

1. Classificação <i>INPE-COM.4/RPE</i> <i>C.D.U.: 539.2</i>		2. Período	4. Distribuição
3. Palavras Chaves (selecionadas pelo autor) <i>BANDAS DE IMPUREZAS</i> <i>ENERGIA DE IONIZAÇÃO</i> <i>SEMICONDUCTORES DOPADOS</i>			interna <input type="checkbox"/> externa <input checked="" type="checkbox"/>
5. Relatório nº <i>INPE-2129-RPE/353</i>	6. Data <i>Junho, 1981</i>	7. Revisado por <i>H. Closs</i> <i>Huberto Closs</i>	
8. Título e Sub-Título <i>"EFEITOS DA ENERGIA DE TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS</i> <i>EM SEMICONDUCTORES"</i> .		9. Autorizado por <i>N. Parada</i> <i>Nelson de Jesus Parada</i> <i>Diretor</i>	
10. Setor <i>DTE</i>	Código	11. Nº de cópias <i>12</i>	
12. Autoria <i>M. Fabbri</i> <i>A. Ferreira da Silva</i> <i>I.C. da Cunha Lima</i> <i>R. Kishore</i>		14. Nº de páginas <i>10</i>	
13. Assinatura Responsável 		15. Preço	
16. Sumário/Notas <i>Investiga-se o comportamento das bandas de impurezas em semicondutores através da integral de energia de transferência de elétrons. Calcula-se a resistividade do Germânio dopado com Antimônio (Ge:Sb) levando-se em consideração os efeitos daquela integral e comparam-se aos resultados experimentais, os quais apresentam concordância satisfatória. Desprezando os efeitos de localização, compara-se a variação do "gap" Δg entre as bandas de impurezas com a energia de ativação ϵ_2, obtida experimentalmente para o Ge:Sb e Si:P às concentrações diferentes.</i>			
17. Observações <i>Trabalho a ser apresentado na 33^a Reunião Anual da SBPC e submetido para publicação na Revista Brasileira de Física.</i>			

Efeitos da Energia de Transferência de Elétrons em Semicondutores.

M. FABBRI, A. FERREIRA DA SILVA, I.C. DA CUNHA LIMA E R. KISHORE.

Instituto de Pesquisas Espaciais, INPE - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq - 12200 S.J. dos Campos, SP

The behavior of impurity bands in semiconductors is investigated via the electron transfer energy integral. The resistivity of Ge:Sb is calculated for various types of transfer integral and compared with the experimental results. Neglecting localization effects, the variation of the energy gap Δg between impurity bands is compared with the experimental activation energy ϵ_2 of Si:P and Ge:Sb, for different concentrations. A qualitative agreement with the experiment has been found.

Investiga-se o comportamento das bandas de impurezas em semicondutores através da integral de energia de transferência de elétrons. Calcula-se a resistividade do Germânio dopado com Antimônio (Ge:Sb) levando-se em consideração os efeitos daquela integral e comparam-se aos resultados experimentais, os quais apresentam concordância satisfatória. Desprezando os efeitos de localização, compara-se a variação do "gap" Δg entre as bandas de impurezas com a energia de ativação ϵ_2 , obtida experimentalmente para o Ge:Sb e Si:P às concentrações diferentes.

Interessa-se aqui pelo estudo simultâneo de desordem e correlação em semicondutores dopados, à concentração baixa e intermediária de impurezas. A concentração intermediária ($<10^{16} \text{cm}^{-3}$ em Ge e $\leq 10^{18} \text{cm}^{-3}$ em Si), onde a distância média entre impurezas é pouco maior do que o

raio de Bohr da impureza, a energia média de transferência é comparável à energia de correlação U . Seguindo este raciocínio, Fritzsche¹ sugeriu a possibilidade da existência de uma configuração eletrônica com dois elétrons ocupando o mesmo "site", o que foi chamado de estado D^- (adicional ao estado D^0 , que tem um elétron por "site", dando origem à banda de impureza abaixo da de D^-). Assim para a concentração intermediária, uma nova energia de ativação ϵ_2 é observada. Esta energia, entre as duas bandas de impurezas, que leva em consideração estados localizados e conseqüentemente, à "mobility edge", decresce rapidamente com a concentração N de impurezas e desaparece a uma concentração crítica N_c . Acima desta concentração a condução entra na região metálica. Usa-se o hamiltoniano de Hubbard² na aproximação "tight binding", incluindo o termo de correlação intra atômico, U :

$$H = \sum_{i\sigma} E_d n_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} V_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \quad (1)$$

onde $a_{i\sigma}^\dagger$ e $a_{i\sigma}$ são, respectivamente, operadores de criação e destruição de elétrons de impurezas, do "spin" σ ligado ao "site" i , $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$; E_d é a energia de ionização, e V_{ij} é a energia de transferência de elétrons entre os "sites" i e j .

