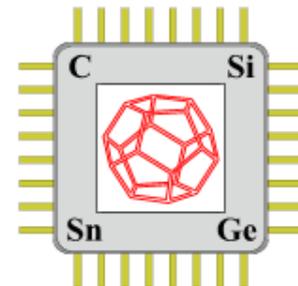




Белорусский государственный университет  
Физический факультет

Кафедра физики полупроводников и нанoeлектроники  
*пр. Независимости 2, Минск, Беларусь*



# Что такое « $\epsilon_2$ -электропроводность легированных полупроводников»?

Н.А. Поклонский

e-mail: [poklonski@bsu.by](mailto:poklonski@bsu.by); [poklonski@tut.by](mailto:poklonski@tut.by)

Молодежная конференция по физике полупроводников  
Зимняя школа 2026  
ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН  
Зеленогорск, 25 февраля – 1 марта 2026 г.

# План лекции

1. *Пролог. Память о прошлом и противостояние с бесконечностью непознанного*
2. *Кристаллические полупроводники электричества с уровнями легирования в "сильном" пределе и степенями компенсации в "слабом" пределе*
3. *Эпилог. О перспективах и ассоциированных с ними гипотезах: от чувственного к умопостигаемому*

---

**Мотивация исследований.** Перейти от качественного рассмотрения ионизационного равновесия и прыжковой электропроводности в легированных кристаллических полупроводниках к практике расчетов значений измеряемых величин...

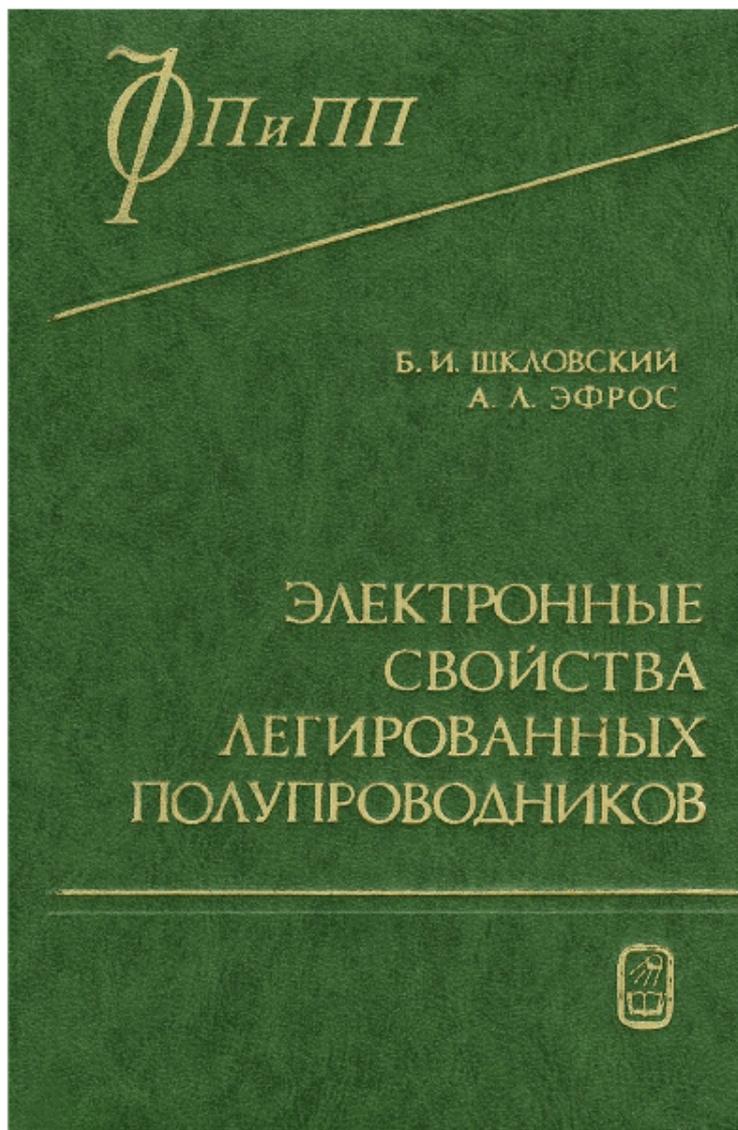
**Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе**



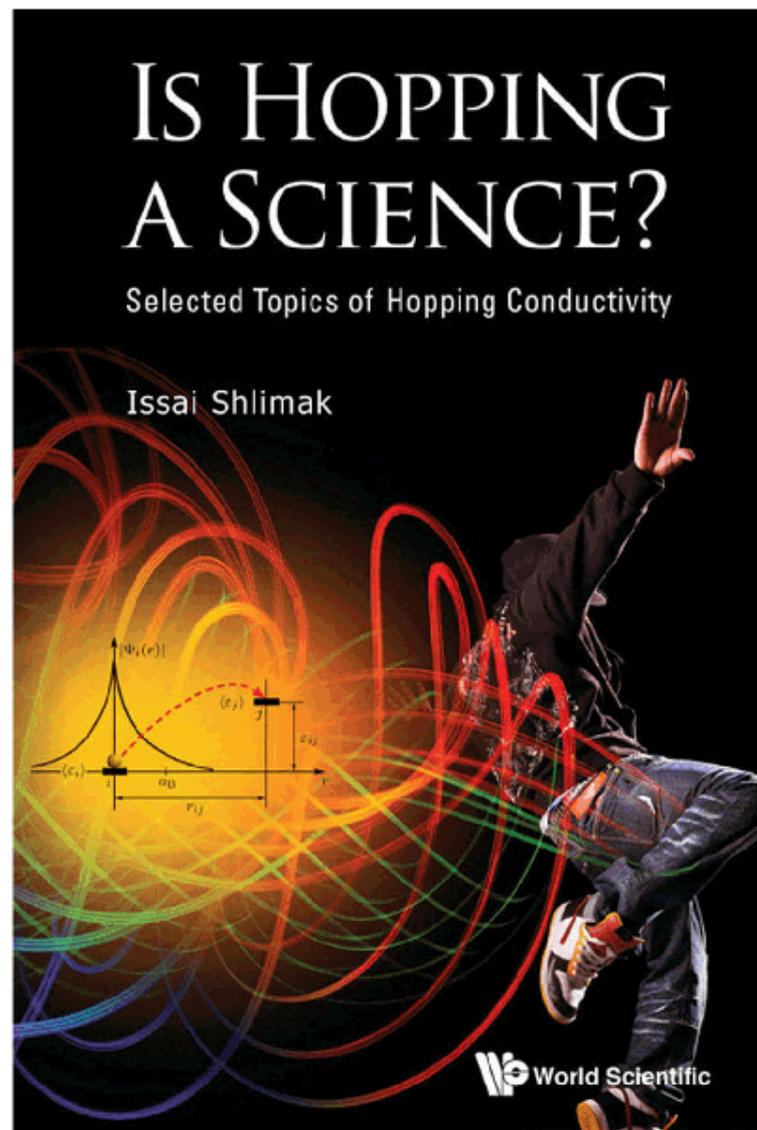
*"Все мы вышли из гоголевской «Шинели»..."*  
Ф.М. Достоевский

# "Вечнозеленая" книга

1



(М.: Наука, 1979) 416 с.



(World Scientific: Singapore, 2015) xiv+140 p.

B.I. Shklovskii, A.L. Efros. *Electronic Properties of Doped Semiconductors* (Berlin: Springer, 1984) xii+388 p.

N.A. Poklonski

# Полупроводниковый германий ( $N_{\text{Ge}} \approx 4.4 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ): кинетика нейтронно-трансмутационного легирования

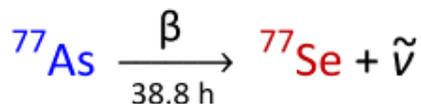
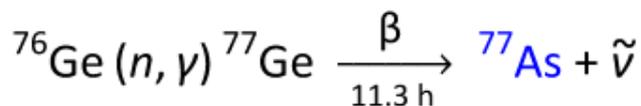
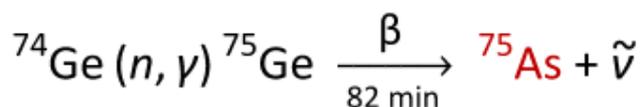
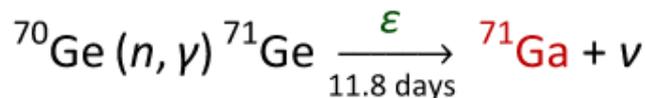
Природный изотопический состав:

$${}^{70}\text{Ge} - 20.53\% \quad {}^{72}\text{Ge} - 27.37\%$$

$${}^{73}\text{Ge} - 7.61\% \quad {}^{74}\text{Ge} - 36.74\%$$

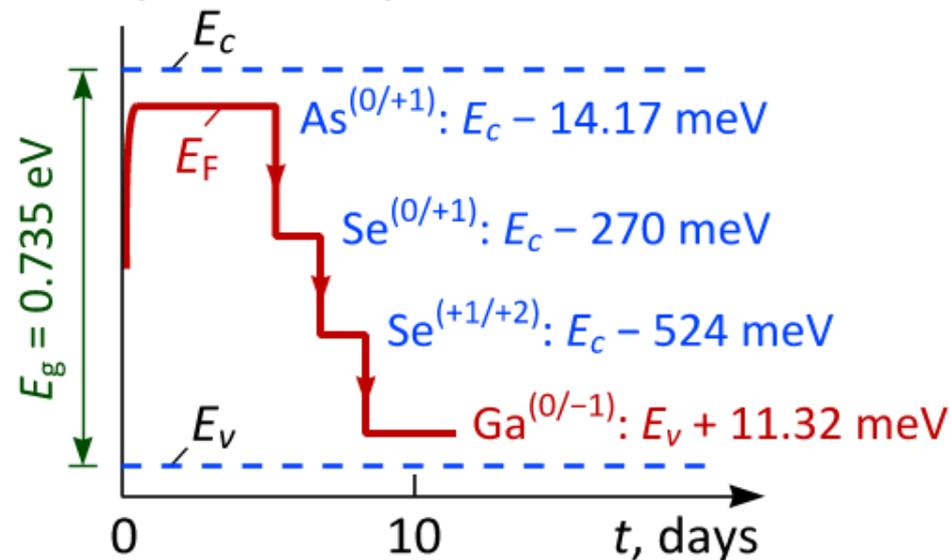
$${}^{76}\text{Ge} - 7.67\%$$

Реакции трансмутационного легирования (кинетическая энергия нейтрона  $E_{n^0} \geq 0.5 \text{ MeV}$ ):



$\epsilon$  — частный случай  $\beta$ -рапада — реакция захвата ядром орбитального электрона

