

На правах рукописи

Бур

Бурдейный Дмитрий Игоревич

**ЭЛЕКТРОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ
МЕЛКИХ ПРИМЕСЕЙ В
ПОЛУПРОВОДНИКАХ И
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $A^{III}B^V$**

05.27.01 – твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты,
микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт физики микроструктур Российской академии наук (ИФМ РАН)

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор
Алёшкин Владимир Яковлевич

Официальные оппоненты: Яссиевич Ирина Николаевна,
доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН

Бурдов Владимир Анатольевич,
кандидат физико-математических наук,
доцент ННГУ им. Н. И. Лобачевского

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Физический институт
им. П. Н. Лебедева Российской академии наук

Защита состоится 21 февраля 2013 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета Д 002.098.01 в Институте физики микроструктур РАН (607680, Нижегородская обл., Кстовский район, д. Афонино, ул. Академическая, д. 7).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института физики микроструктур РАН.

Автореферат разослан 21 января 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
профессор

К. П. Гайкович

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

Примеси в полупроводниках в значительной степени определяют транспортные свойства полупроводников. Например, примеси играют важную роль в качестве источника носителей тока. Кроме того, примеси являются причиной рассеяния носителей, и существенно влияют на подвижность, а также на тип и величину проводимости полупроводников.

Таким образом, изучение свойств примесей является исключительно важным для физики и техники полупроводников и полупроводниковых приборов. Практическое применение полупроводников и активное исследование примесей началось приблизительно в середине XX в. История изучения примесных свойств полупроводников достаточно подробно изложена, например, в обзоре [1]. К настоящему времени хорошо исследованы свойства локализованных состояний примесей. Но существуют ещё так называемые резонансные, или квазистационарные, примесные состояния; их энергия находится в разрешённых зонах.

Резонансные состояния примесей в полупроводниках исследуются уже достаточно давно, и известно довольно большое число их разновидностей и причин происхождения. Но резонансные примесные состояния (и связанные с ними эффекты) изучены не настолько полно, как локализованные. В настоящее время изучение резонансных состояний примесей в полупроводниках и полупроводниковых гетероструктурах по-прежнему актуально, и некоторым относящимся к этой теме задачам посвящена данная диссертационная работа.

Одна из систем, в которой существует резонанс Фано — это объёмный полярный полупроводник с простой зоной проводимости, в котором энергия продольного оптического фона превышает энергию ионизации основного уровня мелкого донора. Энергия конфигурации "электрон в основном состоянии донора + оптический фонон" находится в непрерывном спектре, и эта конфигурация смешивается с «невозмущёнными» состояниями в непрерывном спектре. В результате вероятность фотовозбуждения электронов (и оптическое поглощение) имеет асимметричную особенность вблизи резонансного значения энергии.

Насколько нам известно, до сих пор не предпринимались экспериментальные попытки обнаружить резонансы Фано в спектрах примесной фотопроводимости (или поглощения) в полярных полупроводниках *n*-типа, кроме *n*-GaAs и *n*-InP. Это может быть связано с тем, что для наблюдения указанного резонанса требуется высокое качество образцов и низкий уровень легирова-

ния. Для GaAs и InP современные технологии позволяют выполнить эти условия, но для других материалов качество получаемых образцов недостаточно высоко. Следует ожидать, что по мере совершенствования технологий роста кристаллов и легирования станет возможным наблюдение резонансов Фано в таких полярных полупроводниках, как β -GaN, InAs, GaSb, ZnSe, CdSe, CdTe. В связи с этим актуальной представляется рассмотренная в данной диссертации задача о вычислении параметров резонансов Фано в спектрах примесной фотопроводимости полупроводников, легированных донорами, кроме GaAs и InP (резонансы обусловлены полярным взаимодействием электронов проводимости с продольными оптическими фононами).

В достаточно чистых полупроводниках при низкой температуре рассеяние на заряженных примесях становится основным механизмом рассеяния электронов. Поэтому особенности в зависимостях характеристик кулоновского рассеяния от энергии носителей могут оказаться вполне заметными в экспериментальных наблюдениях. Например, особенности рассеяния могут проявиться в зависимости ширины линии циклотронного поглощения от магнитного поля. Таким образом, изучение особенностей кулоновского рассеяния, обусловленных резонансными состояниями примесей, представляется актуальным, и решению двух связанных с этим задач посвящена одна из глав данной диссертации.

В Институте физики микроструктур РАН в 2011 г. впервые было выполнено наблюдение спектральных особенностей примесной фотопроводимости n -GaAs и n -InP при энергиях, кратных энергии оптического фонона [A1]. Возникла актуальная задача о построении теоретической модели для описания результатов эксперимента. В данной диссертации предложена количественная модель, позволившая интерпретировать наблюдаемые ступенчатые особенности примесной фотопроводимости n -GaAs и n -InP.

Степень разработанности темы исследования

Свойства резонансных состояний примесей в полупроводниках исследуются уже давно. Например, работа [2] посвящена экспериментальным исследованиям спектров примесного поглощения Si, легированного акцепторными примесями B, Al, Ga и In. Авторы [2] отметили резонансные особенности в виде провалов в спектрах оптического поглощения Si:Ga. В статье [3] упомянутые особенности были объяснены резонансным взаимодействием между электронами и фононами. А в работе [4] была предпринята первая попытка описать резонансные особенности в спектрах примесного поглощения p -Si с

помощью теории Фано [5]. Но в упомянутых работах не была предложена последовательная теория для количественного описания наблюдаемых спектральных особенностей. Возможная причина этого в том, что кремний имеет сложную структуру валентной зоны, и нахождение акцепторных состояний — очень трудоёмкая вычислительная задача. В данной диссертационной работе построена теория для количественного описания резонанса Фано на состояниях акцептора в p -GaAs при участии оптических фононов. Вычисления в случае акцепторных состояний p -GaAs значительно проще, чем в случае p -Si, потому что можно воспользоваться некоторыми приближениями, которые неприменимы для p -Si.