Define-se a função de Green

$$G_{ij\sigma}^\pm(t) = i\theta(t) \langle [a_{i\sigma} n_{i-\sigma}^\pm, a_{j\sigma}]_+ \rangle, \quad (2)$$

e utilizando-se a teoria já previamente desenvolvida³ chega-se a:

$$(\omega - E^\pm) G_{ij\sigma}^\pm(\omega) = n_{-\sigma} \delta_{ij} + \sum_{\ell} V_{i\ell} G_{\ell j\sigma}^\pm(\omega) \quad (3)$$

onde $E^+ = E_d + U$ e $E^- = E_d$.

Em seguida, usa-se o tratamento de Matsubara-Toyozawa⁴ para incluir o

efeito de desordem, chegando-se à função de Green da média das configurações:

$$\overline{G_{ij}^{\pm}(\omega)} = \frac{n_{-\sigma}^{\pm}}{\omega - \epsilon^{\pm}} \zeta(\omega - \epsilon^{\pm}) \quad (4)$$

onde $\zeta(\omega) = \frac{1}{1 - \eta(\omega)}$,

$$\eta(\omega) = \frac{N\zeta(\omega)}{8\pi^3\omega^3} \int \frac{v^2(\vec{k}) d\vec{k}}{1 - \frac{N\zeta(\omega)}{\omega^2} v(\vec{k})} \quad (5)$$

e $v(\vec{k})$ é a transformada de Fourier de V_{ij} , obtida da função de onda 1s do hidrogênio. Obtem-se a densidade de estado.

$$D^{\pm}(\omega) = -\frac{N}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_{\sigma} \text{Im} \left\{ \overline{G_{i\sigma}^{\pm}(\omega \pm i\epsilon)} \right\} \quad (6)$$

onde $D^+(\omega)$ e $D^-(\omega)$ correspondem às densidades de estados das bandas alta e baixa de Hubbard respectivamente.

Usam-se três tipos de V_{ij} da equação 3; a de Matsubara-Toyozawa^{3,4}

$$V_{ij}(\text{MT}) = -V_0 (1 + \alpha R) \exp(-\alpha R) \quad (7)$$

a de Heitler-London⁵

$$V_{ij}(\text{HL}) = \frac{1}{2(1+S^2)} \left[\alpha^2(KS+S^2) + \alpha(2KS + \frac{K'}{2}) \right] \quad (8)$$

e a da correção da parte não-ortogonal⁶ entre funções de onda de impurezas, centradas em "sites" diferentes, tipo - $\langle i|j \rangle \langle j|V_j|j \rangle$, que deduzida chega à sua forma final normalizada

$$V_{ij}(\text{NO}) = \frac{-V_0}{(1+S-2S^2)^{1/2}} \left[(1+\alpha R) - \frac{1-(1+\alpha R)\exp(-2\alpha R)}{\alpha R} \cdot \left(1 + \alpha R + \frac{\alpha^2 R^2}{3} \right) \right] \exp(-\alpha R) \quad (9)$$

onde S , K e K' são as integrais de Slater, $V_0 = 2|E_d|$, e α^{-1} é o raio de Bohr da impureza a_H^* . Comparados em grandeza, observa-se que $|V_{ij}(NO)| \ll |V_{ij}(MT)|$, o que diminui drasticamente a largura das bandas de impurezas, apresentadas nas Figuras 1 e 2.

