высотой (5).

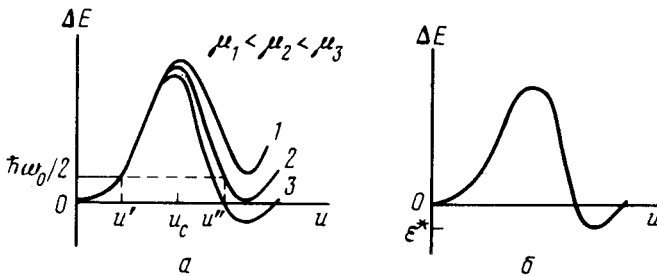


Рис.2

Оптические переходы из ПАС происходят при неизменной конфигурации окружения с пороговой энергией $\mu - \epsilon_d(u_2)$ (или $\epsilon_c - \epsilon_d(u_2)$ для диэлектрического состояния) безотносительно к величине потенциального барьера. При малых T время τ обратного перехода в ПАС экспоненциально велико, и это предопределяет чрезвычайно сильное падение сопротивления системы в диэлектрическом состоянии при малой интенсивности света. При постоянной освещенности с ростом T стационарное число носителей и фотопроводимость падают по мере уменьшения τ , пока это падение не перебивается увеличением числа носителей за счет термической ионизации ПАС.

6. Развитые представления полностью объясняют аномальные свойства системы $Pb_{1-x}Sn_xTe$ (In). Появление ПАС именно в этой системе не случайно. Основное условие $\eta \approx \frac{Z}{4\gamma} \frac{M}{m_0} \left(\frac{\hbar \omega_0}{V_0} \right)^2 < 1$ реализу-

ется здесь за счет мягкости фононного спектра. Этому способствует специфическое смягчение мод, связанное с существованием фазового перехода типа смещения при больших x . По-видимому, с уменьшением

η при росте x и связано уменьшение ϵ^* и, следовательно, уровня фиксации μ . С другой стороны огромная поляризуемость T_e ($\epsilon_\infty > 35$) обуславливает при расширении ближайшей координационной сферы увеличение эффективного диаметра примесной ямы.

Авторы признательны Н.Б.Брандту и Б.А.Акимову за обсуждение экспериментальных аспектов проблемы и Э.И.Рашба за дискуссию.

Институт атомной энергии
им. И.В.Курчатова

Поступила в редакцию
12 февраля 1980 г.

Литература

- [1] Б.А.Акимов, Н.Б.Брандт, С. А.Богословский, Л.И.Рябова, С.М.Чудинов. Письма в ЖЭТФ, **29**, 11, 1979.
 - [2] Б.М.Вул, И. Д.Воронова, Г.А.Калюжная, Т.С.Мамедов, Т.Ш.Рагимова. Письма в ЖЭТФ, **29**, 21, 1979.
 - [3] А.А.Аверкин, В.И. Кайданов, Р.Б.Мельник. ФТП, **5**, 91, 1971.
 - [4] Ю.В.Андреев, К.И. Гейман, И.А.Драбкин, А.В.Матвеевко, Е.А.Можаев, Б.Я.Мойжес. ФТП, **9**, 1873, 1975.
 - [5] Б.А.Акимов, Л.И.Рябова, О. Б.Яценко, С.М.Чудинов. ФТП, **13**, 752, 1979.
 - [6] Э.И.Рашба. Изв. АН СССР, сер. физ., **40**, 1793, 1976.
 - [7] И. М.Лифшиц, Ю.М.Каган. ЖЭТФ, **62**, 385, 1972.
 - [8] С.В.Иорданский, Э.И.Рашба. ЖЭТФ, **74**, 1872, 1978.
-