Ранее исследовались также свойства резонансных состояний доноров в полупроводниках. В работах [6] и [7] наблюдались асимметричные пики в спектрах примесного фототока в эпитаксиальных слоях GaAs и InP, легированных мелкими донорами. Положения пиков характеризуются значениями энергии фотонов, близкими к энергиям продольных оптических (ЛО) фононов в указанных полупроводниках. В данной диссертации выполнено обобщение теории, использованной в [7], на случай других прямозонных полярных полупроводников.

Известно, что в полупроводниках под действием света возбуждаются фотоносители, распределение которых отличается от равновесного. В таких системах существуют явления периодического характера: зависимости концентрации свободных носителей, времени релаксации импульса и фотопроводимости от энергии возбуждения проявляют некоторую повторяемость с периодом, равным энергии продольного оптического фонона. В работе [8] изучались осцилляции фотопроводимости p -Si и p -Ge при температуре $T \leq 4,2$ К в магнитных полях $H = 0 - 32$ кЭ. Было дано качественное объяснение влияния магнитного поля на глубину осцилляций.

А в недавней работе [A1], видимо, впервые было выполнено экспериментальное наблюдение спектральных особенностей примесной фотопроводимости n -GaAs и n -InP при энергиях, кратных энергии оптического фонона. Особенности имеют вид хорошо различимых ступеней (переходные участки имеют ширину, много меньшую расстояния между ними). Нами предложено количественное объяснение этого эффекта [A2].

Цели и задачи диссертационной работы

Основной целью диссертационной работы является теоретическое исследование явлений, на которые влияют резонансные состояния примесей в полупроводниках и в полупроводниковых гетероструктурах. Это включает в себя решение следующих задач:

- построение теоретического описания для наблюдаемых резонансов Фано (на основном и возбуждённых состояниях акцептора) в спектрах примесного фототока в объёмных образцах p -GaAs (эксперимент описан в [9]);
- обобщение теории для описания резонансов Фано в спектре примесной фотопроводимости объёмных образцов полярных полупроводников, легированных донорами;
- расчёт характеристик резонансного кулоновского рассеяния электронов проводимости на мелких донорах в объёмных полярных полупроводниках и в структурах с квантовыми ямами;
- построение теоретического описания для наблюдаемых спектральных особенностей примесного фототока объёмных n -GaAs и n -InP при энергиях, кратных энергии оптического фонона (эксперимент описан в [A2]).

Научная новизна диссертационной работы

- теоретически описаны резонансы Фано на основном и возбуждённых состояниях акцептора в спектрах примесного фототока в объёмных образцах p -GaAs;
- обобщена теория резонансов Фано в спектрах примесной фотопроводимости объёмных полярных полупроводников на случай полярного полупроводника с простой зоной проводимости, легированного мелкими донорами (в том числе, с учётом химического сдвига основного примесного состояния). Вычислены параметры резонансов Фано в полупроводниках, в которых эти резонансы ещё не наблюдались экспериментально;
- предложена количественная модель для описания впервые обнаруженных «многофононных» спектральных особенностей примесной фотопроводимости в n -GaAs и n -InP.

Научная и практическая значимость работы

Научная значимость состоит в том, что полученные в данной диссертации результаты могут быть использованы при изучении электронных и оптических свойств полупроводников и полупроводниковых гетероструктур:

- результаты вычисления параметров резонансов Фано будут востребованы при анализе резонансов Фано в таких полярных полупроводниках, как β -GaN, InAs, GaSb, ZnSe, CdSe, CdTe (до настоящего времени резонансы Фано в спектрах примесной фотопроводимости (или поглощения) в полярных полупроводниках n -типа наблюдались только в n -GaAs и n -InP);
- в условиях, когда рассеяние на заряженных примесях является основным механизмом рассеяния электронов, особенности кулоновского рассеяния окажутся вполне заметными в экспериментальных наблюдениях. Один из аспектов научной значимости данной работы состоит в изучении особенностей кулоновского рассеяния, обусловленных резонансными состояниями примесей;
- предложено количественное описание впервые обнаруженных [A1] спектральных особенностей примесной фотопроводимости n -GaAs и n -InP при энергиях, кратных энергии оптического фонона. Особенности имеют вид хорошо различимых ступеней (переходные участки имеют ширину, много меньшую расстояния между ними).

Методология и методы исследования

При решении поставленных задач использовались: метод эффективной массы — для нахождения состояний электронов и дырок в полупроводниках; формализм Фано — для описания резонансных состояний квантовомеханических систем; кинетическое уравнение Больцмана — для нахождения функции распределения электронов в зоне проводимости, а также численные методы решения краевых задач и задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Теория, которая была ранее предложена для описания резонансов Фано в спектрах примесной фотопроводимости объёмных n -GaAs и n -InP, обобщена на случай полярного полупроводника с простой изотропной зоной проводимости, легированного мелкими донорами, с учётом химического сдвига основного примесного состояния. Вычислены характеристики резонансов Фано в спектрах примесной фотопроводимости для ряда полупроводников, в которых резонансы ещё не обнаружены экспериментально.
2. Предложена теоретическая модель для описания резонансов Фано в спектрах примесной фотопроводимости GaAs, легированного мелкими акцепторами. Для резонанса на основном состоянии предложенная модель описывает наблюдаемую ширину резонансной особенности (определяемую по половине глубины провала). Показано, что в случае резонансов Фано на возбуждённых акцепторных состояниях в p -GaAs спектральные особенности (провалы) уширены и имеют конечную глубину модуляции за счёт рассеяния на акустических фононах.
3. Резонансные состояния электронов проводимости в объёмных полярных полупроводниках с мелкими донорами (например, n -GaAs, n -InP) и в гетероструктурах с квантовыми ямами (например, $\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As} / n\text{-GaAs} / \text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}$) приводят к появлению асимметричных особенностей в энергетических зависимостях характеристик рассеяния (сечений и частот рассеяния). Рассчитаны величины этих особенностей в указанных системах. Показано, что в обоих типах систем существуют области параметров, в которых рассеяние на заряженных примесях является преобладающим, и резонансные особенности не являются малыми.
4. Наблюдаемые ступенчатые особенности в спектрах примесной фотопроводимости n -GaAs при значениях энергии, кратных энергии продольного оптического фонона $\hbar\omega_{LO}$, обусловлены особенностями энергетической релаксации фотовозбуждённых электронов (построена количественная модель, адекватно описывающая «ступени»). Вблизи энергии $2\hbar\omega_{LO}$ на вид спектра в объёмных образцах n -GaAs и n -InP существенно влияет двухфононное поглощение.

