

**КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОЕМКОСТИ
ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ПРИМЕСЯМИ ПЕРЕХОДНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ**

В.А. Улитко

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. Е.А. Памятных
Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, 620002
E-mail: vasily.ulitko@gmail.com

**CONCENTRATION AND TEMPERATURE DEPENDENCES OF THE HEAT CAPACITY OF
SEMICONDUCTORS WITH ADMIXTURES OF TRANSITION ELEMENTS**

V.A. Ulitko

Scientific Supervisor: Prof., Dr. E.A. Pamyatnyh
Ural Federal University, Russia, Yekaterinburg, Mira str., 19, 620002
E-mail: vasily.ulitko@gmail.com

***Abstract.** Regularities in the formation and features of the electronic structure of impurities of transition elements belong to topical problems in the physics of doped semiconductors. Alloying semiconductors with impurities of transition elements cause to hybridization of electronic states. This work presents the aspects of Fermi-liquid formalism in the context of hybridized electronic state. In other works the anomalous temperature dependences in heat capacity was detected. In this work we identified some concentration regimes in which this anomalous dependences can be observed.*

Введение. Определение особенностей электронной структуры примесей переходных элементов относится к кругу актуальных проблем физики легированных полупроводников. Важность задачи связана с необходимостью обоснованного описания характерных явлений (электронной локализации, спинового упорядочения и других) в полупроводниковых системах данного типа, которые стали передовыми объектами физических исследований и технических приложений.

В ходе исследований в этой области реализуется описание интеграции электронных оболочек атомов примеси и кристалла-матрицы. Важным аспектом является появление гибридных состояний, электронная плотность в которых частично локализована на ионе примеси и вместе с тем однородно распределена по кристаллу.

Математическая модель. Попадание атомных уровней примесей в полосу проводимости кристалла, приводит к гибридизации электронных состояний. Гибридизация происходит в конечном интервале энергий вблизи резонансного уровня ε_r , ширина которого 2Γ определяется параметрами потенциала примесей [1, 2]. При этом плотность распределения новых состояний по энергии $g(\varepsilon)$ включает часть $g_e(\varepsilon)$, отвечающую свободному движению, и немонотонную часть $g_r(\varepsilon)$ в виде лоренцевского пика шириной 2Δ :

$$g(\varepsilon) = g_e(\varepsilon) + g_r(\varepsilon),$$

$$g_r(\varepsilon) = \left\{ \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2 + \Delta^2} + \frac{1}{\Gamma} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctg \frac{\Gamma}{\Delta} \right) \right\} n_d,$$

где n_d - концентрация донорных электронов, равная произведению концентрации примесей n_i на число электронов V_d , отданных каждой примесью: $n_d = n_i V_d$, 2Δ - ширина резонансного уровня. Последнее слагаемое здесь учитывает конечность резонансного интервала, определяемую условием возможности выделения резонансного вклада в виде лоренцевского пика. Параметр Γ выбирается при этом так, чтобы концентрация электронов, испытывающих резонансное рассеяние, равнялась концентрации донорных электронов:

$$\int_{\varepsilon_r - \Gamma}^{\varepsilon_r + \Gamma} d\varepsilon g_r(\varepsilon) = n_d = n_i V_d.$$

Если энергия Ферми электронов при изменении концентрации доноров оказывается в интервале гибридизации, то низкотемпературные зависимости термодинамических и кинетических величин от концентрации примесей и температуры обнаруживают аномальное немонокотное поведение. Теоретическое описание такого рода эффектов на примере некоторых конкретных характеристик развито в работах [1-3], а экспериментальные данные, подтверждающие их наблюдение, приведены в статье [4].

Результаты. Для температурной зависимости термодинамических величин (и теплоемкости, в частности) существенными являются два момента. Прежде всего, это сам лоренцевский пик в плотности распределения состояний по энергии с максимумом на энергии резонансного уровня ε_r . Вторым важным моментом является конечность резонансного интервала. Поэтому температурные зависимости теплоемкости оказываются различными в зависимости от положения уровня Ферми (а, стало быть, и от концентрации примесей) по отношению к резонансному уровню и границам резонансного интервала.