Уровень Ферми  $E_F$



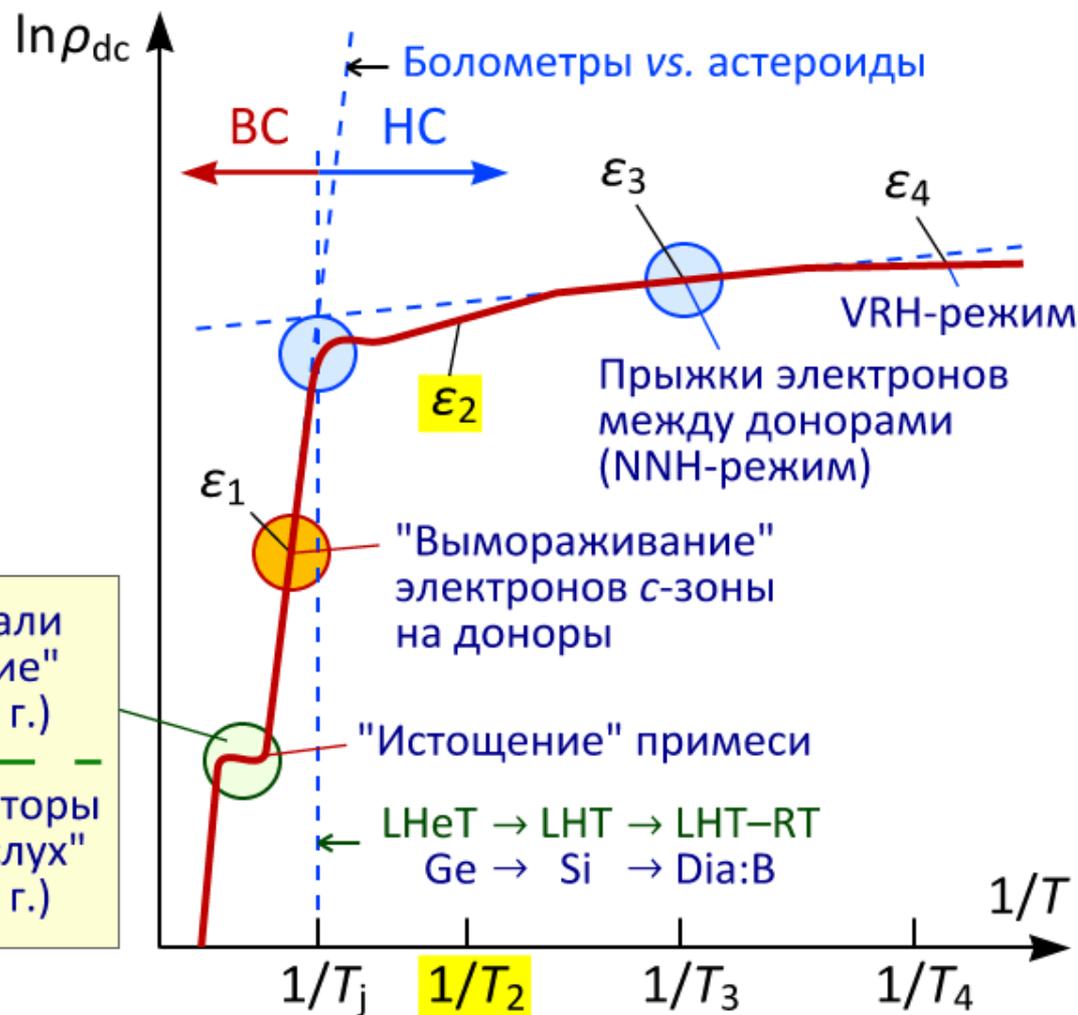
Изотермический отжиг:  $T = 450 \text{ }^\circ\text{C}$  ( $\approx 10 \text{ h}$ )

$$K = \frac{N_d}{N_a} = \frac{N_{\text{As}} + 2N_{\text{Se}}}{N_{\text{Ga}}} \approx 0.3-0.4$$

Измерения электро- и фотопроводимости, эффекта Холла при  $T = 77.4 \text{ K}$ .

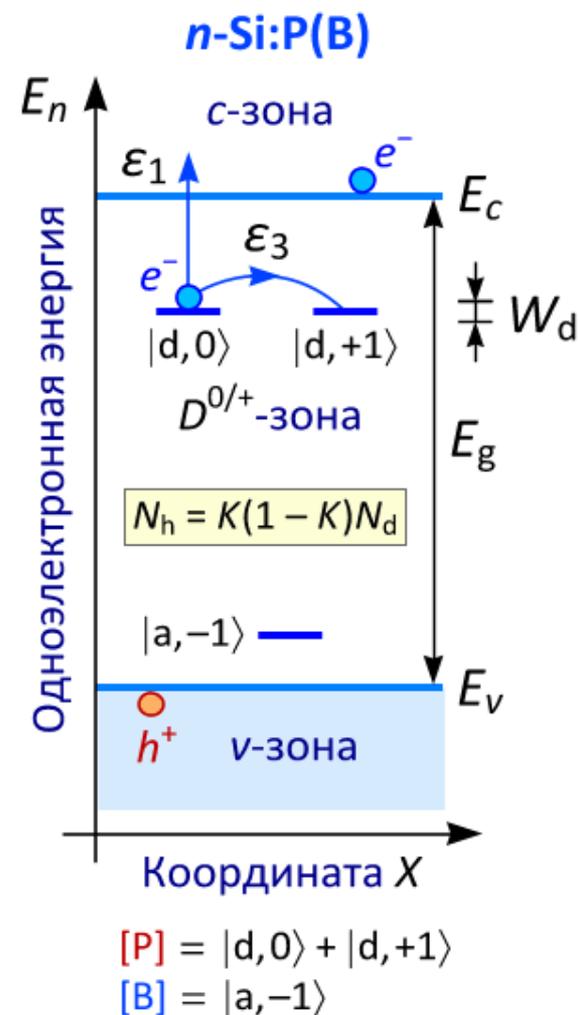
A.G. Zabrodskii, M.V. Alekseenko. *Fermi level spectroscopy of the gap states in Ge based on the kinetics of its neutron transmutation doping: application to the deep levels of Se*. Proc. 23rd Int. Conf. on the Physics of Semiconductors (ICPS-1996), Berlin, Germany, July 21–26, 1996, Vol. 4 (Singapore: World Scientific, 1996) p. 2681–2684.

# Электрическое сопротивление $\rho_{dc}$ на постоянном токе — Обратная температура $1/T$ для кристаллического полупроводника $n$ -типа



ПЗС дали "зрение" (1970 г.)

Транзисторы дали "слух" (1945 г.)



## Температурная зависимость электрического сопротивления $\rho_{dc}$ легированных донорами и компенсированных акцепторами кристаллических полупроводников на постоянном токе

$$\frac{1}{\rho_{dc}} \equiv \sigma_{dc} = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 =$$

$$= \sigma_{01} \exp\left(\frac{-\varepsilon_1}{k_B T}\right) + \sigma_{02} \exp\left(\frac{-\varepsilon_2}{k_B T}\right) + \sigma_{03} \exp\left(\frac{-\varepsilon_3}{k_B T}\right) + \sigma_{04} \exp\left(\frac{-\varepsilon_4(T)}{k_B T}\right)$$

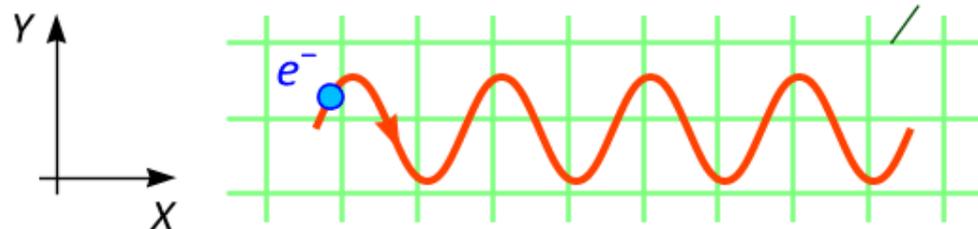
$\varepsilon_4(T) \propto T^{3/4}$  — модель Мотта (прыжки электронов между близкими по энергии донорами в  $D^{0/+}$ -зоне)

$\varepsilon_4(T) \propto T^{1/2}$  — модель Эфроса–Шкловского (одноэлектронная кулоновская щель в донорной  $D^{0/+}$ -зоне на уровне Ферми)

1. H. Fritzsche. *Electrical properties of germanium semiconductors at low temperatures*. Phys. Rev., **99** (2), 406–419 (1955).
2. И.П. Звягин. *Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках* (М.: МГУ, 1984) 192 с.
3. N.F. Mott. Phil. Mag., **19** (160), 835–852 (1969).
4. B.I. Shklovskii. *Half-century of Efros–Shklovskii Coulomb gap: Romance with Coulomb interaction and disorder*. Low Temp. Phys., **50** (12), 1101–1112 (2024).
5. A.G. Zabrodskii. *The Coulomb gap: the view of an experimenter*. Phil. Mag. B, **81** (9), 1131–1151 (2001).

# Схемы миграции электронов в кристаллических полупроводниках

## ВС: Миграция электронов с-зоны



Периодичность,  
спокойствие

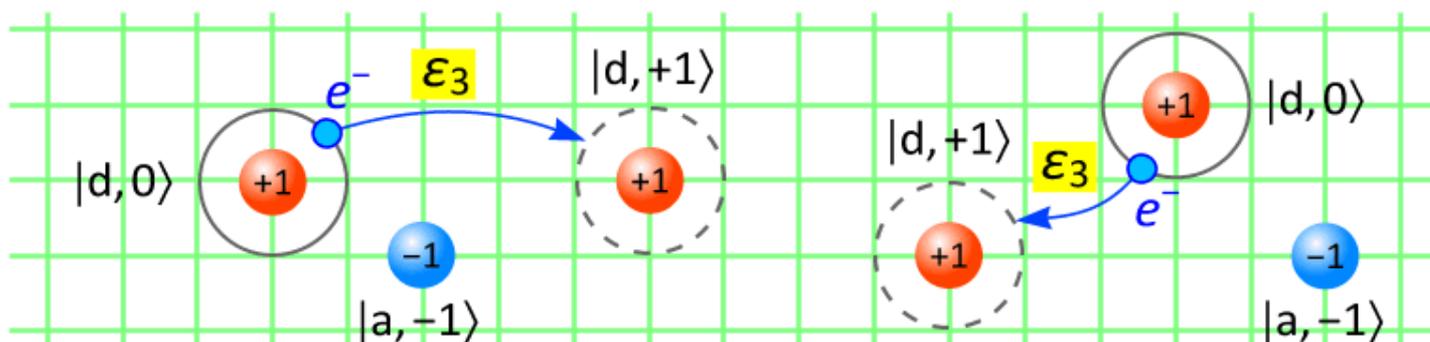
Температура:  
 $T > T_j$

Когерентное конструктивное рассеяние электрона с-зоны на атомах кристаллической матрицы и некогерентное рассеяние электрона на примесях и фононах

JC (= tun)

## НС: Ассистированная фононами прыжковая миграция электронов с донора на донор

$\epsilon_3$  — флуктуационное выравнивание уровней энергии доноров



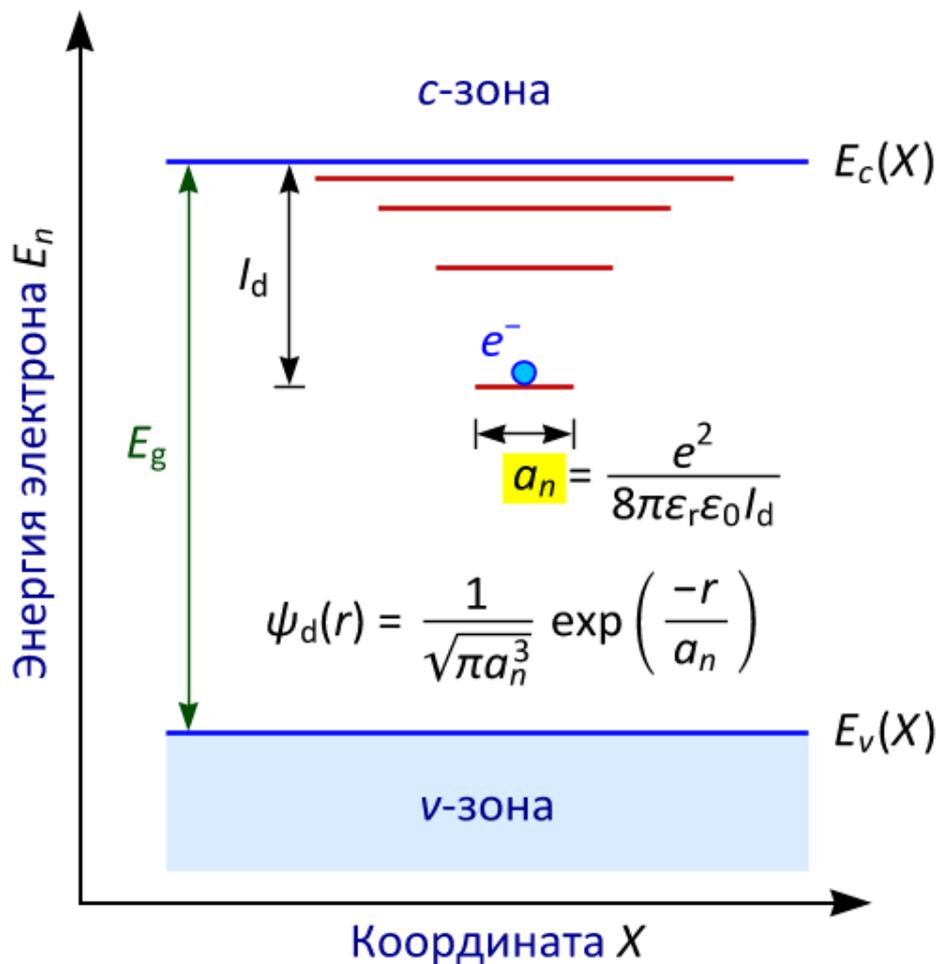
Температура:  
 $T < T_j$

1. N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii. *Quasiclassical description of the nearest-neighbor hopping dc conduction via hydrogen-like donors in intermediately compensated GaAs crystals.* Semicond. Sci. Technol., **25** (8), 085006 (2010).
2. N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.I. Kovalev, A.N. Dzeraviaha. *Drift-diffusion model of hole migration in diamond crystals via states of valence and acceptor bands.* J. Phys. Commun., **2**, 015013 (2018).