Степень достоверности результатов и апробация работы

Достоверность результатов обеспечена оптимальным выбором физических моделей, учитывающих основные свойства исследуемых систем, адекватным выбором численных методов и их применением для численных расчётов.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт физики микроструктур Российской академии наук (ИФМ РАН) в 2009–2012 гг. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на семинарах по физике полупроводников в ИФМ РАН и на следующих конференциях: XIII, XIV, XV, XVI Международные симпозиумы «Наноп физика и наноэлектроника», (Нижний Новгород 2009, 2010, 2011, 2012), XII Всероссийская молодёжная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург 2010), X Российская конференция по физике полупроводников (Нижний Новгород 2011).

Публикации

По теме диссертации опубликовано 14 работ, из них 5 статей в реферируемых журналах [A3, A4, A5, A2, A6] и 9 работ в сборниках тезисов докладов и трудов конференций [A7, A8, A9, A10, A11, A12, A13, A1, A14].

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения, обзора литературы, четырёх глав, заключения, библиографии и двух приложений. Общий объём диссертации 132 страницы. В тексте диссертации содержится 42 рисунка, 5 таблиц. Список цитированной литературы включает 105 наименований.

Основное содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана научная и практическая значимость полученных результатов, сформулированы положения, выносимые на защиту. Также приводится краткое содержание диссертации.

Обзор литературы состоит из четырёх разделов. В первом из них анализируется важнейшая для данной диссертации работа Фано 1961 г. [5] и кратко обсуждаются работы, в которых выполнено обобщение теории Фано [5] на более сложные конфигурации спектра квантовомеханических систем. Вводятся точные определения резонансного состояния и квазистационарного состояния, которые используются в диссертации.

В разделе 2 рассматриваются работы, посвящённые резонансным состояниям доноров. Анализируются случаи объёмных полупроводников без приложения внешних воздействий (электрического, магнитного полей или деформации), а также во внешнем магнитном поле. Затем рассматриваются гетероструктуры с квантовыми ямами, которые могут быть подвержены деформации или помещаться во внешние поля.

В разделе 3 представлен краткий обзор исследования резонансных состояний акцепторов в объёмных полупроводниках и в гетероструктурах. Причины существования резонансных состояний могут быть различными: электрон-фононное взаимодействие с оптическими фононами, сложная структура валентной зоны, деформация полупроводника. Исследовались случаи как мелких, так и глубоких акцепторов.

В разделе 4 рассматриваются работы, посвящённые резонансному рассеянию носителей тока на заряженных примесях в полупроводниках. Исследовались, например, такие системы, как $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$, $p\text{-Ge}$, а также халькогениды свинца PbTe , PbS , PbS (относятся к типу $\text{A}^{\text{IV}}\text{B}^{\text{VI}}$), легированные таллием.

В главах 1–4 представлены оригинальные результаты.

В первой главе строится теория резонанса Фано в спектрах примесной фотопроводимости $p\text{-GaAs}$. Причина существования резонанса Фано в том, что электрон-фононное взаимодействие с продольными оптическими фононами приводит к появлению резонансных состояний акцептора. Обсуждаемые резонансы Фано ранее наблюдались экспериментально. В разделе 1.1 представлены результаты необходимого нам обобщения теории Фано для акцепторов. Потребовалось рассмотреть случай взаимодействия нескольких дискрет-

ных состояний с несколькими континуумами. После получения выражения для волновой функции резонансного состояния были написаны формулы для матричных элементов оператора взаимодействия с излучением между основным акцепторным состоянием и резонансным состоянием.

В разделе 1.2 вычисляются волновые функции акцепторных состояний в рамках сферической модели [10–12]. Рассматривается изотропный гамильтониан Латтинжера, учитывающий подзоны лёгких и тяжёлых дырок. Анализ гамильтониана в сферической модели основывается на использовании неприводимых представлений тензорных операторов (этот вопрос рассматривается в квантовой теории углового момента; см., например, [13]). Для описания фотопроводимости достаточно рассматривать состояния, которые происходят из водородоподобных nS и nP , т.к. основное состояние акцептора происходит из nS , а оператор взаимодействия с излучением является дипольным и связывает состояния с проекциями момента, отличающимися на ± 1 . Для нахождения дискретных состояний акцептора использовался метод стрельбы. Для нахождения состояний в непрерывном спектре использовалось то обстоятельство, что на достаточно большом расстоянии от кулоновского центра дырка является практически свободной и её волновая функция должна быть близка к линейной комбинации волновых функций свободного движения. Коэффициенты в указанной линейной комбинации находились из условия, что при продолжении решения системы дифференциальных уравнений до точки, близкой к началу координат $r = 0$, волновая функция должна стремиться к нулю в случае P -состояний и к ненулевой константе в случае S -состояний.

Затем в разделе 1.3 выполняется вычисление матричных элементов электрон-фононного взаимодействия и дипольного взаимодействия электронов с излучением. Анализируются симметричные свойства волновых функций и операторов взаимодействия; эти свойства накладывают ограничения на квантовые числа фононов, с которыми осуществляется взаимодействие, и на возможные переходы под действием излучения.

Далее, в разделе 1.4 вычисляется вероятность фотоионизации различных состояний акцептора и сопоставляются теоретические и экспериментальные результаты. Показано, что полная вероятность фотоионизации даётся суммой нескольких слагаемых, каждое из которых может быть записано в виде формулы Фано. Существенными оказываются только переходы в один или два континуума P -типа; остальными переходами можно пренебречь. Для резонанса на основном состоянии акцептора (рис. 1) вычисленная ширина особенности согласуется с полученной экспериментально (измеренной по половине

глубины наблюдаемого провала), но форма особенности неудовлетворительно описывается теорией. Учёт кубических поправок [14] к изотропному гамильтониану акцептора не улучшает соответствие. Особенности на возбуждённых состояниях (рис. 2) не удаётся описать адекватно в рамках представленной модели, но их вид можно описать, если предположить, что существенным является рассеяние дырок в валентной зоне на акустических фононах.

