

Новые данные и развитие представлений об электронных свойствах атомов примесей переходных элементов в полупроводниках

Окулов В.И., Говоркова Т.Е., Жевстовских И.В., Константинов В.Л., Королёв А.В., Курмаев Э.З., Лончаков А.Т., Гудков В.В.



Исследованиями кинетических и акустических явлений, спинового магнетизма и рентгеновских спектров нами установлено существование гибридинизированных электронных состояний на примесных атомах переходного элемента, обладающих донорным энергетическим уровнем в полосе проводимости кристалла. На основе разработанной теории показано, что проявлениями таких состояний объясняются как известные ранее аномалии концентрационных и температурных зависимостей проводимости, так и новые наблюдавшиеся нами эффекты в кристаллах селенида ртути с примесями железа – резонансные максимумы в температурных зависимостях электронной теплопроводности и коэффициента поглощения медленных поперечных ультразвуковых волн, концентрационная зависимость константы Кюри в примесной магнитной восприимчивости и другие. Прямое обоснование гибридинизации электронных состояний дано с помощью анализа концентрационной зависимости примесных рентгеновских спектров поглощения.

Определение электронной структуры примесных атомов переходных элементов и её проявлений в физических свойствах широко используемых полупроводниковых кристаллов стало в последнее время одной из актуальнейших проблем. Настоящий цикл работ посвящён одному из принципиальных аспектов этой проблемы, связанному с установлением роли гибридинизации донорных электронных d-состояний, ионные энергетические уровни которых попадают в полосу проводимости кристалла-матрицы. Задачи проведённых исследований состояли в изучении проявлений гибридинизированных электронных состояний, возникающих при резонансе связанного на примеси и свободного состояний. Явление гибридинизации приводит к тому, что электронная плотность при энергиях вблизи резонансной оказывается содержащей как однородную часть, отвечающую свободному движению, так и часть, локализованную на примесях. Соответственно этому плотность электронных состояний с энергиями в определённом резонансном интервале содержит лоренцевский пик, отражающий частичную локализацию электронов. Вместе с тем длина свободного пробега донорного электрона включает вклад резонансного рассеяния, ко-

торый приводит к немонотонной зависимости подвижности μ от концентрации примесей. Этим объясняется наблюдаемый концентрационный максимум электронной подвижности (рис.1) в селениде ртути с примесями железа – системе, в которой существование резонансного уровня установлено. Резонансное рассеяние приводит также к максимуму электронной теплопроводности, отвечающему совпадению характерной тепловой энергии электронов с резонансной энергией ε_0 , отсчитываемой от энергии Ферми. Данные первого наблюдения этого эффекта и теоретическая кривая при концентрации примесей железа 10^{19}см^{-3} показаны на рис.2.

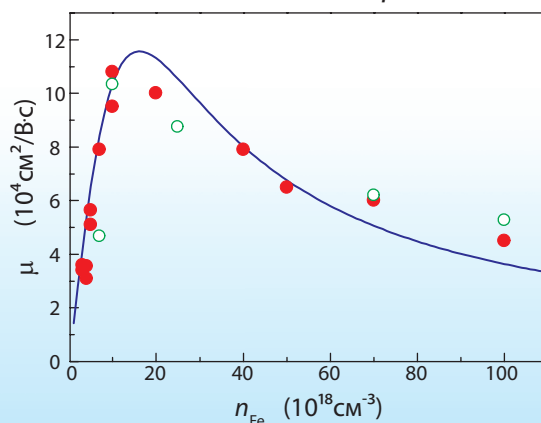


Рис.1

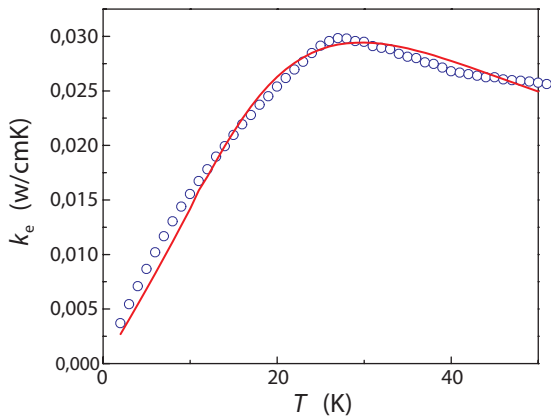


Рис.2

Для обоснования правильности интерпретации наблюдаемых эффектов было получено прямое подтверждение гибридизации электронных состояний на примесях железа в селениде ртути. На рис. 3 показаны кривые поглощения рентгеновского излучения ионами железа, демонстрирующие заполнение гибридизованных состояний с ростом концентрации от верхней (Fe^{3+}) к нижней (Fe^{2+}) кривой. Было установлено, что наблюдаемая закономерность не может быть объяснена в предположении о системе примесей железа как смеси ионов Fe^{3+} и Fe^{2+} .

