

О ПЕРЕХОДЕ ПОЛУПРОВОДНИК – МЕТАЛЛ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СИЛ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ

В. М. Агранович, Ю. Е. Лозовик

В последние годы, в связи с поисками высокотемпературных сверхпроводников, широко обсуждаются и экспериментально исследуются неоднородные системы типа "сэндвич", а также гранулированные системы полупроводник – металл [1]. В полупроводниках малых размеров, находящихся в металлической матрице, должны играть большую роль силы электростатического изображения. Как будет показано ниже, их роль может стать кардинальной для полупроводников с малой шириной запрещенной зоны 2Δ .

Так как энергия сил электростатического изображения ($-V_0$) для одной квазичастицы не зависит от знака ее заряда, то для образования одной несвязанной электрон-дырочной пары необходимо затратить энергию $2\Delta - 2V_0$ (минимальная щель 2Δ может соответствовать и непрямому переходу). Поэтому при $V_0 > \Delta$ основное состояние полупроводника с полностью заполненной валентной зоной становится нестабильным относительно образования электрон-дырочных пар.

Имея в виду обсудить здесь лишь качественную сторону дела, рассмотрим (при $T = 0$) сначала простейшую модель мономолекулярного плоского¹⁾ полупроводникового слоя, находящегося на расстоянии d

¹⁾ Аналогичные эффекты имеют место для (квази) одномерных структур.

от металлической поверхности. В приближении эффективной массы для электронов и дырок энергия E единицы поверхности полупроводникового слоя как функция их концентрации $n_e = n_h = n$ (здесь речь идет о собственном полупроводнике) при среднем расстоянии между квазичастицами $\rho \sim n^{-1/2} \ll d$ имеет вид:

$$E(n) = \frac{\pi \hbar^2}{2 m^*} n^2 - 2(V_0 - \Delta)n, \quad (1)$$

где $m^* = m_e m_h / (m_e + m_h)$ – приведенная эффективная масса. В соотношении (1) опущена полная энергия взаимодействия \bar{V}_{int} квазичастиц друг с другом: в рассматриваемом приближении самосогласованного поля (без обмена) эта энергия обращается в нуль. Действительно,

$$\bar{V}_{int} = n^2 \int dx dx' \left[V_{eh} + \frac{1}{2} (V_{ee} + V_{hh}) \right]. \quad \text{Подинтегральное}$$

выражение обращается в нуль, так как $V_{ee} = V_{hh} = -V_{eh} \equiv V$. Учет сил изображения приводит к ослаблению взаимодействия двух квазичастиц по сравнению с кулоновским законом:

$$V(x) = \frac{e^2}{x} - \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + 4d^2}};$$

$$V(x) = \frac{e^2}{x} \quad (x \ll d); \quad V(x) = -\frac{2d^2 e^2}{x^3} \quad (x \gg d).$$

Заметим, что это ослабление, в частности, может быть существенным при рассмотрении переходов в сверхпроводящее состояние. Минимальному значению энергии соответствует концентрация квазичастиц $n = n_0$, где $n_0 = (2m^* / \pi \hbar^2)(V_0 - \Delta)$. Таким образом, силы электростатического изображения при $V_0 > \Delta$ действительно приводят к возникновению в основном (неперестроенном) состоянии отличной от нуля концентрации электронов и дырок. Возникающая при этом картина заполнения пересекающихся зон в перестроенном основном состоянии отвечает металлической проводимости¹⁾.

Отметим, что рассматриваемая перестройка обуславливает появление на достаточно малых расстояниях дополнительных сил сцепления полупроводник – металл, поскольку, как это следует из выражения для $E(n_0)$, энергия слоя в перестроенном основном состоянии зависит от

$$\text{расстояния } d \text{ между металлом и полупроводником: } E_0(d) = -\frac{2m}{\pi \hbar} \left(\frac{e^2}{4d} - \Delta \right)^2$$

при $d < e^2/4\Delta$ и $E_0(d) = 0$ при $d > e^2/4\Delta$.