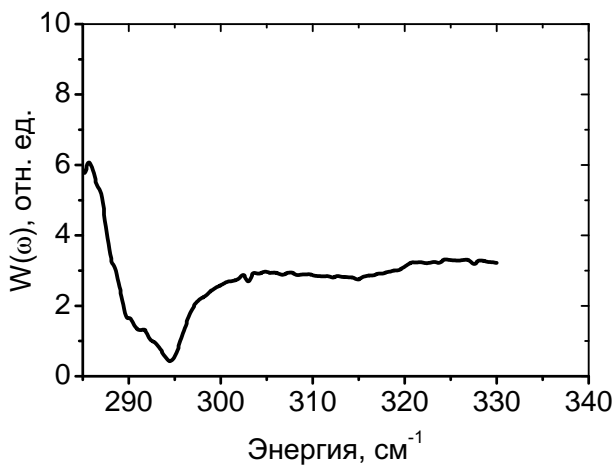


Рис. 1. Спектр вероятности примесных дипольных переходов в p -GaAs, легированном цинком. Экспериментальные результаты взяты из [9].

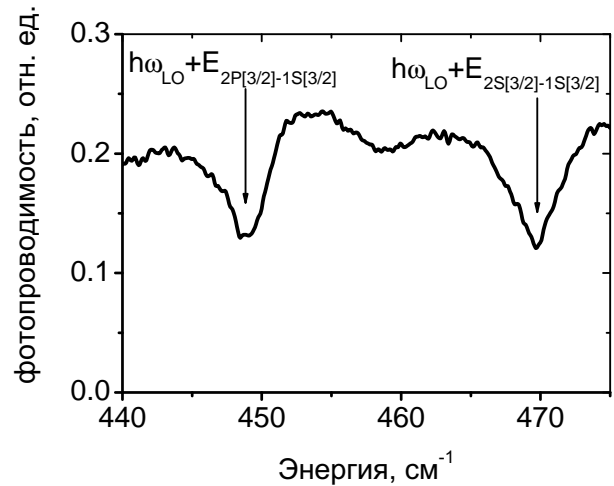


Рис. 2. Спектр фотопроводимости p -GaAs, легированном цинком, в области резонансов, соответствующих возбуждённым состояниям акцептора [9].

В разделе 1.5 сформулированы выводы по первой главе диссертации; результаты первой главы опубликованы в работе [A4].

Во второй главе рассчитаны параметры резонанса Фано в спектре примесной фотопроводимости полупроводников, легированных донорами. Рассматриваются полярные полупроводники с простой зоной проводимости, в которых взаимодействие электронов с продольными оптическими фононами приводит к появлению резонансных состояний в зоне проводимости.

В разделе 2.1 вычисляются параметры Фано без учёта химического сдвига, т.е. в случае, когда донорный центр хорошо описывается в рамках водородоподобного приближения. Параметры Фано определяются энергией ионизации основного состояния донора и энергией оптического фонона; получены выражения для этих параметров. Вычислены параметры резонансов Фано для полупроводников, в которых этот резонанс в спектрах примесной фотопроводимости ещё не наблюдался экспериментально. Важно отметить, что используемое теоретическое описание резонанса Фано справедливо только при достаточно большом времени жизни τ_{LO} продольного оптического фо-

нона — оно должно быть много больше времени жизни квазистационарного состояния.

В разделе 2.2 исследуется влияние химического сдвига основного донорного состояния (при котором энергия ионизации увеличивается) на параметры резонанса Фано. Используется простая модель потенциала центральной ячейки малого радиуса (много меньшего, чем эффективный боровский радиус примеси). В этой модели вид волновой функции основного состояния снаружи центральной ячейки определяется исключительно энергией состояния и не зависит от вида самого потенциала центральной ячейки. А поведение волновой функции внутри центральной ячейки не важно, потому что оно практически не влияет на величины матричных элементов нужных операторов. Энергия основного состояния рассматривается как задаваемый параметр, и характеристики резонанса Фано вычисляются как функции этого параметра (и энергии оптического фонона). Результаты для нескольких полупроводников приведены на рис. 3.

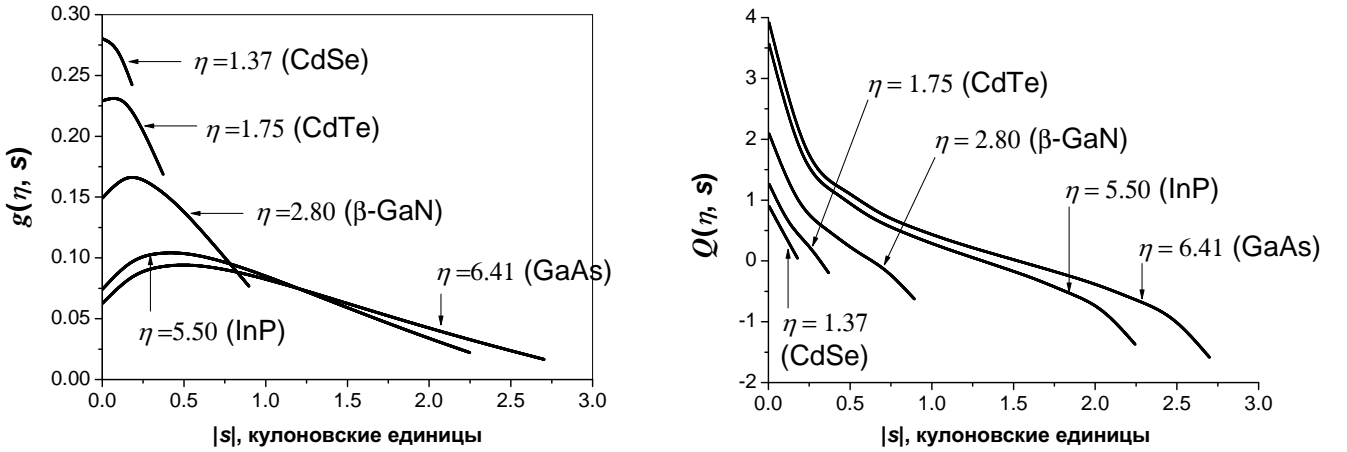


Рис. 3. Кривые $g(\eta = \text{fixed}, s)$ (слева) и $Q(\eta = \text{fixed}, s)$ (справа) для нескольких полупроводников. Обозначения: s — химический сдвиг основного состояния донора в кулоновских единицах ($s < 0$), $\eta \equiv \hbar\omega_{LO}/\varepsilon_i$, $\hbar\omega_{LO}$ — энергия продольного оптического фонона, ε_i — энергия ионизации водородоподобного донора, $\Gamma(\eta) = \hbar\omega_{LO}(\kappa_0/\kappa_\infty - 1) \cdot g(\eta)$ — ширина резонанса (первый параметр Фано), $Q(\eta)$ — второй параметр Фано, κ_0 и κ_∞ — низкочастотная и высокочастотная диэлектрические проницаемости кристалла.

