

Моделирование температурной зависимости энергии ионизации водородоподобных примесей в полупроводниках: применение к трансмутационно легированному Ge:Ga

© Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский*, С.В. Егоров*

Белорусский государственный университет,
220050 Минск, Белоруссия

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: poklonski@bsu.by

(Поступила в Редакцию 1 апреля 2003 г.)

Развита электростатическая модель, описывающая зависимость термической энергии ионизации (ТЭИ) примесей от их концентрации, степени компенсации и температуры. Модель учитывает экранирование ионов прыгающими по примесям дырками (электронами), изменение ширины примесной зоны, а также смещение ее положения относительно края v -зоны для акцепторов (c -зоны для доноров). Смещение примесной зоны обусловлено функциональной зависимостью энергии сродства ионизированного акцептора к дырке (донора к электрону) от экранирования кулоновских полей ионов. Пространственное распределение ионов примесей по кристаллу принималось пуассоновским, а энергетическое — нормальным (гауссовым). Для исследованных (относительно невысоких) уровней легирования ход плотности состояний на краях v - и c -зон предполагался таким же, как и у нелегированного кристалла. Результаты численного моделирования согласуются с наблюдаемым на умеренно компенсированном Ge:Ga уменьшением энергии ионизации с температурой и уровнем легирования. При малых степенях компенсации предсказывается существование небольшого аномального максимума в температурной зависимости ТЭИ.

Работа поддержана Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (грант Ф01-199) и Российским фондом фундаментальных исследований (гранты № 01-02-17813 и 00-15-96750).

Термической энергией ионизации (ТЭИ) называют энергию, необходимую для диссоциации связанного состояния электрона на доноре (дырки на акцепторе) при данной температуре вследствие тепловых флуктуаций.¹ Величина ТЭИ определяет изменение концентрации свободных носителей заряда при изменении температуры. Концентрация носителей заряда в легированных полупроводниках задается ионизационно-рекомбинационным равновесием электронов (дырок) с примесными атомами (см., например, [1]). В работах [2,3] проанализированы некоторые предельные зависимости низкотемпературной ТЭИ (энергии термической ионизации E_1) водородоподобной примеси от ее концентрации и степени компенсации. При анализе ионизационного равновесия в легированных полупроводниках энергию E_1 полагают зависящей от температуры T по аналогии с энергией активации реакций, протекающих в молекулярном газе [4] или плазме [5]. Однако конкретный вид зависимости $E_1(T)$ для полупроводников достоверно не установлен ни экспериментально, ни теоретически. Например, в [6] проанализирован частный случай влияния экранирования ионов на степень ионизации некомпенсированных водородоподобных примесей в зависимости от температуры. В [6–11] при расчетах не учитывается энергетический разброс примесных уровней, т. е. образование

примесной зоны конечной ширины в запрещенной зоне полупроводника. В то же время знание $E_1(T)$ важно не только для анализа температурной зависимости электропроводности [12], но, например, также термоэдс [13] и спектров электронного парамагнитного резонанса [14].

Приведем два примера. Так, в работе [15] предположение о том, что примесь азота в $6H\text{-SiC:N}$ при комнатной температуре является почти полностью ионизованной даже при высоких уровнях легирования, привело к резко заниженной (по сравнению с наблюдениями) оценке критической концентрации перехода изолятор–металл на уровне $2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Учет реально малой степени ионизации азота при комнатной температуре привел к резко отличному значению [16] — $2 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. По оценкам работы [17], в природных монокристаллах алмаза типа Па (после ионной имплантации бора с последующим отжигом) переход изолятор–металл, по данным измерений электропроводности, наблюдался при концентрации бора порядка 10^{21} cm^{-3} , в то время как в работе [18] оптические измерения (по резкому уменьшению энергии излучения связанного экситона) на легированных бором в процессе роста пленках алмаза дали всего лишь 10^{20} cm^{-3} .

Настоящая работа посвящена моделированию ТЭИ водородоподобной примеси в кристаллических полупроводниках при относительно невысоких уровнях легирования, т. е. вдали от фазового перехода изолятор–металл. Учитывается вклад в статистику от возбужденных состояний примеси, а также уширение и смещение примесной

¹ Оптическая энергия ионизации — минимальная энергия фотона, необходимая для перевода электрона (дырки) из связанного состояния в состояние сплошного спектра при фиксированном локализирующем потенциале (по Франку–Кондону).

зоны² относительно края ближайшей зоны разрешенных энергий. Проводится сравнение с существующими моделями [10,21,22], описывающими температурные, концентрационные и компенсационные зависимости ТЭИ.