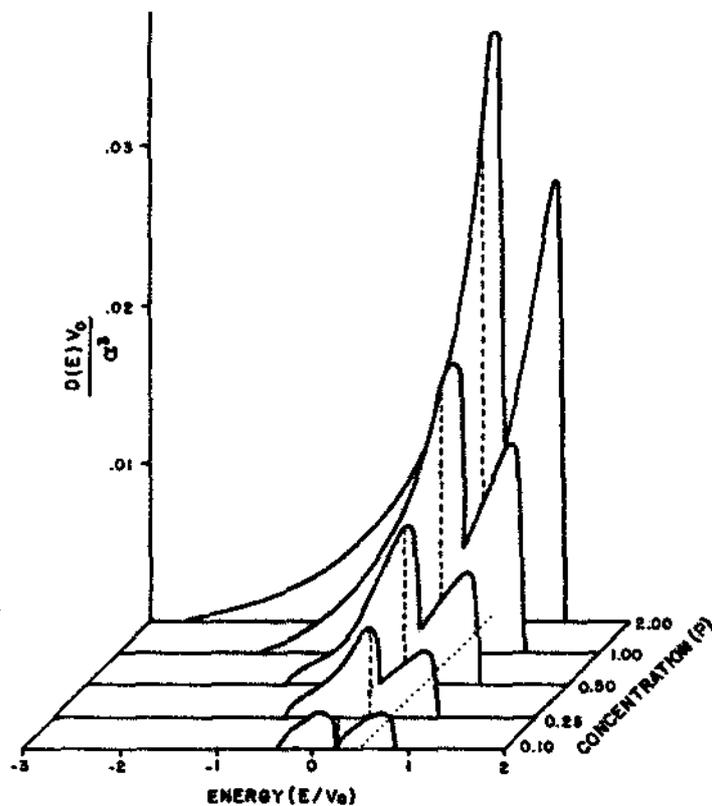


Fig. 1 - Densidade de estados $D(E)$, obtidos das duas bandas de Hubbard em função da concentração de impurezas $P = 32\pi Na_H^{*3}$, usando-se $V_{ij}(MT)$.

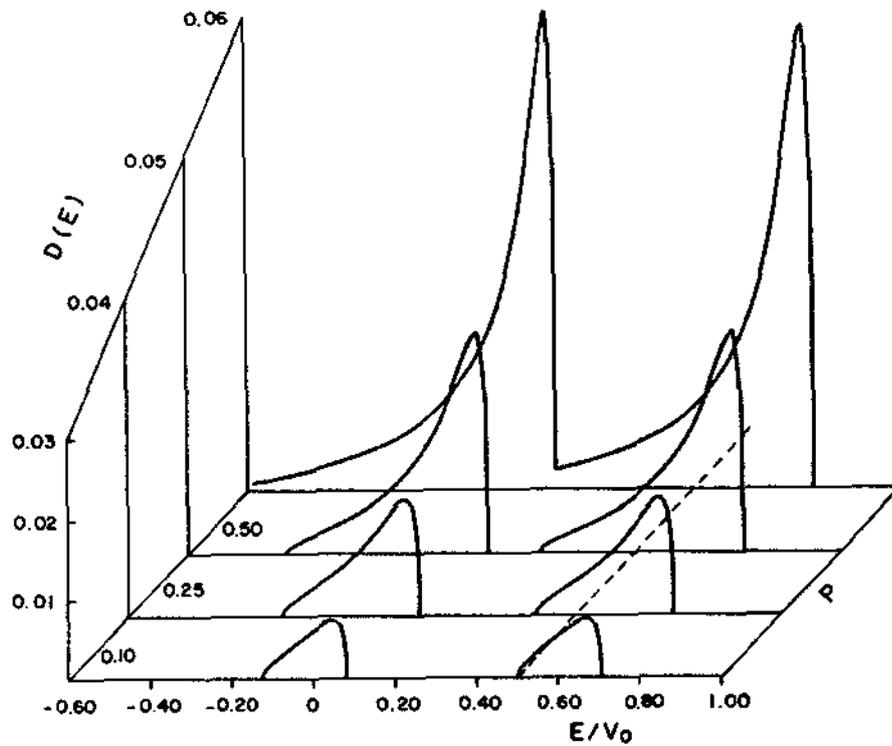


Fig. 2 - $D(E) \times P$ para $V_{ij}(NO)$.

Desprezando-se os efeitos de localização, calcula-se a variação do "gap" entre as bandas de impurezas, e compara-se (Figuras 3 e 4) com a energia de ativação ϵ_2 observada para o Ge:Sb¹ e o Si:P⁷. O mesmo comportamento foi obtido quando dos cálculos feitos por Kikuchi⁸ para o Ge:Sb.

Observa-se que, qualitativamente, os resultados teóricos concordam com o comportamento obtido experimentalmente, sendo que a energia de ativação, em função da concentração de impurezas, é sensível a mudanças no raio de Bohr e aos efeitos de correlação de elétrons.