В разделе 2.3 сформулированы выводы по второй главе диссертации; результаты второй главы опубликованы в работе [А3].

Третья глава посвящена теоретическому исследованию резонансного кулоновского рассеяния в двух системах: объёмные образцы полярных полупроводников вида $A^{III}B^V$ и гетероструктуры с квантовыми ямами. В первом случае резонансные состояния возникают благодаря электрон-фононно-

му взаимодействию с ЛО-фононами. Во втором случае вырождение некоторых значений энергии в непрерывном спектре обусловлено только эффектом размерного квантования (не связано с фононами).

Первая задача решается в разделе 3.1. В достаточно чистых полупроводниках при низкой температуре рассеяние на заряженных примесях становится основным механизмом рассеяния электронов. Поэтому особенности характеристик кулоновского рассеяния могут оказаться вполне заметными в экспериментальных наблюдениях. В параграфе 3.1.1 изложен метод расчёта амплитуды рассеяния на кулоновском потенциале заряженной примеси с учётом резонансных состояний. Используется известный подход, в котором амплитуда рассеяния выражается в виде ряда, содержащего фазы рассеяния, а квазистационарные уровни учитываются с помощью введения мнимой добавки к энергии электрона в непрерывном спектре.

В параграфе 3.1.2 рассматриваются конкретные примеры полупроводников n -GaAs и n -InP, для которых вычисляется дифференциальное сечение рассеяния. Рассчитываются полное и транспортное сечения рассеяния при некоторых характерных значениях концентрации заряженных доноров (рис. 4). Показано, что особенности энергетических зависимостей характеристик рассеяния не являются малыми. Обсуждается возможность экспериментального наблюдения особенностей рассеяния. В условиях циклотронного резонанса (ЦР) в квантующем магнитном поле ширина линии ЦР должна иметь особенность, когда при изменении магнитного поля первый уровень Ландау проходит через резонансное значение энергии.

Вторая задача решается в разделе 3.2. Если ширина квантовой ямы такова, что расстояние по энергии между двумя нижними подзонами размерного квантования меньше энергии ЛО-фонона, то рассеяние электронов с кинетической энергией меньше расстояния между нижними подзонами с испусканием ЛО-фонона не будет происходить. В этих условиях при низких температурах в чистых полупроводниках существенным является только рассеяние на заряженных примесях.

В параграфе 3.2.1 вычисляется амплитуда рассеяния на потенциале $(-1/\rho)$ в двумерной задаче. Это вспомогательные результаты, которые позволяют выразить характеристики рассеяния через фазы рассеяния, в том числе в ситуации, когда реальный потенциал заметно отличается $(-1/\rho)$ только в ограниченной области пространства.

В параграфе 3.2.2 рассчитываются состояния электронов в квантовой яме. Учитываются только две нижние подзоны размерного квантования, резо-

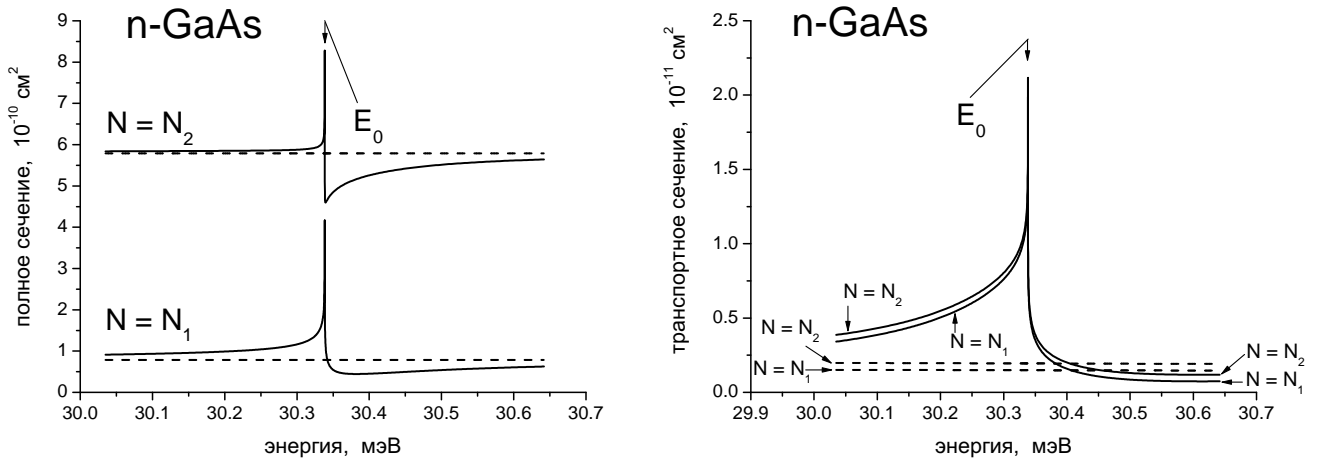


Рис. 4. Полные сечения рассеяния $\sigma_{tot}(E, \theta_{min})$, $\sigma_{tot}^{(R)}(E, \theta_{min})$ (слева) и транспортные сечения рассеяния $\sigma_{tr}(E, \theta_{min})$, $\sigma_{tr}^{(R)}(E, \theta_{min})$ (справа) при двух различных значениях концентрации доноров ($N_1 = 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $N_2 = 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) для $n\text{-GaAs}$. Сплошные кривые — сечения рассеяния с учётом резонансных состояний, пунктирные кривые — без учёта резонансных состояний. E — энергия электрона, E_ϕ — резонансная энергия, θ_{min} — минимальный угол рассеяния.