# Уровни энергии **одиночного** водородоподобного донора

Диаграмма

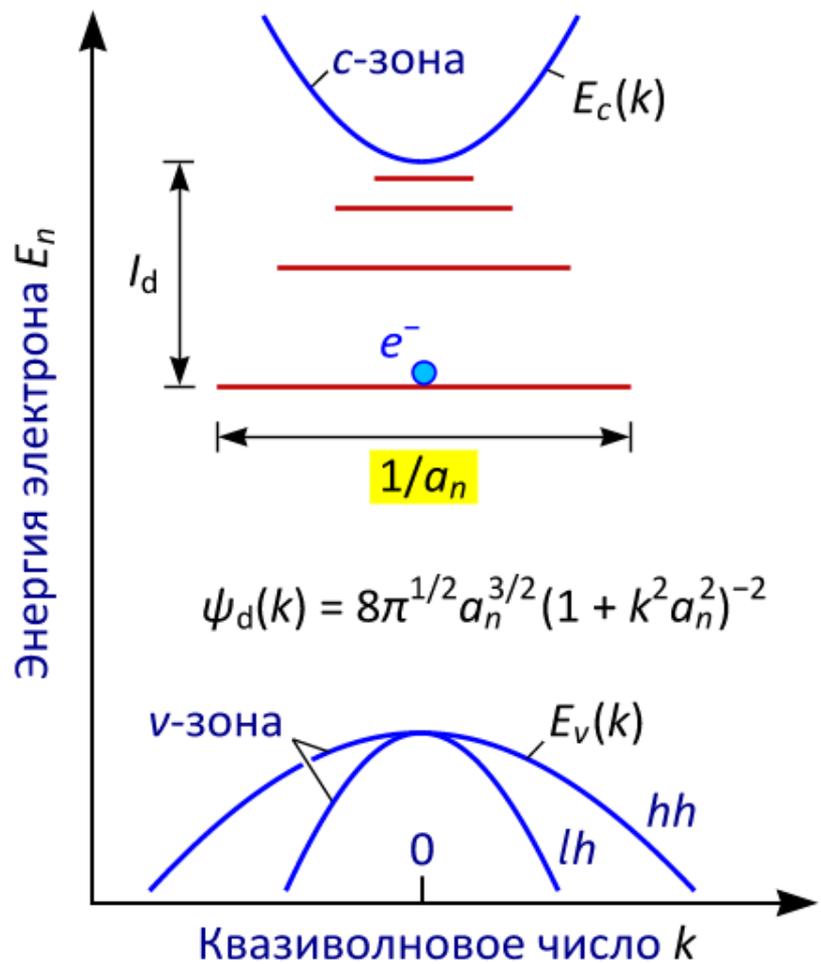
энергия  $E_n$  – пространственная координата  $X$



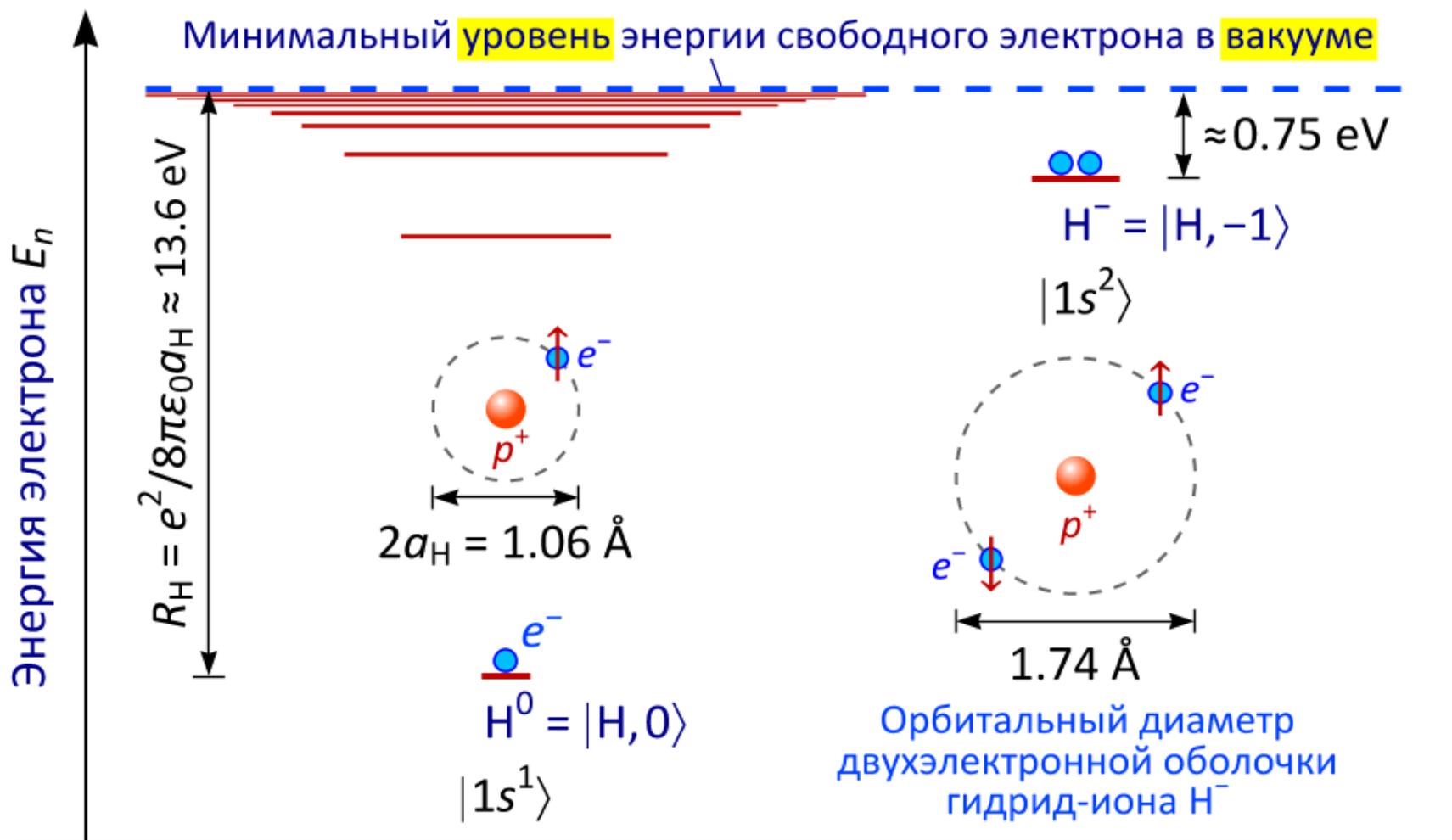
$$l_d = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{1}{a_n}$$

Диаграмма

энергия  $E_n$  – квазиволновой вектор  $k$



# Возбужденные состояния: $H^0 = |H, 0\rangle$ vs. $H^- = |H, -1\rangle$



Длина горизонтальной риски — мера пространственной протяженности локализованных электронных состояний

1. Б.М. Смирнов. *Физика атома и иона* (М.: Энергоатомиздат, 1986) 216 с.
2. Г. Бете, Э. Солпитер. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М.: Физматлит, 1960) 562 с.

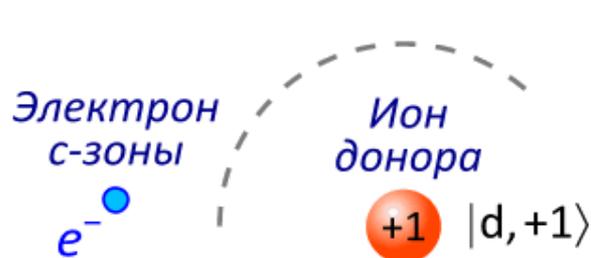
# Ионизационное равновесие электронов с-зоны и ионов доноров в трехмерных кристаллах при температуре $T_j$

$$n \ll N_h = K(1 - K)N_d$$

$$N_{d,+1} = KN_d = N_a$$

**Теорема  
вириала**

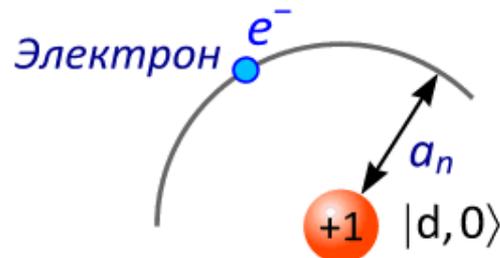
$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{3k_B T_j}{2} = -\frac{1}{2} \langle U \rangle$$



$$T > T_j$$

$$T_j \approx \frac{0.728}{k_B} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} [N_{d,+1}(T_j)]^{1/3}$$