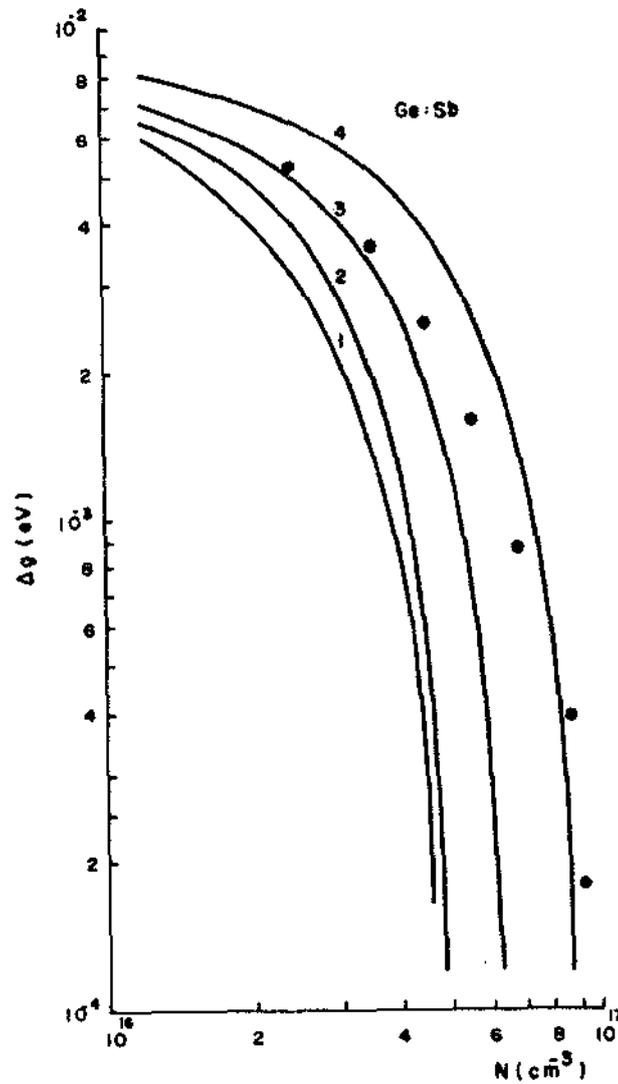


Fig.3 - Variação do "gap" Δg entre as bandas com a concentração de impurezas para raios de Bohr a_H^* e V_{ij} diferentes.

Para a curva 1 usa-se $V_{ij}^{(MT)}$ e $a_H^* = 40 \text{ \AA}$; para a curva 2 $V_{ij}^{(HL)}$ e $a_H^* = 43.7 \text{ \AA}$; para a curva 3 $V_{ij}^{(HL)}$ e $a_H^* = 40 \text{ \AA}$, e para a curva 4 $V_{ij}^{(NO)}$ e $a_H^* = 43.7 \text{ \AA}$. Os círculos cheios correspondem à energia de ativação ϵ_2 observada para o Ge:Sb, que tem uma energia de ionização $E_d = 0.01 \text{ eV}$.

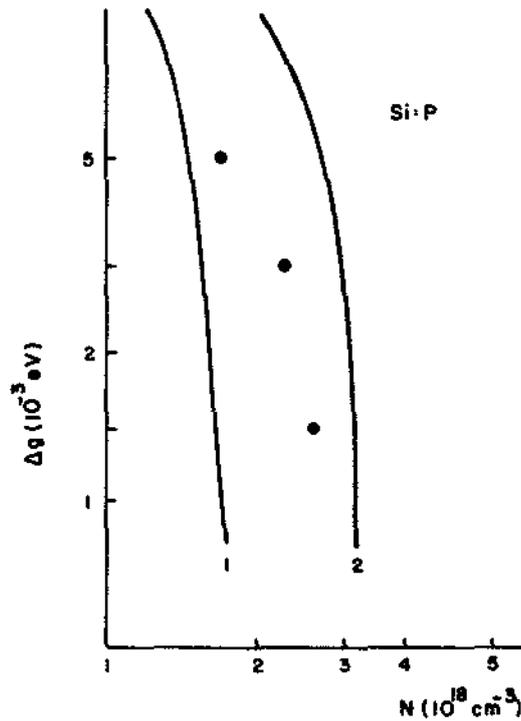


Fig. 4 - Variação do "gap" com N do Si:P.