нансные состояния находятся под дном второй подзоны в непрерывном спектре первой подзоны. Вид потенциала донора учитывает экранировку в простейшем приближении — с помощью статической диэлектрической константы.

В параграфе 3.2.3 рассчитываются фазы и сечения рассеяния. На их основе вычисляются полная и транспортная частоты рассеяния при учёте распределения положений донорных центров по толщине квантовой ямы при выбранной характерной двумерной концентрации примеси (рис. 5).

Характеристики рассеяния имеют особенности в энергетических зависимостях при энергиях, близких к резонансным значениям. Особенности не являются малыми. Обсуждаются возможности их экспериментального наблюдения.

Результаты третьей главы опубликованы в работах [А5] (резонансное рассеяние в объёмных полупроводниках) и [А6] (резонансное рассеяние в структурах с квантовой ямой).

В четвёртой главе теоретически описываются «многофононные» особенности в спектрах примесной фотопроводимости $n\text{-GaAs}$ и $n\text{-InP}$, которые впервые наблюдались экспериментально. (Эксперимент не является заслугой автора данной диссертации; автор занимался только теоретическим описанием.) Существуют спектральные особенности фотопроводимости при энергиях, кратных энергии LO-фонона (от двух до пяти для $n\text{-GaAs}$; в $n\text{-InP}$ удалось

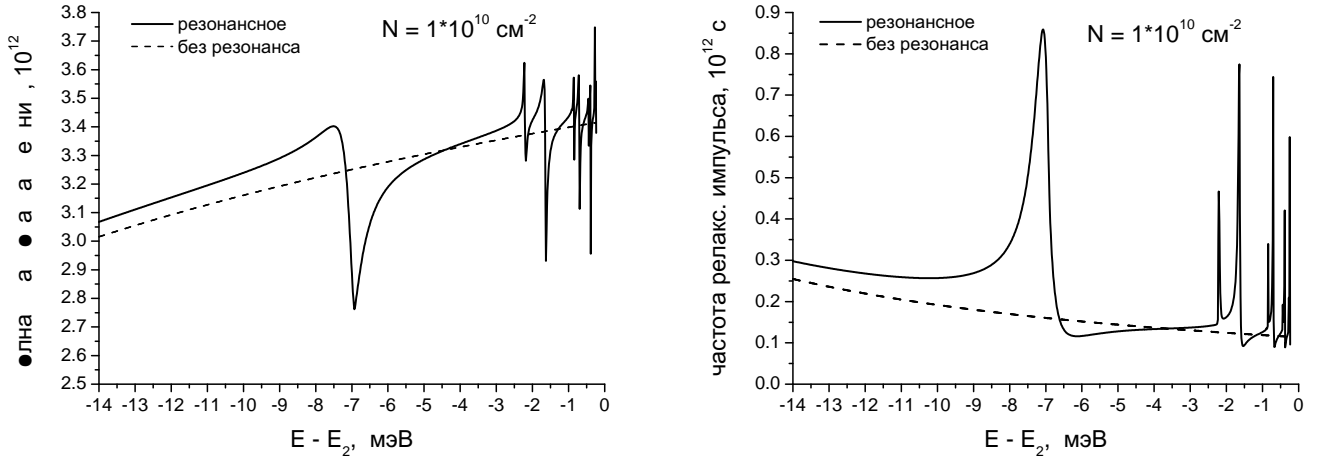


Рис. 5. Полная частота рассеяния (слева) и частота рассеяния импульса (справа) в зависимости от энергии электрона под второй подзоной в квантовой яме (гетероструктура $\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As} / n\text{-GaAs} / \text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}$). Выбрана концентрация заряженных доноров $N = 10^{10} \text{ см}^{-2}$.

наблюдать только двукратную особенность). Особенности (кроме двукратных) имеют вид скачков, ширина которых близка к энергии ионизации примеси, т.е. примерно на порядок превосходит ширину резонансов Фано (рис. 6).

В разделе 4.1 представлены некоторые подробности об условиях проведения эксперимента. Использовались структуры с толстыми слоями GaAs и InP, выращенные методом MOCVD. Источниками излучения служили в одном случае глобар, в другом — перестраиваемый параметрический оптический генератор.

В разделе 4.2 представлена теоретическая модель для анализа (3,4,5)-кратных спектральных особенностей фотопроводимости $n\text{-GaAs}$. Причиной эффекта являются особенности релаксации энергии фотовозбуждённых электронов в зоне проводимости (рис. 7). Сигнал фотопроводимости определяется распределением электронов в зоне и зависимостью времени релаксации импульса от энергии. Мы учитывали релаксацию импульса за счёт полярного акустического (РА) и деформационного акустического (ДА) рассеяния, а также за счёт рассеяния на заряженных примесях. Функция распределения электронов находилась путём решения кинетического уравнения Больцмана в пространстве полной энергии [15]. Затем вычислялась проводимость электронной системы при различной энергии квантов фотовозбуждения. Получены ступенчатые особенности в зависимости проводимости от длины волны фотовозбуждения, которые качественно согласуются с экспериментальными результатами.

В разделе 4.3 анализируются двухфононные особенности в спектрах примесной фотопроводимости $n\text{-GaAs}$ и $n\text{-InP}$. Они имеют вид не ступеней, а

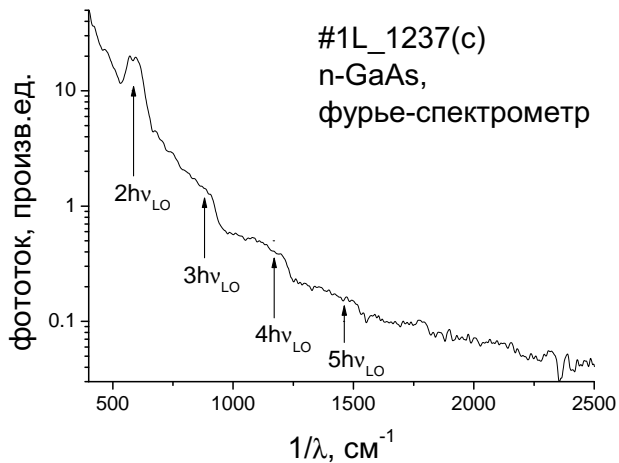


Рис. 6. Особенности в спектре примесной фотопроводимости GaAs, снятом с помощью фурье-спектрометра. Стрелками отмечены точные значения энергии, кратные энергии оптического фонона $\hbar\omega_{LO}$.