$$T < T_j$$



Зонная электропроводность

$\approx$

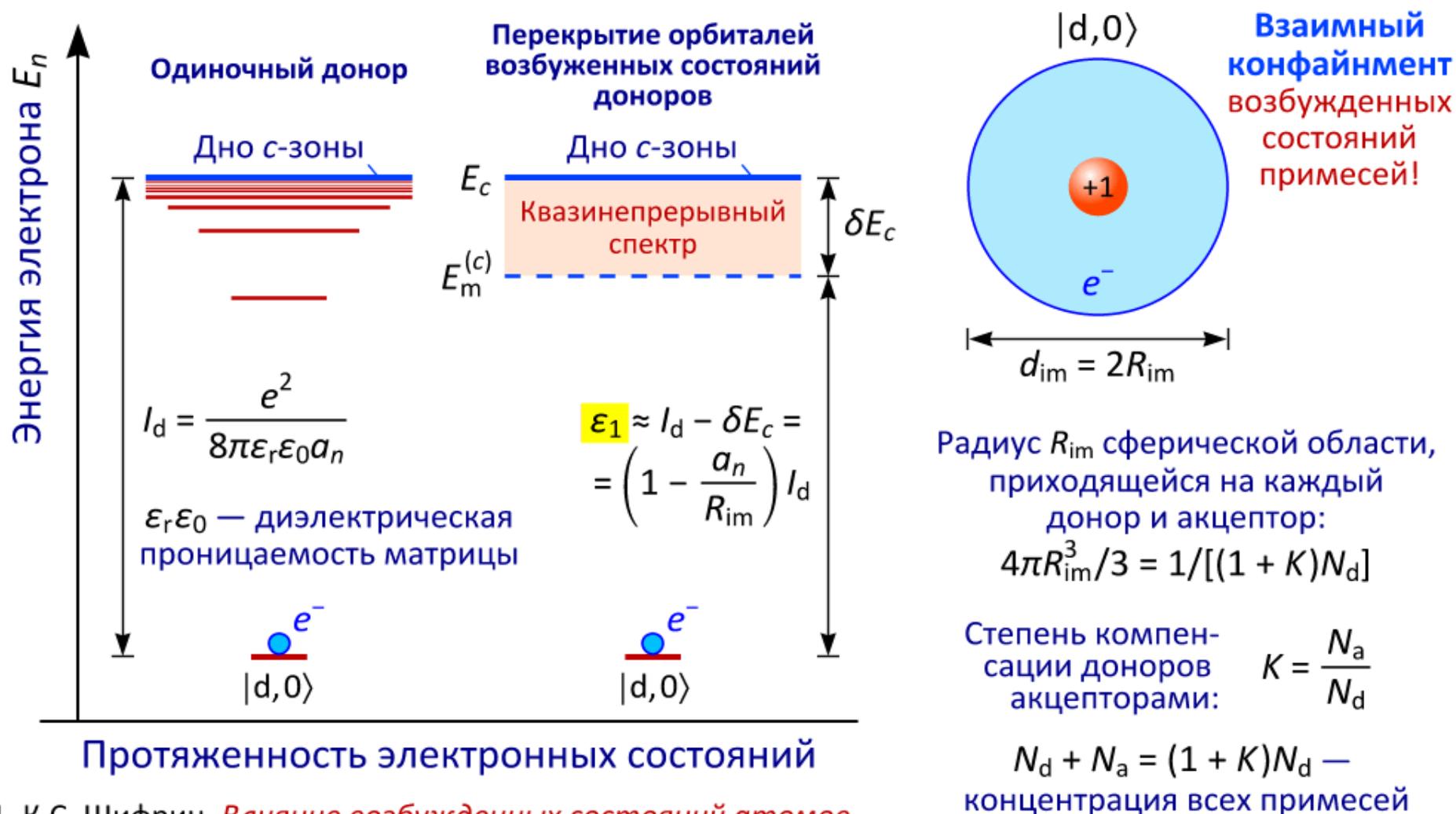
Прыжковая электропроводность

$$\left( \begin{array}{c} \text{Энергия} \\ \text{теплового} \\ \text{движения} \\ \text{"свободного"} \end{array} e^- \right) > \left( \begin{array}{c} \text{Энергия} \\ \text{кулоновского} \\ \text{притяжения} \\ |d,+1\rangle - e^- \end{array} \right)$$

$$\left( \begin{array}{c} \text{Энергия} \\ \text{теплового} \\ \text{движения} \\ \text{"свободного"} \end{array} e^- \right) < \left( \begin{array}{c} \text{Энергия} \\ \text{кулоновского} \\ \text{притяжения} \\ |d,+1\rangle - e^- \end{array} \right)$$

1. N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, O.N. Poklonskaya, A.G. Zabrodskii. J. Appl. Phys., **110** (12), 123702 (2011).
2. Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, О.Н. Поклонская, А.Г. Забродский. *Роль электростатических флуктуаций при переходе от зонной электропроводности к прыжковой в легированных полупроводниках (на примере p-Ge:Ga)*. ФТП, **50** (6), 738–750 (2016).

В квазиклассическом приближении квантовой теории, используя до максимально возможного предела понятия классической теории, для водородоподобных доноров в кристаллической матрице имеем:



1. К.С. Шифрин. *Влияние возбужденных состояний атомов примеси на электрические свойства*. ЖТФ, **14** (1-2), 43–48 (1944).
2. Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Н. Деревяго. *Термическая энергия ионизации водородоподобных примесей в полупроводниковых материалах*. Журн. БГУ. Физика, № 2, 28–41 (2020).

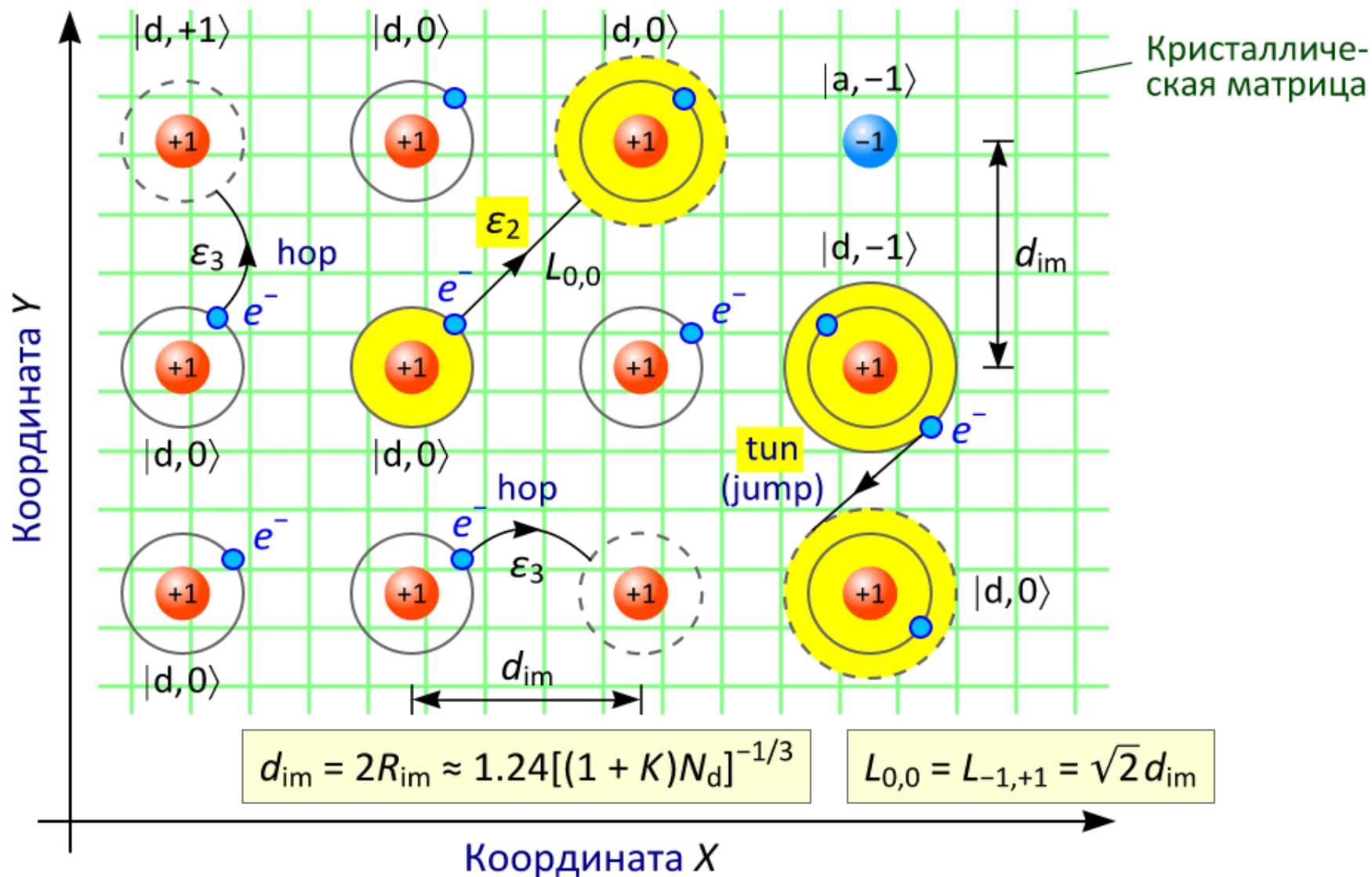
# Термическая и оптическая энергии ионизации

**Термическая энергия ионизации (активации) водородоподобного донора (акцептора)** в кристаллическом полупроводнике — это энергия, необходимая для диссоциации связанного состояния электрона на доноре  $|d, 0\rangle$  (дырки на акцепторе  $|a, 0\rangle$ ) при данной температуре вследствие тепловых флуктуаций в кристаллической матрице. При температурах, много меньших температуры Дебая, средняя энергия акустического фонона  $\langle E_q \rangle = (\pi^4/36)k_B T$ .

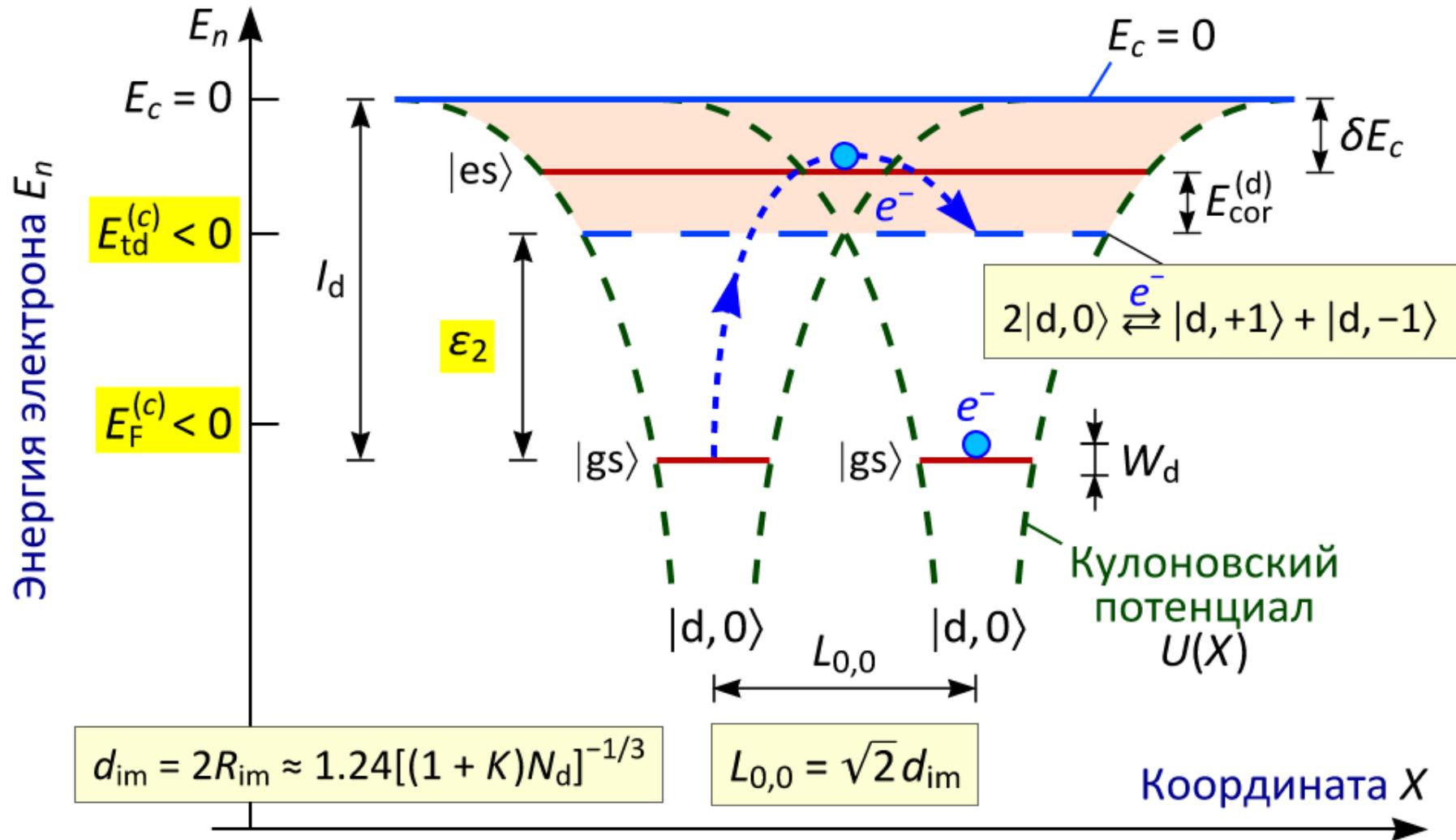
**Оптическая энергия ионизации** — минимальная энергия фотона, необходимая для перевода электрона из связанного (локализованного) состояния на водородоподобном доноре  $|d, 0\rangle$  в делокализованное состояние  $s$ -зоны полупроводника при фиксированном локализирующем электрон электростатическом потенциале (следствие принципа Франка–Кондона для оптических переходов). Аналогично для дырки, локализованной на водородоподобном акцепторе  $|a, 0\rangle$ .