Para a curva 1 usa-se $V_{ij}(\text{HL})$ e para a curva 2 $V_{ij}(\text{NO})$. $a_{ij}^* = 13.2\text{\AA}$. Os círculos cheios são de ϵ_2 experimental⁷. $E_d = 0.045 \text{ eV}$.

Calculou-se a resistividade usando-se a equação de Kubo e o formalismo já desenvolvido anteriormente⁹. Na Figura 5 tem-se a resistividade do Ge:Sb usando-se $V_{ij}(\text{NO})$ da correção da parte não-diagonal, linha tracejada, a qual mostra uma variação acentuada quando comparada a do uso do $V_{ij}(\text{MT})$, especialmente perto de N_C . Os resultados apresentam concordância satisfatória com os obtidos experimentalmente¹.

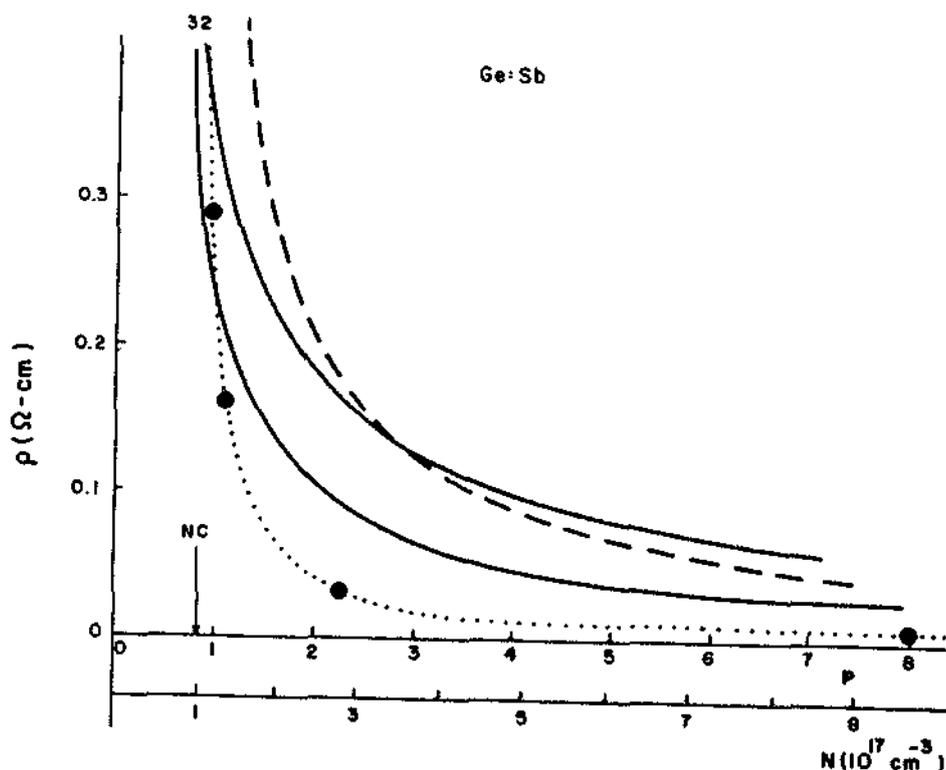


Fig. 5 - Resistividade do Ge:Sb em função de $N(P)$.

A curva tracejada corresponde a este cálculo com $V_{ij}(NO)$, as curvas 2 e 3 (esta com $R_0 = 2a_H^*$, aproximação das esferas duras) correspondem a $V_{ij}(MT)^{\text{gr}}$. Círculos cheios são os resultados experimentais¹.

BIBLIOGRAFIA

1. H. Fritzsche, J. Phys. Chem. Solids 6, 69 (1958).
2. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A276, 238 (1963); 281, 401 (1964).
3. A. Ferreira da Silva, R. Kishore, I.C. da Cunha Lima, Phys. Rev. B23, 4035 (1981).
4. T. Matsubara and Y. Toyozawa, Prog. Theor. Phys. 26, 739 (1961).
5. A. Ferreira da Silva, I.C. da Cunha Lima, M. Fabbri, Phys. Lett. A (in press).
6. Y. Toyozawa, J. Phys. Soc. Japan 17, 986 (1962).

7. N. Kobayashi, S. Ikehata, S. Kobayashi and W. Sasaki, Solid State Comm. 24, 67 (1977).
8. M. Kikuchi, J. Phys. Soc. Japan 25, 989 (1968).
9. A. Ferreira da Silva, R. Micnas, I.C. da Cunha Lima and R. Kishore, J. Phys. C (submetido).