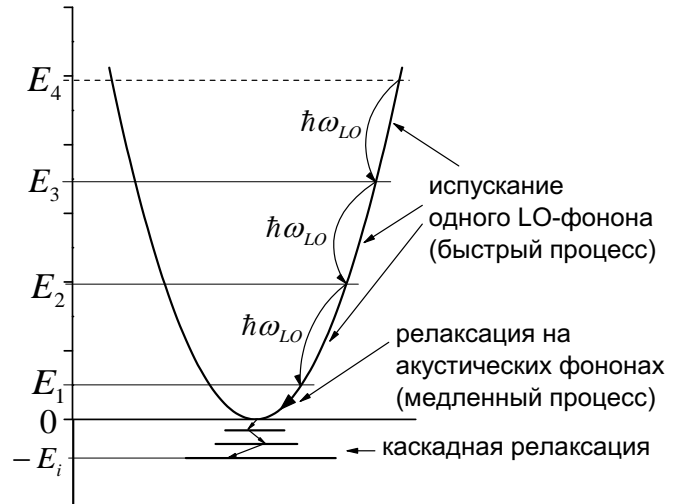


Рис. 7. Схема энергетической релаксации и захвата электрона под влиянием процессов неупругого рассеяния на оптических (LO) и акустических фононах.

пиков сложного вида и несимметричной формы. Высказана гипотеза о том, что двухфононные особенности тоже имели бы вид ступеней, если учитывать только электронные эффекты в фотопроводимости. Но из-за существенной роли двухфононного решёточного поглощения (на оптических фононах) в этих кристаллах особенности приобретают вид асимметричных пиков. Эта гипотеза подтверждается имеющимися экспериментальными данными по двухфононному оптическому поглощению в GaAs и InP.

В разделе 4.4 сформулированы выводы по четвёртой главе диссертации; результаты четвёртой главы опубликованы в работе [A2].

В Заключение сформулированы основные результаты работы.

Основные результаты работы

1. Теория, которая была ранее предложена для описания резонансов Фано в спектрах примесной фотопроводимости объёмных n -GaAs и n -InP, обобщена на случай полярного полупроводника с простой изотропной зоной проводимости, легированного мелкими донорами, с учётом химического сдвига основного примесного состояния. Вычислены характеристики резонансов Фано для ряда полупроводников, в которых резонансы ещё не обнаружены экспериментально.
2. Предложена теоретическая модель для описания резонансов Фано в спектрах примесной фотопроводимости GaAs, легированного мелкими акцепторами. Для резонанса на основном состоянии предложенная модель описывает наблюдаемую ширину резонансной особенности (измеренную по половине глубины наблюдаемого провала). Показано, что в случае резонансов Фано на возбуждённых акцепторных состояниях в p -GaAs спектральные особенности (провалы) уширены и имеют конечную глубину модуляции за счёт рассеяния на акустических фононах.
3. Резонансные состояния электронов проводимости в объёмных полярных полупроводниках с мелкими донорами (например, n -GaAs, n -InP) и в гетероструктурах с квантовыми ямами (например, $\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As} / n\text{-GaAs} / \text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}$) приводят к появлению асимметричных особенностей в энергетических зависимостях характеристик рассеяния (сечений и частот рассеяния). Рассчитаны величины этих особенностей в указанных системах. Показано, что в обоих типах систем существуют области параметров, в которых рассеяние на заряженных примесях является преобладающим, и резонансные особенности не являются малыми.
4. Показано, что наблюдаемые ступенчатые особенности в спектрах примесной фотопроводимости n -GaAs при значениях энергии, кратных энергии продольного оптического фонона $\hbar\omega_{LO}$, обусловлены особенностями энергетической релаксации фотовозбуждённых электронов. Построена количественная модель, адекватно описывающая «ступени» на спектрах примесной фотопроводимости.

Список публикаций

- A1. Алёшкин, В. Я. Спектральные особенности примесной фотопроводимости n -GaAs при энергиях, кратных энергии оптического фонона / В. Я. Алёшкин, А. В. Антонов, Д. И. Бурдейный // XVI Международный симпозиум «Нанofизика и наноэлектроника», Нижний Новгород. — 2012. — С. 187–188.
- A2. Aleshkin, V. Ya. Features in the impurity photoconductivity spectra of n -GaAs and n -InP at the energies multiple of the optical phonon energy / V. Ya. Aleshkin, A. V. Antonov, D. I. Burdeiny // Semicond. Sci. Technol. — 2012. — Vol. 27. — P. 115008.
- A3. Aleshkin, V. Ya. Calculation of the parameters for the Fano resonance in the impurity photocurrent spectrum of semiconductors doped with hydrogen-like donors / V. Ya. Aleshkin, D. I. Burdeiny, L. V. Gavrilenko // Semicond. Sci. Technol. — 2010. — Vol. 25. — P. 085005.
- A4. Алёшкин, В. Я. Теория резонанса Фано в спектрах примесного возбуждения p -GaAs / В. Я. Алёшкин, Д. И. Бурдейный, М. С. Жолудев // ФТТ. — 2011. — Т. 53. — С. 1112–1120.
- A5. Aleshkin, V. Ya. Resonance Coulomb scattering by shallow donor impurities in GaAs and InP / V. Ya. Aleshkin, D. I. Burdeiny // Semicond. Sci. Technol. — 2011. — Vol. 26. — P. 095003.
- A6. Алёшкин, В. Я. Резонансное кулоновское рассеяние на мелких донорах в квантовых ямах AlGaAs / n -GaAs / AlGaAs / В. Я. Алёшкин, Д. И. Бурдейный // ФТП. — 2013. — Т. 47. — С. 466–472.
- A7. Алёшкин, В. Я. Теоретическое исследование резонанса Фано в спектре примесной фотопроводимости акцепторов в объёмном материале p -GaAs / В. Я. Алёшкин, Д. И. Бурдейный // XIII Международный симпозиум «Нанofизика и наноэлектроника», Нижний Новгород. — 2009. — С. 317–318.
- A8. Алёшкин, В. Я. Изотропная модель для описания резонансов Фано в спектрах примесной фотопроводимости p -GaAs / В. Я. Алёшкин, Д. И. Бурдейный, М. С. Жолудев // XIV Международный симпозиум «Нанofизика и наноэлектроника», Нижний Новгород. — 2010. — С. 18–19.