1. В. Штиллер. *Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика* (М.: Мир, 2000) 176 с.
2. В.И. Мельников. *Скорость активационных распадов: поправки на конечность высоты барьера*. ЖЭТФ, **105** (3), 683–707 (1994).
3. В.-Д. Крефт, Д. Кремп, В. Ебелинг, Г. Рёпке. *Квантовая статистика систем заряженных частиц* (М.: Мир, 1988) 406 с.
4. Э.Ю. Кондон. *Принцип Франка–Кондона и смежные вопросы*. УФН, **35** (1), 35–51 (1948).

## 2D-схема примесной простой нестехиометрической кубической решетки из доноров $|d, -1\rangle$ , $|d, 0\rangle$ , $|d, +1\rangle$ и акцепторов $|a, -1\rangle$



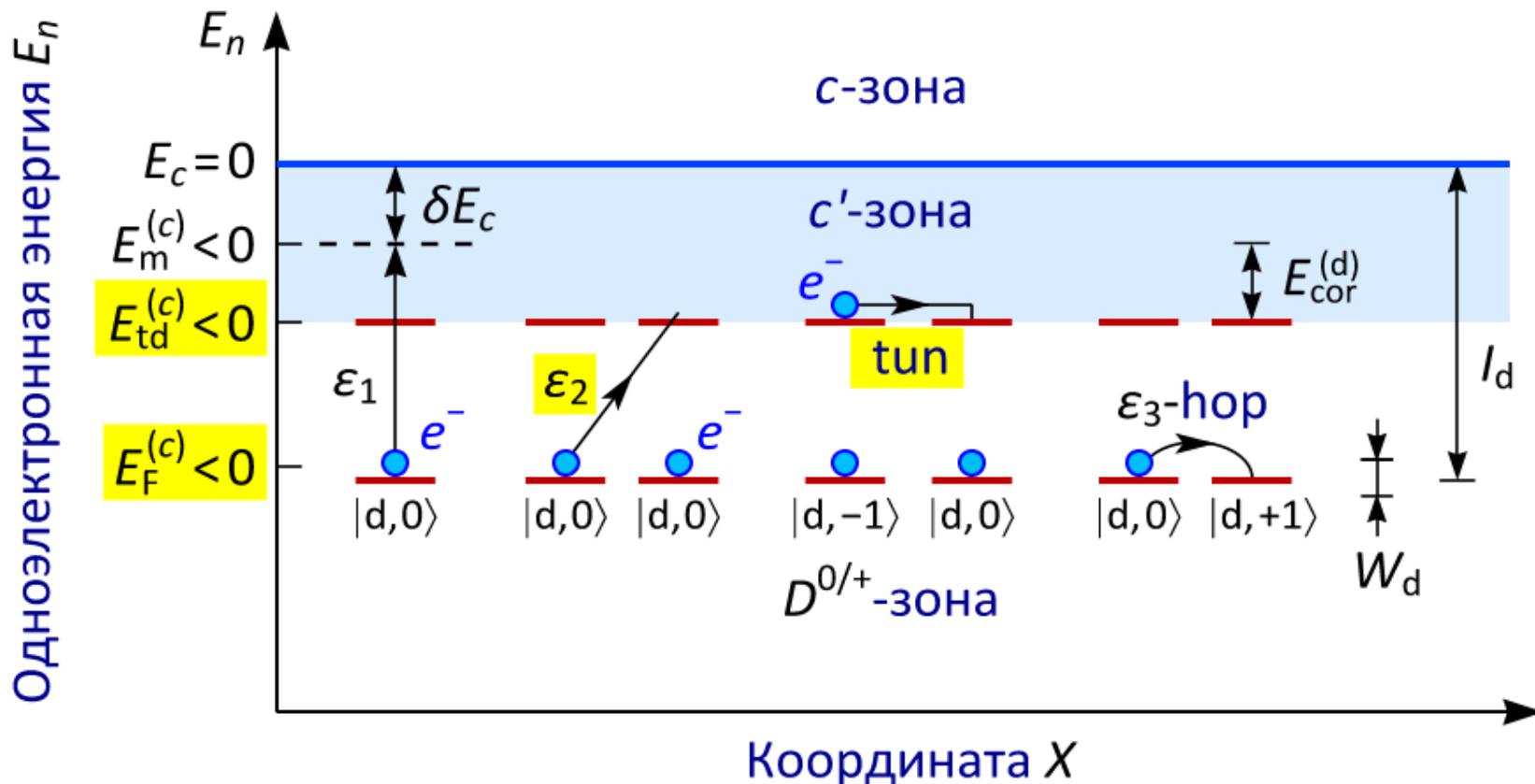
# Два донора $|d, 0\rangle$ в кристаллической матрице на диаграмме "одноэлектронная энергия $E_n$ –координата $X$ "



1. Б.М. Смирнов. *Эффект Сена*. УФН, **178** (3), 309–311 (2008).

2. Б.А. Трубников, О.Б. Трубникова. *Пять великих распределений вероятностей*. Природа, № 11, 13–20 (2004).

# Схема уровней энергии доноров (средние значения) вблизи дна $c$ -зоны ( $E_c = 0$ ) полупроводника $n$ -типа для зарядовых состояний $(-1)$ , $(0)$ и $(+1)$ доноров



## Расчетная формула для $\epsilon_2$

В окрестности температуры  $T_2 \approx T_j/2$  происходят переходы электронов между состояниями доноров  $|d, 0\rangle$  и  $|d, 0\rangle$  из нижней донорной зоны  $D^{0/+}$  на край порога туннельной миграции  $E_{td}^{(c)}$  электронов. Энергия активации  $\epsilon_2$  — это разность между уровнем Ферми  $E_F^{(c)}$  и порогом туннельной подвижности  $E_{td}^{(c)}$ :

$$\epsilon_2 = -E_F^{(c)} + E_{td}^{(c)} \approx -E_F^{(c)} - 1.376 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} [(1+K)N_d]^{1/3} > 0$$

где уровень Ферми  $E_F^{(c)} < 0$ ;  $E_{td}^{(c)} = -[\delta E_c + E_{cor}^{(d)}] < 0$ ;  $\delta E_c = a_n l_d / R_{im}$  — сдвиг дна  $s$ -зоны,  $E_{cor}^{(d)} = e^2 / 4\pi\epsilon_r\epsilon_0 L_{-1,+1}$  — электростатическая энергия корреляции системы "донор  $|d, +1\rangle$  + донор  $|d, -1\rangle$ ";  $L_{-1,+1} = \sqrt{2} d_{im}$ ;  $-E_F^{(c)} > 0$ .

Значение уровня Ферми  $E_F^{(c)} < 0$ , отсчитанное от дна  $s$ -зоны  $E_c = 0$ , вычисляется из уравнения электронейтральности кристалла  $N_{d,+1} = KN_d = N_a$  для  $N_{d,-1} \ll N_{d,+1}$  при  $K \ll 1$ ; учитывается эффективная ширина  $D^{0/+}$ -зоны  $W_d$  (для гауссова распределения уровней энергии доноров относительно  $l_d$ ):

$$W_d = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 d_{im}} \left( \frac{12K}{1+K} \right)^{1/2}$$

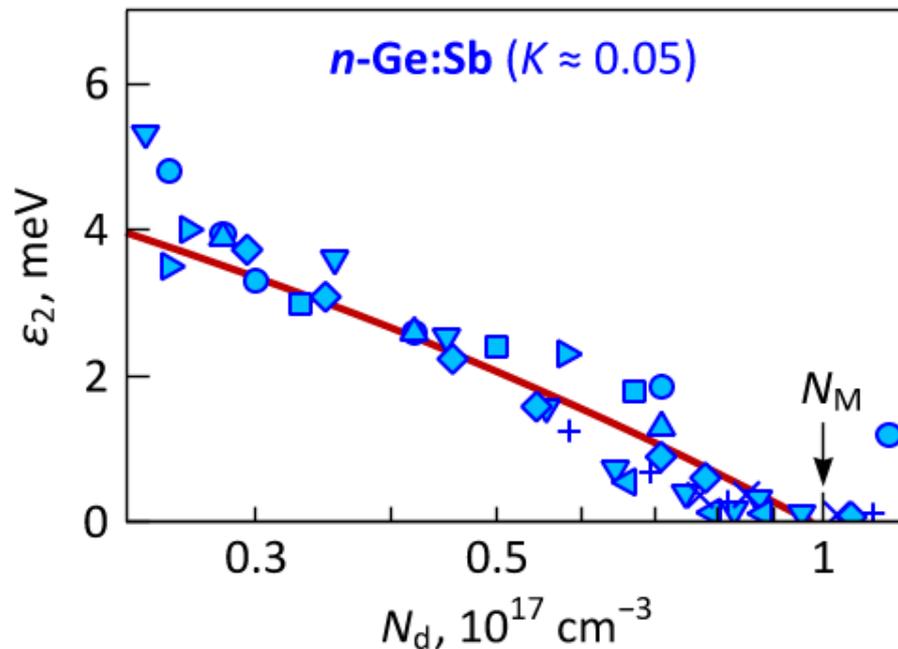
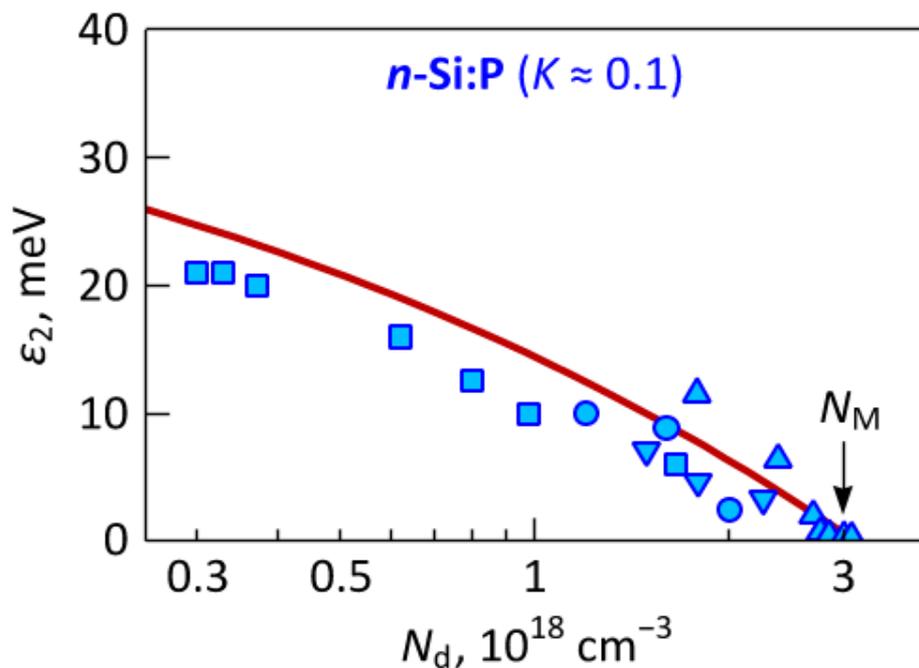
$$d_{im} = 2R_{im} \approx 1.24 [(1+K)N_d]^{-1/3}$$

$W_d$  определяется кулоновским взаимодействием  $|d, +1\rangle$  с ионами  $[|d, +1\rangle$  и/или  $|a, -1\rangle$ ] только в первой координационной сфере трехмерной кубической примесной решетки с периодом  $d_{im}$  в кристаллической матрице.