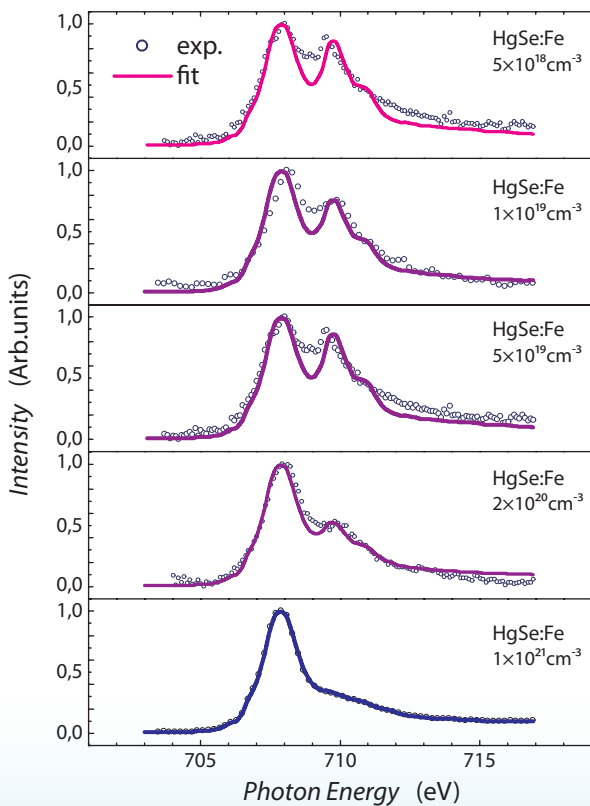


Рис.3

К важным новым результатам относится наблюдение поглощения ультразвука, вызывающего переходы между гибридизованными состояниями. Положение обнаруженного максимума в температурной зависимости коэффициента поглощения (рис.4) согласно теории (сплошная кривая) объясняется совпадением тепловой энергии электрона с энергией ϵ_0 . В экспериментах по температурной зависимости магнитной восприимчивости были исследованы концентрационные зависимости констант Кюри примеси железа и кобальта (рис.5), которые согласуются с представлениями о гибридизации электронных состояний.

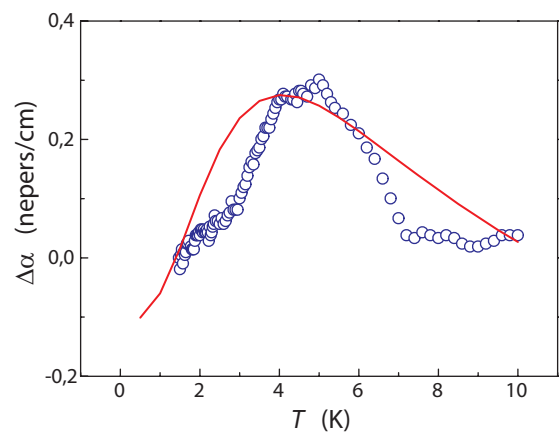


Рис.4

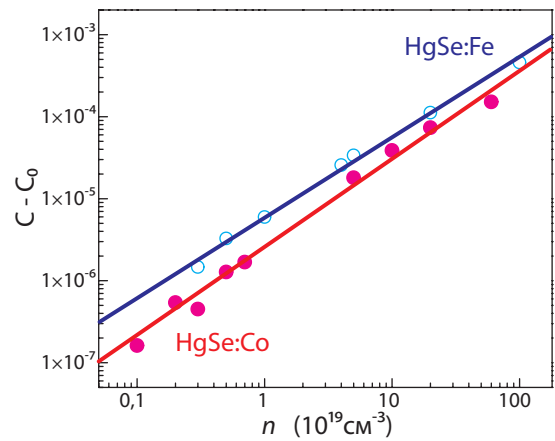


Рис.5

Проводимые исследования, результаты которых изложены в статьях [1-5], нацелены на получение надёжных данных о состояниях атомов переходных элементов в твердых телах, необходимых для количественного описания магнетизма и проводимости широкого круга систем.

¹ В.И. Окулов, Л.Д. Сабирзянова, К.С. Сазонова, С.Ю. Паранчич, ФНТ 30, 441, (2004)

² В.И. Окулов, ФММ 100, 23, (2005)

³ В.И. Окулов, Л.Д. Сабирзянова, Э.З. Курмаев, Л.Д. Финкельштейн, и др., Письма в ЖЭТФ 81, 80, (2005)

⁴ В.И. Окулов, А.В. Королев, А.Т. Лончаков, и др., ФНТ 31, 1143, (2005)

⁵ В.И. Окулов, Т.Е. Говоркова, В.В. Гудков, И.В. Жевстовских, и др., ФНТ 33, №2/3, (2007)