1. Вывод необходимых формул и соотношений

Рассмотрим кристаллический полупроводник *p*-типа³ с концентрацией *p* дырок в *v*-зоне, акцепторов $N = N_0 + N_{-1}$ в зарядовых состояниях (0) и (-1), а также положительно заряженных доноров KN , где *K* — степень компенсации акцепторов донорами. Условие электронейтральности имеет вид

$$p + KN = N_{-1}. \quad (1)$$

При низких температурах, при которых определяется энергия термической ионизации E_1 , делокализованные дырки имеют большую длину волны де Бройля и „не замечают“ флуктуационного потенциала, т.е. „хвостом“ плотности состояний дырок в *v*-зоне можно пренебречь [26]. Тогда концентрация свободных дырок определяется выражением [21,22]

$$p = \int_0^\infty g_v f_p dE = 2 \left(\frac{2\pi m_p k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \right)^{3/2} F_{1/2} \left(\frac{E_F}{k_B T} \right), \quad (2)$$

где $g_v = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$ — плотность состояний дырок с эффективной массой m_p и энергией *E* в *v*-зоне кристалла единичного объема; $f_p = [1 + \exp(\frac{E-E_F}{k_B T})]^{-1}$ — функция Ферми-Дирака; $k_B T$ — тепловая энергия; $E_F < 0$ — уровень Ферми, отсчитанный от потолка *v*-зоны, в запрещенной зоне; $F_j(\frac{E_F}{k_B T}) = \int_0^\infty \frac{t^j dt}{1 + \exp(t - (E_F/k_B T))} \left(\int_0^\infty t^{j+1} \exp(-t) dt \right)^{-1}$ — интеграл Ферми-Дирака.

По поводу вычисления эффективной массы плотности состояний m_p в реальных полупроводниках заметим следующее. В *p*-Ge, например, она определяется эффективными массами легких m_l и тяжелых m_h дырок: $m_p = (m_h^{3/2} + m_l^{3/2})^{2/3} = 0.384m_0$ [27–29]. Спин-орбитально отщепленная энергетическая подзона находится на 290 meV ниже потолка *v*-зоны (при $T \approx 1.5$ K), что существенно превышает энергетический уровень

² Имеется в виду так называемая „классическая“ примесная зона [19,20], когда сдвиг энергетического уровня примесного атома относительно дна *c*-зоны или потолка *v*-зоны кристалла можно считать равным электростатической потенциальной энергии, созданной остальными заряженными примесями и делокализованными носителями заряда на этом центре.

³ Выбор типа проводимости не принципиален. Он обусловлен лишь последующим сравнением с данными серии образцов умеренно компенсированного *p*-Ge:Ga, которые получались путем легирования тепловыми реакторными нейтронами [23–25].

атомов галлия ($I_a \approx 11.32$ meV), так что этой подзоной при вычислении массы дырок можно пренебречь. С другой стороны, например, в кристаллическом алмазе необходимо учитывать вклад от массы m_s в спин-орбитально отщепленной подзоне, поскольку соответствующее отщепление *v*-зоны алмаза составляет всего 6 meV, что много меньше энергетического уровня основной акцепторной примеси в алмазе ($I_a \approx 370$ meV) [30]. Поэтому в кристаллическом алмазе величина эффективной массы плотности состояний дырки $m_p = (m_h^{3/2} + m_l^{3/2} + m_s^{3/2})^{2/3} = 1.249m_0$, где $m_h = 1.08m_0$, $m_l = 0.36m_0$, $m_s = 0.15m_0$ [28,29].

Концентрация ионизованных акцепторов (при гауссовом распределении их уровней энергии) в запрещенной зоне кристалла равна [2,3]

$$N_{-1} = N \int_{-\infty}^{+\infty} g_a f_{-1} d(E_a - \bar{E}_a) = N - N_0, \quad (3)$$

где

$$g_a = \frac{1}{W_a \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(E_a - \bar{E}_a)^2}{2W_a^2}\right) \quad (4)$$

— нормальная (гауссова) плотность распределения энергетических уровней акцепторов E_a относительно среднего значения \bar{E}_a ;

$$f_{-1} = 1 - f_0 = \left[1 + \beta_a(l_t) \exp\left(\frac{E_a + E_F}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (5)$$

— вероятность того, что акцептор с энергетическим уровнем E_a ионизован; $\beta_a(l_t) = \beta_a \times \sum_{l=1}^{l_t} l^2 \exp(\frac{(1-l^2)E_a}{l^2 k_B T})$ — эффективный фактор вырождения водородоподобного акцептора [7–10,21,22] при учете l_t уровней (основного состояния $l = 1$ и $l_t - 1$ возбужденных).