# Энергия активации $\varepsilon_2$ -электропроводности $n$ -Si:P и $n$ -Ge:Sb в зависимости от концентрации водородоподобных доноров при небольших степенях их компенсации акцепторами

$$T_2 \approx T_j/2 = \frac{1}{6k_B} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 R_{ch}} \approx \frac{0.338}{k_B} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} (KN_d)^{1/3}$$

$$R_{ch} \approx 0.62(2KN_d)^{-1/3}$$

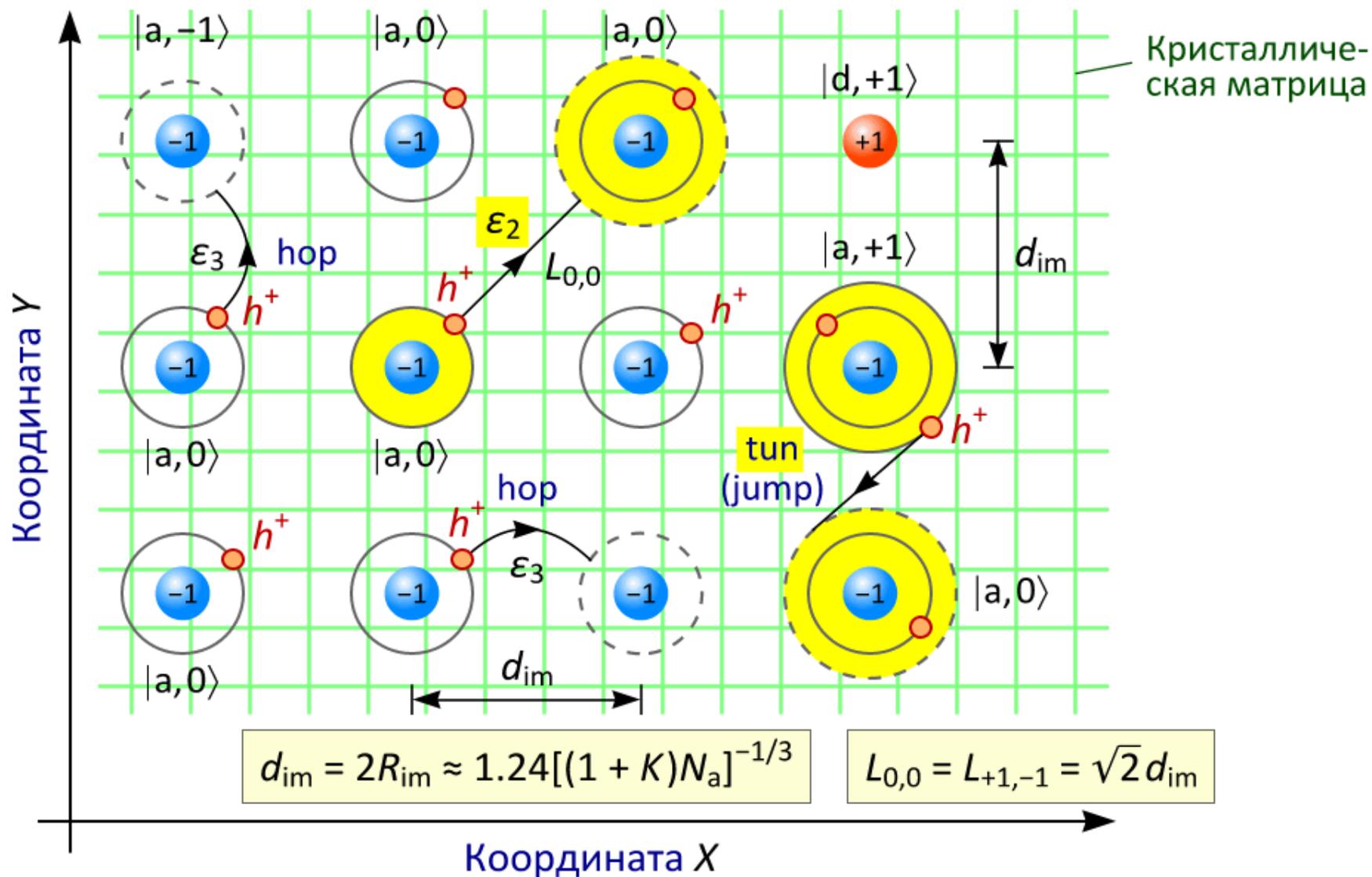


Линии — расчет, точки — экспериментальные значения

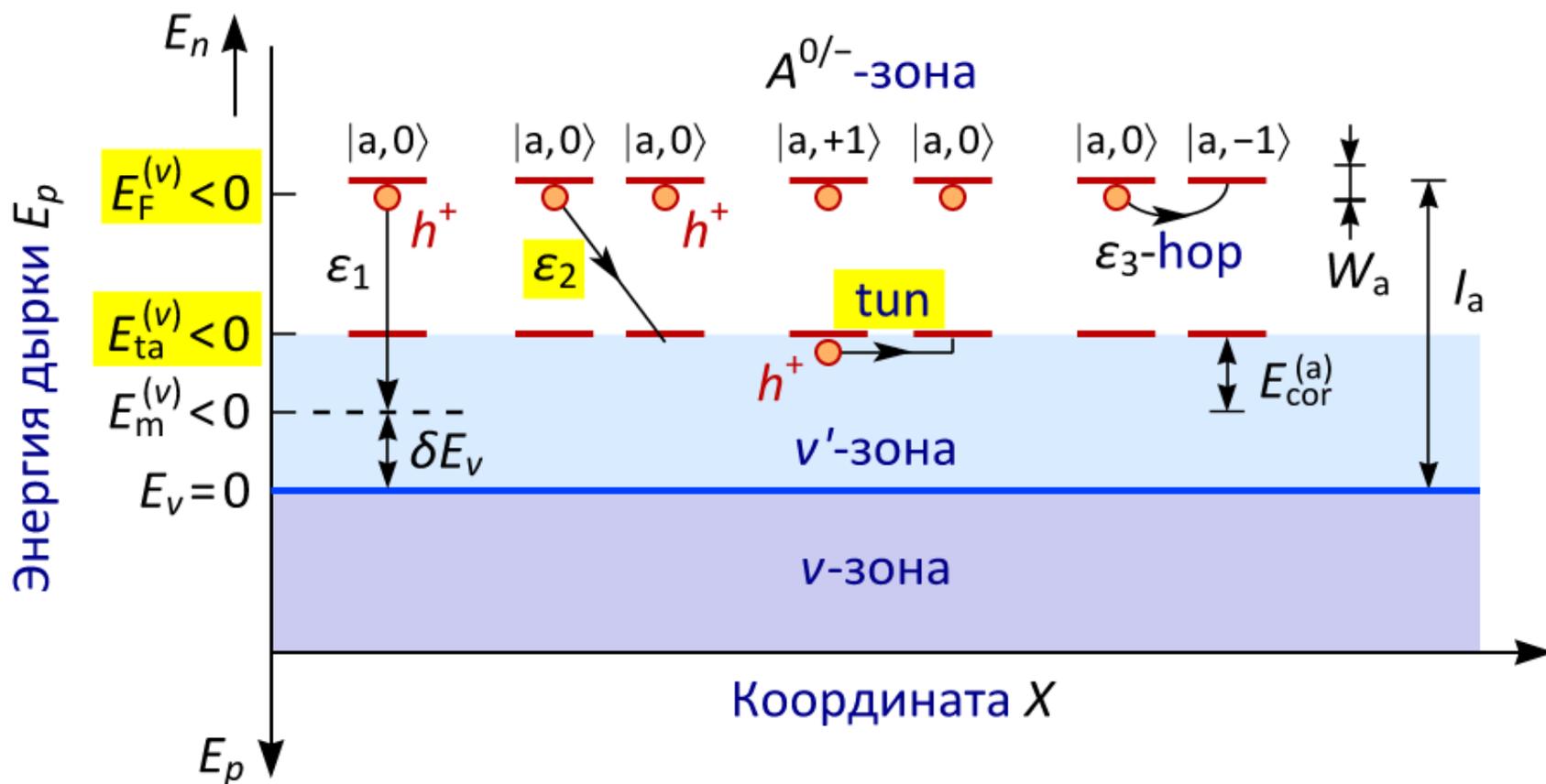
$N_M$  — моттовская концентрация доноров

N.A. Poklonski, I.I. Anikeev, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii. *Calculation of the activation energy of electrical  $\varepsilon_2$ -conductivity of weakly compensated semiconductors*. Phys. Status Solidi B, **262** (1), 2400178 (2025).

## 2D-схема примесной простой нестехиометрической кубической решетки из акцепторов $|a, -1\rangle$ , $|a, 0\rangle$ , $|a, +1\rangle$ и доноров $|d, +1\rangle$

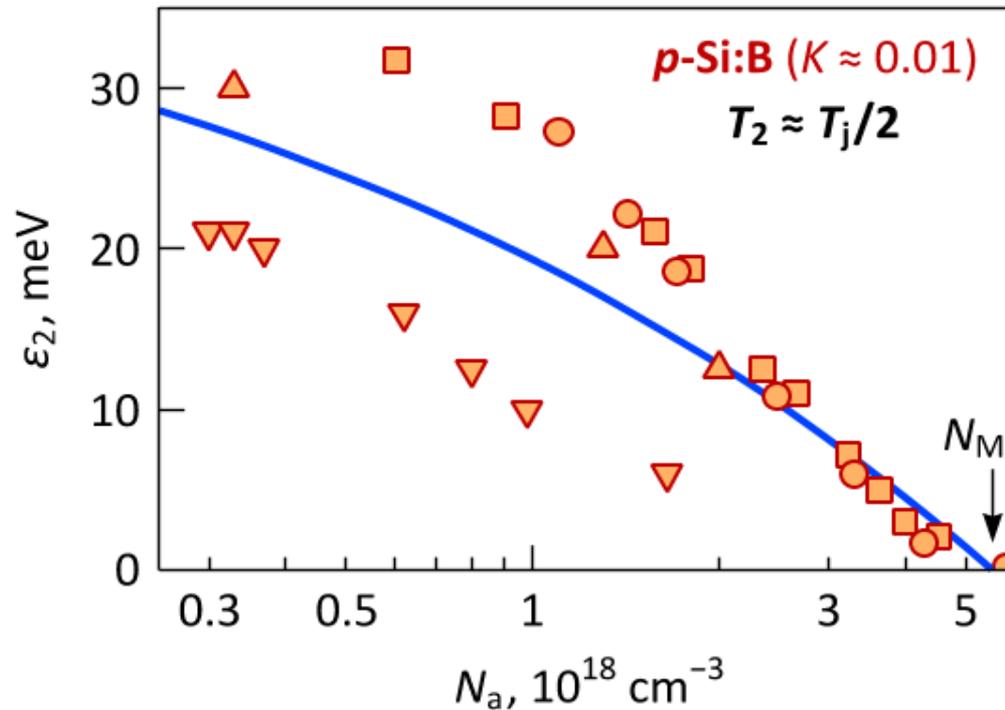


# Схема уровней энергии акцепторов (средние значения) вблизи потолка $v$ -зоны ( $E_v = 0$ ) полупроводника $p$ -типа для зарядовых состояний $(-1)$ , $(0)$ и $(+1)$ акцепторов



1. J. Mycielski. *Mechanism of impurity conduction in semiconductors*. Phys. Rev., **123** (1), 99–103 (1961).
2. N.L. Lavrik, V.P. Voloshin. *Calculation of mean distances between the randomly distributed particles in the model of points and hard spheres (the method of Voronoi polyhedra)*. J. Chem. Phys., **114** (21), 9489–9491 (2001).