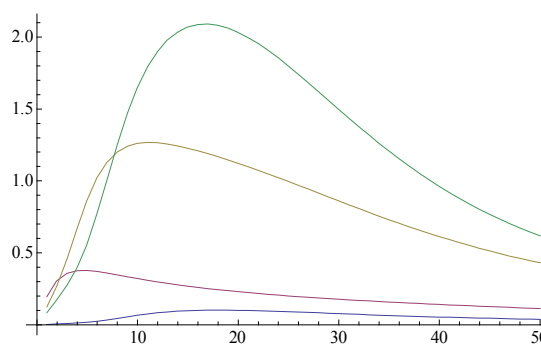


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости для концентраций примесей, отвечающих положению уровня Ферми вблизи резонансной энергии.

Концентрации примесей, отвечающие совпадению энергии Ферми с энергией резонансного уровня, приводят к значительному вкладу в теплоемкость, величина которого определяется параметрами лоренцевского резонансного пика в плотности распределения энергетических уровней (величиной этого пика в максимуме, параметром Γ , определяющем его ширину). Рост температуры приводит к

сглаживанию функции распределения вблизи энергии Ферми и «резонансный» вклад в теплоемкость в этом случае будет монотонно уменьшаться, выходя на зависимость при достаточно больших температурах. Рассчитанные температурные зависимости теплоемкости для концентраций примесей, отвечающих положению энергии Ферми вблизи резонансного уровня, приведены на рис. 1 и рис. 2.

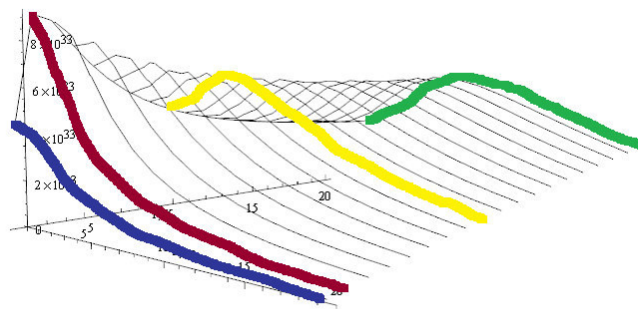


Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости для концентраций примесей, отвечающих положению уровня Ферми вблизи резонансной энергии. Бордовым=1 выделен график, отвечающий концентрации, для которой уровень Ферми совпадает с резонансной энергией. По оси ординат отложены значения теплоемкости, деленной на температуру в энергетических единицах.

Выводы. Проанализированы температурные и концентрационные зависимости теплоемкости для полупроводников с примесями переходных элементов в условиях гибридизации состояний. Показано, что гибридизация состояний приводит к немонотонному концентрационному и температурному поведению теплоемкости, связанному с наличием резонансного пика в плотности электронных состояний. На основе квантового ферми-жидкостного подхода, распространенного на гибридизированные состояния примесных уровней и состояний полосы проводимости в полупроводниках примесями переходных элементов, рассмотрена теплоемкость таких систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.И. Окулов, Низкотемпературная аномалия вклада в теплоемкость гибридизированных электронных состояний на примесях переходных элементов //ФНТ – 2011. Т.37. -№3. – С. 281-288
2. В.И. Окулов, Эффекты резонансного рассеяния электронов на донорных примесях в полупроводниках //ФНТ – 2004. Т.30. -№11. – С. 1194-1202
3. В.И. Окулов, К теоретическому описанию низкотемпературных эффектов в металлах и легированных полупроводниках на основе квантовой теории электронной жидкости //ФНТ – 2009. Т.35. -№8/9. – С. 891-903
4. Окулов В.И., Королёв А.В., Памятных Е.А., Гергерт А.В., Говоркова Т.Е., Паранчич С.Ю. Магнетизм гибридизированных состояний примесей ко- бальта в селениде ртути // Новые магнитные материалы микроэлектроники. Сб. трудов XX международной школы-семинара, Москва – 2006 – С.895.