Приведем теперь численную оценку. При $d = 5\text{ \AA}$, энергия сил электростатического изображения $V_0 = e^2/4d \approx 0,7 \text{ эв}$. Поэтому указанный переход для рассматриваемой здесь идеализированной модели происходит при ширинах зон $\Delta < 0,7 \text{ эв}$.

В двумерной модели полупроводника не возникало экранировки сил электростатического изображения. При переходе к трехмерным образо-

¹⁾ Перестроенное состояние стабильно в одночастичном приближении. Вопрос о его стабильности при учете корреляционных взаимодействий будет рассмотрен особо. Заметим только, что появление неустойчивости, связанной с корреляциями, требует специальных условий.

ваниям влияние экранировки для рассматриваемой задачи оказывается уже весьма существенным. Так, например, в слое полупроводника толщиной d , обе поверхности которого контактируют с металлом, характерное значение энергии сил электростатического изображения \bar{V}_0 есть $\bar{V}_0 = \alpha(e^2/\epsilon d)$, где $\alpha \sim 1$ (ϵ — диэлектрическая проницаемость). Поэтому обсуждавшиеся выше эффекты могут появиться¹⁾ лишь для таких значений d и ϵ , для которых $\alpha(e^2/\epsilon d) > \Delta$; следует, однако, иметь в виду, что из-за перестройки меняется также и само ϵ , приводя к ослаблению взаимодействия квазичастиц полупроводника с металлом. Влияние квазичастиц на экранирование электростатического взаимодействия все же можно не принимать во внимание при выполнении условия $r_D \gtrsim d$, где r_D — соответствующая длина дебаевского экранирования. В этом случае²⁾ вместо (1) имеет место соотношение:

$$E(n) = \frac{3}{5m^*} (3\pi)^{2/3} \hbar^2 n^{5/3} - 2(\bar{V}_0 - \Delta)n \quad (2)$$

так что $n_0 = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} [2m^*(\bar{V}_0 - \Delta)]^{3/2}$. Неравенство $r_D \gtrsim d$ выполняется тем лучше, чем меньше d . Однако, при малых d ситуация становится более благоприятной из-за квантования движения электрона в поперечном направлении. Если $\hbar^2/m^* d^2 > \bar{V}_0 - \Delta$, то все возникшие под влиянием сил электростатического изображения квазичастицы заселяют лишь нижний уровень поперечного движения. При этом мы возвращаемся к уже обсуждавшемуся выше случаю двумерного полупроводника.

Перестройка основного состояния полупроводника под действием сил электростатического изображения может иметь место и для несобственных полупроводников (с концентрацией примеси $N \ll 1/d^3$ и радиусом основного состояния $\rho_0 \ll d$). Силы электростатического изображения уменьшают энергию ионизации примеси и, соответственно, увеличивают радиус примесного состояния³⁾. Если бы обусловленное перекрытием примесных орбиталей уширение примесной зоны сравнялось с понизившейся энергией ионизации, то произошел бы переход полупроводник — металл.

Отметим, что в случае несобственных полупроводников с большой шириной запрещенной зоны (и, следовательно, малым ϵ) и с глубиной залегания доноров или акцепторов $\Delta \sim 10^{-2} \text{ эв}$, силы электростатичес-

¹⁾ Эти эффекты сохраняются, если вместо металлических обкладок использовать обкладки из полупроводника с диэлектрической проницаемостью $\epsilon' > \epsilon$. При этом $\bar{V}_0 = \alpha(e^2/\epsilon d) [(\epsilon' - \epsilon)/(\epsilon' + \epsilon)]$.

²⁾ Возникающий в приконтактной области двойной электрический слой вызывает лишь загиб зон, не влияя качественно на картину перестройки.

³⁾ Аналогичные эффекты могут, вероятно, иметь место и для атомов.

кого изображения оказываются существенными даже для слоев с толщиной порядка сотен ангстрем. Это обстоятельство могло бы облегчить наблюдение обсуждающейся перестройки.

Институт спектроскопии
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
3 января 1973 г.

Литература

- [1] G. Deutscher, S.P. Farges, F. Meunier, P. Nedellec. Phys. Lett., 35A, 265, 1971.
-