# Энергия активации $\epsilon_2$ -электропроводности $p$ -Si:B в зависимости от концентрации атомов бора как водородоподобных акцепторов



Линии — расчет, точки — экспериментальные значения  
 $N_M$  — моттовская концентрация атомов бора

## Эпилог: стрела времени (годы)

- 2026 — Что дальше? Элементы (термо)электроники, НС-аноды для электролиза  $\text{H}_2\text{O}$ , ...
- 1981 — Конверсия типа электрической проводимости при нейтронном трансмутационном легировании германия: А.Г. Забродский. Письма в ЖЭТФ, **33** (5), 258–262 (1981)
- 1977 — Приведенная энергия термической активации  $w_z = -\partial \ln \sigma_{dc} / \partial \ln T$   
А.Г. Забродский. ФТП, **11** (3), 595–597 (1977); Phil. Mag. B, **81** (9), 1131–1151 (2001)
- 1975 — Модель Эфроса–Шкловского  $\sigma_4 \propto \exp[-(T_{ES}/T)^{1/2}] \Rightarrow \varepsilon_4(T) \propto T^{1/2}$   
A.L. Efros, B.I. Shklovskii. J. Phys. C, **8** (4), L49–L51 (1975);  
B.I. Shklovskii. Low Temp. Phys., **50** (12), 1101–1112 (2024)
- 1969 — Модель Мотта  $\sigma_4 \propto \exp[-(T_M/T)^{1/4}] \Rightarrow \varepsilon_4(T) \propto T^{3/4}$   
N.F. Mott. Phil. Mag., **19** (160), 835–852 (1969)
- 1960 — Нейтронное трансмутационное легирование кристаллов германия  
H. Fritzsche, M. Cuevas. Phys. Rev., **119** (4), 1238–1242 (1960)
- 1958 — Водородоподобные акцепторы  $|a, +1\rangle$  в кристаллических полупроводниках  
M.A. Lampert. Phys. Rev. Lett., **1** (12), 450–453 (1958)
- 1956 — Для реализации НС необходима компенсация основных водородоподобных примесей неосновными примесями: N.F. Mott. Can. J. Phys., **34** (12), 1356–1368 (1956);  
E.M. Conwell. Phys. Rev., **103** (1), 51–61 (1956)
- 1955 —  $\sigma_{dc} = \sigma_1 + \sigma_h = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4$ : H. Fritzsche. Phys. Rev., **99** (2), 406–419 (1955)
- 1954 — Обнаружение  $\sigma_{dc} = \sigma_h$  в кристаллах Ge при  $T \leq 5$  К; донорные и акцепторные зоны  
C.S. Hung, J.R. Gliessman. Phys. Rev., **96** (5), 1226–1236 (1954)
- 1953 — Водородоподобные доноры  $|d, -1\rangle$  в кристаллических полупроводниках (рассеяние электронов с-зоны на донорах по Брейту–Вигнеру)  
А.И. Ансельм. ЖЭТФ, **24** (1), 83–89 (1953)

# Спасибо за внимание!



High  $T$

1

2

3

4

Low  $T$

|

|

|

|

$$|d,0\rangle \xrightarrow{e^-} |d,+1\rangle$$

|

$$|d,0\rangle + |d,0\rangle \xrightleftharpoons{e^-} |d,+1\rangle + |d,-1\rangle$$

$$|d,0\rangle \rightleftharpoons |d,+1\rangle + e^- \text{ (c-band)}$$

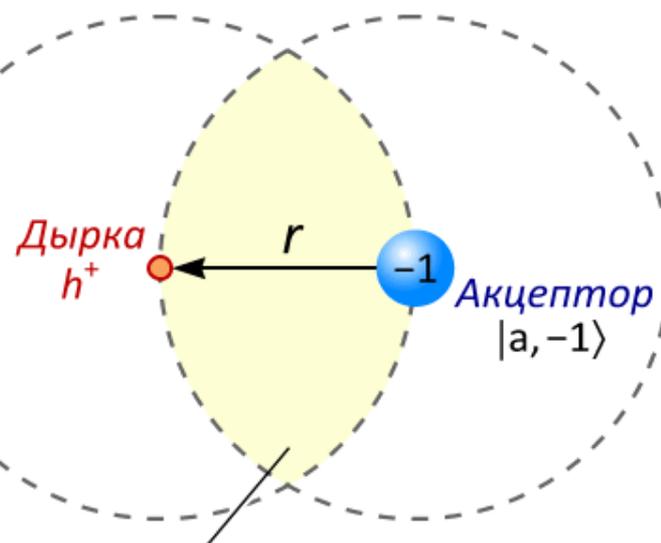
## Ужин

### Что? Где? Когда?

# Для любого  $\varepsilon > 0$   
существует такое  $\delta$ , что ?

# Приложение

# Взаимно ближайшие ион акцептора и дырка в трехмерном кристаллическом полупроводнике $p$ -типа



$$V_{\text{min}} = 9\pi r^3/4$$

Случайная величина  $X$  для пуассоновского распределения принимает значение  $q$  с вероятностью

$$\mathcal{P}\{X=q\} = \frac{\langle X \rangle^q \exp(-\langle X \rangle)}{q!},$$

где  $q = 0, 1, 2, 3, \dots$ ;  $\langle X \rangle$  — среднее значение  $X$

Условие электрической нейтральности

$$p + KN_a = N_{a,-1};$$

$p$  — концентрация дырок  $v$ -зоны,  $N_a = N_{a,0} + N_{a,-1}$ ,  $N_d = KN_a$  — концентрации акцепторов  $|a, 0\rangle + |a, -1\rangle$  и доноров  $|d, +1\rangle$

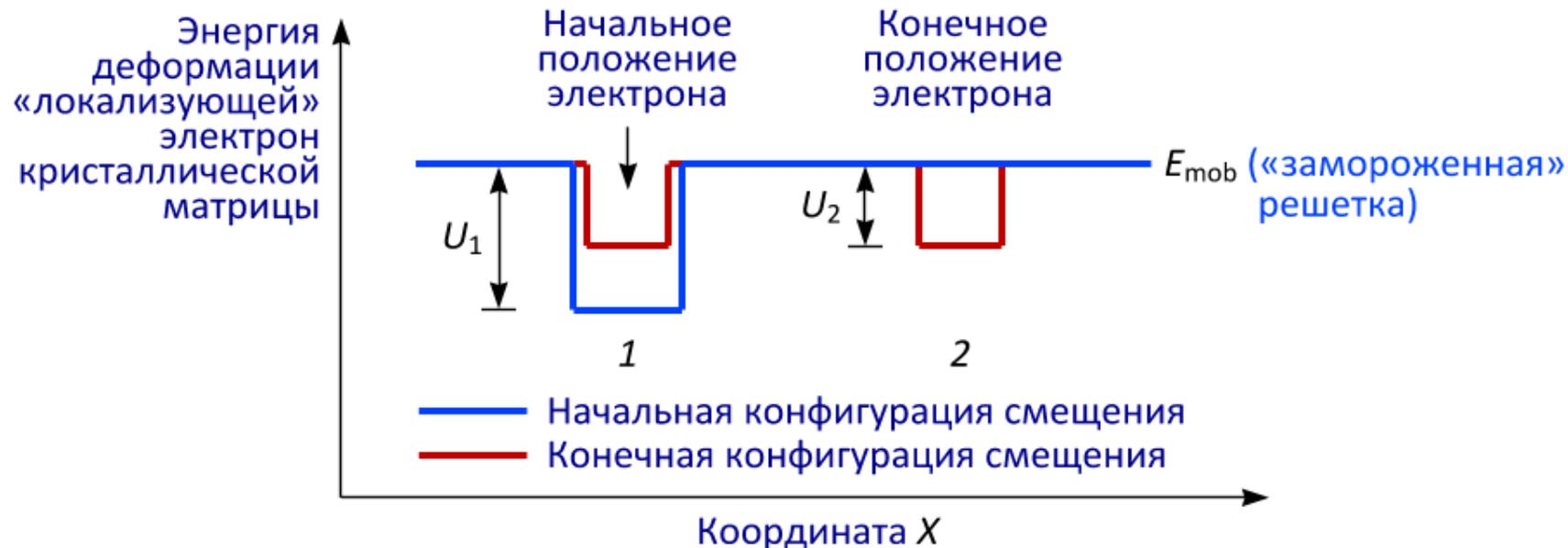
Плотность распределения расстояния  $r$  между  $h^+$  и  $|a, -1\rangle$

$$\mathcal{P}(r) dr = 4\pi r^2 (p + N_{a,-1}) \exp\left(-\frac{4\pi}{3} r^3 (p + N_{a,-1})\right) dr$$

$$U(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r}$$

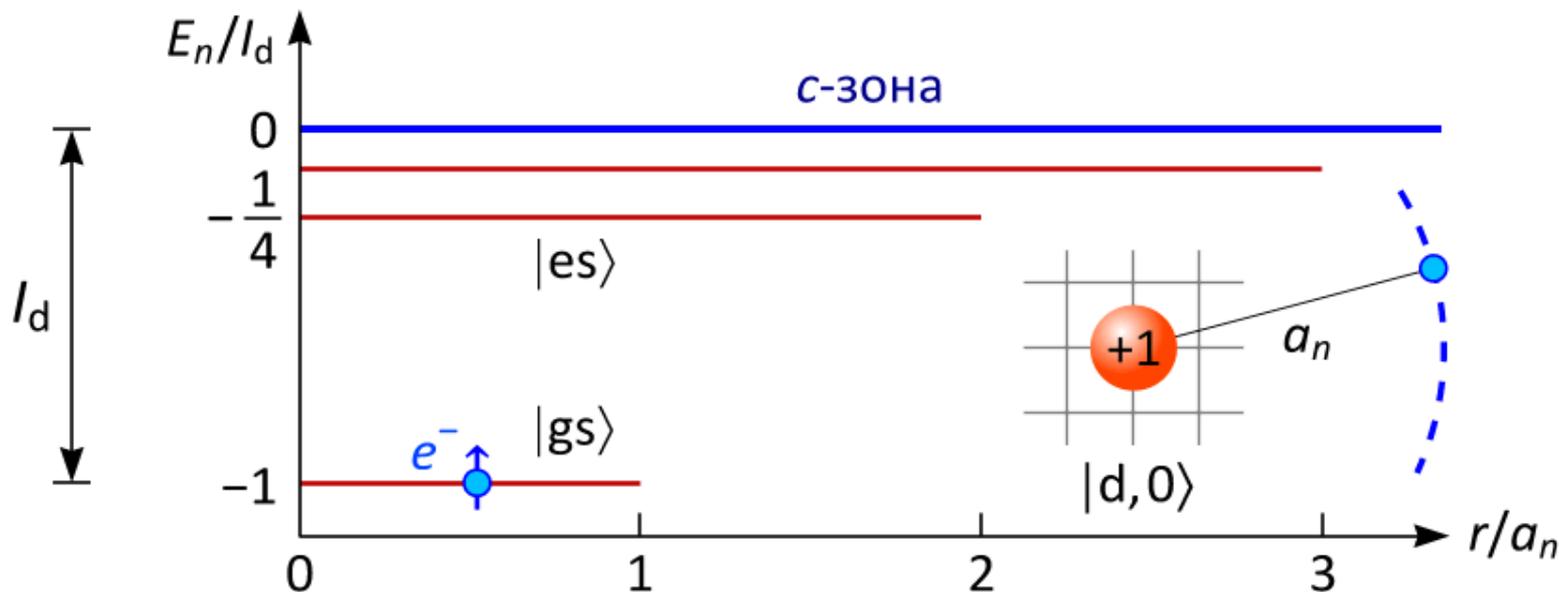
$$\langle U \rangle = \int_0^\infty U(r) \mathcal{P}(r) dr \approx 1.354 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \left(\frac{4\pi}{3} (p + N_{a,-1})\right)^{1/3}$$

1. B.K. Ridley. *On the Coulombic scattering of a charged particle*. J. Phys. A: Math. Gen., **10** (4), L79–L81 (1977);
2. D.K. Pickard. *Isolated nearest neighbors*. J. Appl. Probab., **19** (2), 444–449 (1982).
3. Т. Кога. *Введение в кинетическую теорию стохастических процессов в газах* (М.: Наука, 1983). 272 с.
4. Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, О.Н. Поклонская, А.Г. Забродский. *Роль электростатических флуктуаций при переходе от зонной электропроводности к прыжковой в легированных полупроводниках (на примере  $p$ -Ge:Ga)*. ФТП, **50** (6), 738–750 (2016).