При записи (5) учтено, что фактор вырождения возбужденного состояния l акцептора в зарядовом состоянии (0) в l^2 раз больше, чем в основном состоянии, т.е. равен $\beta_a l^2$. Полагалось также, что энергия ионизации акцептора в l -м возбужденном состоянии есть: $E_{-1} - E_0(l) = E_a/l^2$, где E_a — энергия ионизации основного состояния ($l = 1$).

Для *p*-Ge фактор вырождения основного состояния водородоподобных акцепторов $\beta_a = 4$, так как учитываются только два типа дырок в *v*-зоне — легкие и тяжелые. Для алмаза *p*-типа $\beta_a = 6$, так как необходимо учитывать три подзоны дырок при термической ионизации атомов бора.

Среднеквадратичная флуктуация потенциальной энергии акцептора в зарядовом состоянии (-1) при учете лишь кулоновского поля ближайших соседей (ионов примеси или дырок) имеет вид [2,3]

$$W_a \approx 1.64 \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \left(\frac{8\pi}{3} N_{-1} \right)^{1/3}, \quad (6)$$

где $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$ — диэлектрическая проницаемость кристаллической решетки; $2N_{-1} = p + KN + N_{-1}$ — суммарная концентрация точечных зарядов в кристалле.

При легировании кристалла энергетический уровень „среднего“ акцептора (середины акцепторной зоны) уменьшается из-за экранирования притягивающего кулоновского поля ионов дырками акцепторной и v -зон [2]

$$\bar{E}_a = I_a - \frac{3e^2}{16\pi\epsilon(\Lambda_s + d)}, \quad (7)$$

где $I_a = e^2/(8\pi\epsilon a_H)$ — энергетический уровень одиночного (уединенного) акцептора выше потолка v -зоны, a_H — боровский радиус, Λ_s — длина экранирования электростатического поля, $d \approx 0.554((1+K)N)^{-1/3}$ — среднее расстояние между ближайшими примесными атомами, e — модуль заряда электрона.

Максимальное число уровней l_i нейтрального акцептора можно оценить по [5] из условия, что боровский радиус внешней орбиты дырки $a_H(l_i) = e^2 l_i^2 / (8\pi\epsilon I_a)$ не превышает половины среднего расстояния между ближайшими примесными атомами. Из равенства $a_H(l_i) = d/2$ имеем соотношение для оценки числа уровней (основного и возбужденных состояний)

$$l_i^2 = 0.554 \frac{4\pi\epsilon_r \epsilon_0 I_a}{e^2 ((1+K)N)^{1/3}}, \quad (8)$$

где $(1+K)N$ — суммарная концентрация водородоподобных акцепторов и доноров в кристалле; $l_i = 1, 2, 3, \dots$ — минимальное целое число.

Отметим, что, согласно (8), для p -Ge:Ga ($\epsilon_r = 15.4$, $I_a = 11.32$ meV, $K = 0.35$) условие отсутствия связанного состояния дырки на акцепторе (при $l_i < 1$ энергетических уровней атома Ga в запрещенной зоне Ge нет) соответствует концентрация атомов галлия $N > 2.23 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Оцененная по (8) величина N близка к критической концентрации галлия $N_M \approx 1.85 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ [31], соответствующей фазовому переходу изолятор–металл (переходу Мотта) при температуре $T \rightarrow 0$ для $K = 0.35$.

При учете экранирования кулоновского поля иона как свободными (индекс p), так и совершающими прыжки по акцепторам дырками (индекс h) длина экранирования Λ_s определяется соотношениями [32]

$$\Lambda_s^{-2} = \Lambda_p^{-2} + \Lambda_h^{-2},$$

$$\begin{aligned} \Lambda_p^{-2} &= \frac{e^2}{\epsilon} \frac{\partial p}{\partial E_F} = \frac{e^2}{\epsilon} \frac{2^{1/2} m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^\infty E^{1/2} f_p (1 - f_p) dE \\ &= \frac{e^2 p}{\epsilon k_B T} \frac{F_{-1/2}(E_F/k_B T)}{F_{1/2}(E_F/k_B T)}, \end{aligned}$$

$$\Lambda_h^{-2} = \frac{-e^2}{\epsilon} \frac{\partial N_{-1}}{\partial E_F} = \frac{e^2}{\epsilon k_B T} N \int_{-\infty}^{+\infty} g_a f_0 f_{-1} d(E_a - \bar{E}_a). \quad (9)$$