- A9. Алёшкин, В. Я. Резонанс Фано в спектре примесной фотопроводимости в полярных полупроводниках, легированных водородоподобной примесью / В. Я. Алёшкин, Д. И. Бурдейный, Л. В. Гавриленко // XIV Международный симпозиум «Нанофизика и нанoeлектроника», Нижний Новгород. — 2010. — С. 426–427.
- A10. Алёшкин, В. Я. Резонанс Фано в спектре примесной фотопроводимости в полярных полупроводниках, легированных водородоподобной примесью / В. Я. Алёшкин, Д. И. Бурдейный, Л. В. Гавриленко // XII Всероссийская молодёжная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и нанoeлектронике, Санкт-Петербург. — 2010. — С. 9.
- A11. Алёшкин, В. Я. Особенности в спектрах примесной фотопроводимости n -GaAs и n -InP в окрестности удвоенной энергии LO-фононов / В. Я. Алёшкин, А. В. Антонов, Д. И. Бурдейный // XV Международный симпозиум «Нанофизика и нанoeлектроника», Нижний Новгород. — 2011. — С. 459–460.
- A12. Алёшкин, В. Я. Резонансное кулоновское рассеяние на мелких донорах в GaAs и InP / В. Я. Алёшкин, Д. И. Бурдейный // X Российская конференция по физике полупроводников, Нижний Новгород. — 2011. — С. 165.
- A13. Алёшкин, В. Я. Резонансные особенности в спектрах примесной фотопроводимости полярных полупроводников, обусловленные взаимодействием электронов с оптическими фононами / В. Я. Алёшкин, А. В. Антонов, Д. И. Бурдейный, Л. В. Гавриленко // X Российская конференция по физике полупроводников, Нижний Новгород. — 2011. — С. 163.
- A14. Алёшкин, В. Я. Резонансное кулоновское рассеяние на мелких донорах в квантовых ямах AlGaAs / n -GaAs / AlGaAs / В. Я. Алёшкин, Д. И. Бурдейный // XVI Международный симпозиум «Нанофизика и нанoeлектроника», Нижний Новгород. — 2012. — С. 206–207.

Цитированная литература

1. Ramdas, A. K. Spectroscopy of the solid-state analogues of the hydrogen atom: donors and acceptors in semiconductors / A. K. Ramdas, S. Rodriguez // Rep. Prog. Phys. — 1981. — Vol. 44. — P. 1297–1387.

2. Hrostowski, H. J. Infrared spectra of Group III acceptors in silicon / H. J. Hrostowski, R. H. Kaiser // J. Phys. Chem. Solids. — 1958. — Vol. 4. — P. 148–153.
3. Onton, A. Spectroscopic Investigation of Group-III Acceptor States in Silicon / A. Onton, P. Fisher, A. K. Ramdas // Phys. Rev. — 1967. — Vol. 163. — P. 686–703.
4. Watkins, G. D. Resonant interactions of optical phonons with acceptor continuum states in silicon / G. D. Watkins, W. B. Fowler // Phys. Rev. B. — 1977. — Vol. 16. — P. 4524–4529.
5. Fano, U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts / U. Fano // Phys. Rev. — 1961. — Vol. 124. — P. 1866–1878.
6. Jin, K. Phonon-induced photoconductive response in doped semiconductors / K. Jin, J. Zhang, Z. Chen et al. // Phys. Rev. B. — 2001. — Vol. 64. — P. 205203.
7. Алёшкин, В. Я. Резонанс Фано в спектре примесной фотопроводимости InP, легированного мелкими донорами / В. Я. Алёшкин, А. В. Антонов, В. И. Гавриленко и др. // ФТТ. — 2008. — Т. 50. — С. 1162–1165.
8. Банная, В. Ф. Осцилляции примесной фотопроводимости в p -Si и p -Ge и влияние на них магнитного поля / В. Ф. Банная, Е. М. Гершензон, Ю. П. Ладыжинский, Т. Г. Фукс // ФТП. — 1973. — Т. 7. — С. 1092–1099.
9. Алёшкин, В. Я. Резонансы Фано в спектре примесного фототока в соединении GaAs и в гетероструктуре InGaAs/GaAsP с квантовыми ямами, легированными мелкими акцепторами / В. Я. Алёшкин, А. В. Антонов, В. И. Гавриленко и др. // ЖЭТФ. — 2009. — Т. 136. — С. 543–549.
10. Гельмонт, Б. Л. Акцепторные уровни в полупроводнике со структурой алмаза / Б. Л. Гельмонт, М. И. Дьяконов // ФТП. — 1971. — Т. 5. — С. 2191.
11. Гельмонт, Б. Л. Примесные состояния в полупроводнике с нулевой запрещённой зоной / Б. Л. Гельмонт, М. И. Дьяконов // ЖЭТФ. — 1972. — Т. 62. — С. 713.

12. Baldereschi, A. Spherical Model of Shallow Acceptor States in Semiconductors / A. Baldereschi, N. O. Lipari // Phys. Rev. B. — 1973. — Vol. 8. — P. 2697–2709.
13. Варшалович, Д. А. Квантовая теория углового момента / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский. — Ленинград: Наука, 1975.
14. Baldereschi, A. Cubic contributions to the spherical model of shallow acceptor states / A. Baldereschi, N. O. Lipari // Phys. Rev. B. — 1974. — Vol. 9. — P. 1525–1539.
15. Абакумов, В. Н. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках / В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич. — С.-Петербург: Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова РАН, 1997.

Бурдейный Дмитрий Игоревич

**ЭЛЕКТРОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ МЕЛКИХ ПРИМЕСЕЙ В
ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $A^{III}B^V$**

Автореферат

Подписано к печати 13 декабря 2012 г.

Тираж 100 экз.

Отпечатано на ризографе Института физики микроструктур РАН,
603950, Нижний Новгород, ГСП-105