Уровень энергии электрона, занимающего узел кристаллической решетки, является функцией мгновенного положения соседних атомов матрицы. Из-за тепловых колебаний атомов энергия захваченного электрона меняется во времени. В некоторый момент может возникнуть ситуация, при которой уровень энергии на узле 1 со связанным электроном равен уровню энергии на ближайшем соседнем узле 2. Такое событие называется «случаем совпадения» [1].

1. T. Holstein. *Studies of polaron motion*. Ann. Phys., **281** (1-2), 706 (2000); Ann. Phys., **8** (3), 343 (1959).
2. R.R. Heikes, Ure R.W. *Thermoelectricity. Science and Engineering* (NY.: Interscience Publ., 1961) xii+570 p.
3. П. Нагельс. *Электронные явления переноса в аморфных полупроводниках*.  
В кн. *Аморфные полупроводники* / Под ред. М. Бродски (М.: Мир, 1982) 419 с.
4. Ю.А. Фирсов. *Поляроны малого радиуса. Явления переноса*. ФТП, **29** (5), 994–1039 (1995).
5. Д.Р. Кокс, У.Л. Смит. *Теория очередей* (М.: Мир, 1966) 218 с.
6. N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii. *Model of hopping dc conductivity via nearest neighbor boron atoms in moderately compensated diamond crystals*. Solid State Commun., **149** (31-32), 1248–1253 (2009).
7. Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин. *Решеточная модель термоэдс при прыжковой проводимости: применение к нейтронно-легированному кристаллическому германию*. ФТТ, **43** (12), 2126–2134 (2001).



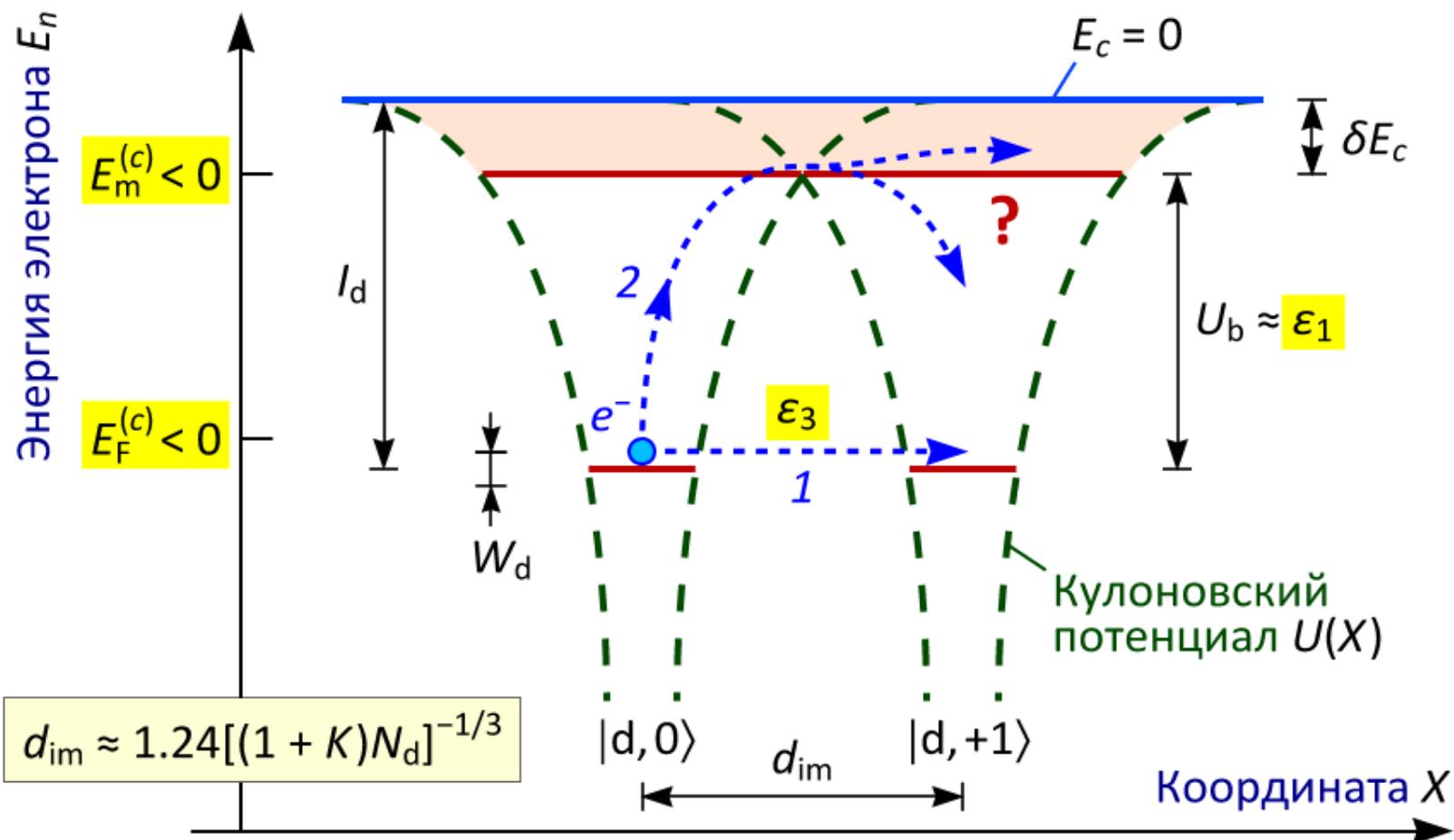
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_d - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} \psi_d = I_d \psi_d \quad \psi_d = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_n^3} \exp\left(-\frac{r}{a_n}\right)$$

$$I_d = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{1}{a_n} \quad a_n = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{\epsilon_r I_d}$$

$$I_d = \frac{e^4 m}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2 \epsilon_r^2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{1}{a_B} \quad a_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \epsilon_r}{e^2 m} \quad a_i = \frac{\hbar}{\sqrt{2mI_d}}$$

Для кристалла *n*-GaAs:S  $a_{\text{lat}} = 0.565 \text{ nm}$ ,  $\epsilon_r = 12.4$   $a_B/a_{\text{lat}} \approx 17$   $a_n/a_{\text{lat}} \approx 15$   
 $m/m_0 = 0.067$ ,  $I_d \approx 6 \text{ meV}$   $a_i/a_{\text{lat}} \approx 16$

# Доноры $|d, 0\rangle$ и $|d, +1\rangle$ в кристаллической матрице на диаграмме "одноэлектронная энергия $E_n$ – координата $X$ "



- 1 — подбарьерный переход электрона между  $|d, 0\rangle$  и  $|d, +1\rangle$   
 2 — надбарьерный переход электрона между  $|d, 0\rangle$  и  $|d, +1\rangle$

Переходы между  $|d, 0\rangle$  и  $|d, +1\rangle$  вызываются тепловыми флуктуациями и экспоненциально редки, если высота энергетического барьера  $U_b > k_B T_3$ .

## Расчетная формула для $\epsilon_1$

Уменьшение  $\epsilon_1$  при увеличении концентрации доноров  $N_d = N_{d,0} + N_{d,+1}$  вследствие образования квазинепрерывной полосы одноэлектронных энергий ( $c'$ -зоны) из возбужденных состояний доноров  $|d,0\rangle$ , доступных для миграции электронов, имеет вид:

$$\epsilon_1 = \left(1 - \frac{a_n}{R_{im}}\right) I_d = I_d - \delta E_c$$

где  $a_n$  — боровский радиус орбиты электрона на доноре  $|d,0\rangle$  в основном (невозбужденном) состоянии;  $R_{im} \approx 0.62[(1+K)N_d]^{-1/3}$  — радиус сферической области кристалла, приходящейся на любой один атом примеси (донор или акцептор),  $d_{im} = 2R_{im}$ ;  $I_d = e^2/8\pi\epsilon_r\epsilon_0 a_n$  — энергия термической ионизации «изолированного» донора  $|d,0\rangle$ ;  $e$  — элементарный заряд,  $\epsilon_r$  — низкочастотная относительная диэлектрическая проницаемость (определяется электронами  $v$ -зоны на фоне ионных остовов кристаллической матрицы),  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная.

Для атомов примесей, образующих в трехмерном кристалле нестехиометрическую простую кубическую «решетку» с периодом трансляции  $d_{im}$ , по теореме вириала определим температуру  $T_j$ , при которой  $\sigma_1 \approx \sigma_2$  для концентрации электронов  $c$ -зоны  $n \ll K(1-K)N_d$  и  $N_{d,-1} \ll N_{d,+1} = KN_d$ , в виде:

$$T_j = \frac{1}{3k_B} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 R_{ch}} \approx \frac{0.677}{k_B} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} (KN_d)^{1/3}$$

где  $R_{ch} \approx 0.62(2KN_d)^{-1/3}$  — радиус сферической области, приходящейся на один ион примеси в кристалле;  $N_{d,+1} + N_{d,-1} + KN_d \approx 2KN_d$  — концентрация ионов примесей.

Алгоритм расчета  $\epsilon_2$ 

Расчет

 $\epsilon_2$ 

Фундаментальные физические постоянные CODATA-2018:  
 $m_0, e, \hbar, c, k_B, \mu_0, \epsilon_0$

Выбор материала:  
 $\epsilon_r, I_a, \beta_a, I_d, \beta_d, K, n_{\text{points}}$

Задание режима расчетов:  
 а)  $E_F^{(c)}(N_d)$  для  $K, T_j$   
 б)  $E_F^{(v)}(N_a)$  для  $K, T_j$

Задание приближения широких зон:  
 $W_a, W_d > 0$

Для  $i$  от 1 до  $n_{\text{points}}$

$K := K[i],$   
 а)  $N_d := N_d[i],$  б)  $N_a := N_a[i]$

Вычисляются:

а)  $d_{\text{im}}(K, N_d), R_{\text{ch}}(K, N_d),$   
 б)  $d_{\text{im}}(K, N_a), R_{\text{ch}}(K, N_a),$   
 $T_j(R_{\text{ch}}), T_2 = T_j/2,$

Вычисляются:

а)  $W_d(d_{\text{im}}, K),$  б)  $W_a(d_{\text{im}}, K)$

Вычисляется уровень Ферми  $E_F^{(c)}$  или  $E_F^{(v)}$  из условия электрической нейтральности:

а)  $KN_d = N_{d,+1}(E_F^{(c)})$   
 б)  $KN_a = N_{a,-1}(E_F^{(v)})$

Вычисляются:

а)  $\delta E_c(d_{\text{im}}),$   
 $L_{-1,+1}(d_{\text{im}}), E_{\text{cor}}^{(d)}(L_{-1,+1})$   
 б)  $\delta E_v(d_{\text{im}}),$   
 $L_{+1,-1}(d_{\text{im}}), E_{\text{cor}}^{(a)}(L_{+1,-1})$

Вычисляются:

а)  $E_{\text{td}}^{(c)} = -(\delta E_c + E_{\text{cor}}^{(d)})$   
 б)  $E_{\text{ta}}^{(v)} = -(\delta E_v + E_{\text{cor}}^{(a)})$

Вычисляются

и выводятся:

а)  $\epsilon_2 = -E_F^{(c)} + E_{\text{td}}^{(c)}$   
 б)  $\epsilon_2 = -E_F^{(v)} + E_{\text{ta}}^{(v)}$

Конец