Согласно [2], для $p \ll K(1-K)N$ при низких температурах, когда $N_{-1} \approx KN$, из формулы (9) имеем

$$\begin{aligned} \Lambda_s^{-2} &\approx \Lambda_h^{-2} \\ &\approx \frac{e^2}{\epsilon} \frac{N}{W_a \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(E_F + \bar{E}_a + k_B T \ln \beta_a)^2}{2W_a^2}\right). \quad (10) \end{aligned}$$

Из (10) с учетом (6) при температуре $T \rightarrow 0$ получаем $\Lambda_s \approx \Lambda_h \approx 0.82 K^{1/6} N^{-1/3} \exp(\gamma_a^2/4)$, где $\gamma_a = (E_F + \bar{E}_a)/W_a$ находится из уравнения $1 - \text{erf}(\gamma_a/\sqrt{2}) = 2K$.

2. Моделирование ТЭИ

Обратимся к сравнению результатов моделирования ТЭИ по указанной схеме с наблюдаемой на опыте термической энергией активации E_1 . Для получения экспериментальных данных по ТЭИ водородоподобных примесных атомов в полупроводнике достаточно знать температурную зависимость концентрации свободных дырок $p(T)$, ибо [10,21,22]

$$E_1 = -k_B \frac{d \ln(pT^{-3/2})}{d(1/T)}. \quad (11)$$

Далее температурное поведение $E_1(T)$ рассмотрим на примере умеренно компенсированного p -Ge:Ga, полученного путем нейтронного легирования исходного чистого Ge [23–25], для концентраций атомов галлия $N \ll N_M$ — критической концентрации перехода изолятор–металл. Это означает, что влиянием „расходимости“ диэлектрической проницаемости в критической точке перехода можно пренебречь и полагать ее равной значению для чистого материала.

Рассчитаем температурные зависимости ТЭИ атомов галлия по формуле (11) с учетом (1)–(9) для образцов Ge:Ga с $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ и разными степенями компенсации, используя следующие параметры [27–29]: $I_a = 11.32$ meV, $m_p = 0.384m_0$, $\epsilon_r = 15.4$. Результаты расчетов приведены на рис. 1, а кривыми 1–3. Штриховыми линиями 1'–3' для сравнения показаны зависимости энергии ионизации водородоподобных акцепторов Ga в p -Ge, рассчитанные для стандартной модели бесконечно узкой акцепторной зоны ($W_a \rightarrow 0$) без учета ее сдвига относительно потолка v -зоны ($\bar{E}_a \rightarrow I_a$), т.е. для „идеального“ полупроводника. Видно, что при учете уширения и сдвига примесной зоны к v -зоне в соответствии с экспериментом [33] для n -Ge:As энергия термической ионизации E_1 атомов Ga с ростом степени компенсации увеличивается.

Небольшое увеличение термической энергии ионизации E_1 при $K = 0.1$ (рис. 1, а) в области низких температур обусловлено, согласно предлагаемой модели, превышением вклада сдвига центра примесной зоны \bar{E}_a от v -зоны в глубь запрещенной зоны из-за возрастания длины экранирования (рис. 1, б) над увеличением ее ширины W_a при нагревании.

Зависимость длины экранирования кулоновского поля иона в единицах боровского радиуса $a_H = e^2/8\pi\epsilon I_a$ по формуле (9) с учетом (1)–(8) от тепловой энергии $k_B T$ в единицах I_a представлена на рис. 1, *b*. Заметно немонотонное поведение длины экранирования при низких температурах, где энергия термической ионизации E_1 остается практически постоянной. При $T \rightarrow \infty$ в отличие от случая, когда $W_a \rightarrow 0$ и $\bar{E}_a \rightarrow I_a$ (штриховые линии), при учете конечной ширины акцепторной зоны длина экранирования стремится к конечной величине, а не к нулю, так как определяется плотностью состояний в примесной зоне на уровне Ферми. В области высоких температур, когда акцепторы полностью ионизованы, вклад совершающих прыжки по акцепторам дырок в длину экранирования исчезает и она превращается в дебаевскую длину экранирования: $\Lambda_s^{-2} \approx \Lambda_p^{-2} = e^2 p / \epsilon k_B T \approx (e^2 / \epsilon k_B T)(1 - K)N$.

Отметим, что, согласно [34,35], при $p \ll K(1 - K)N$ длина экранирования из (9) для $W_a \rightarrow 0$ равна

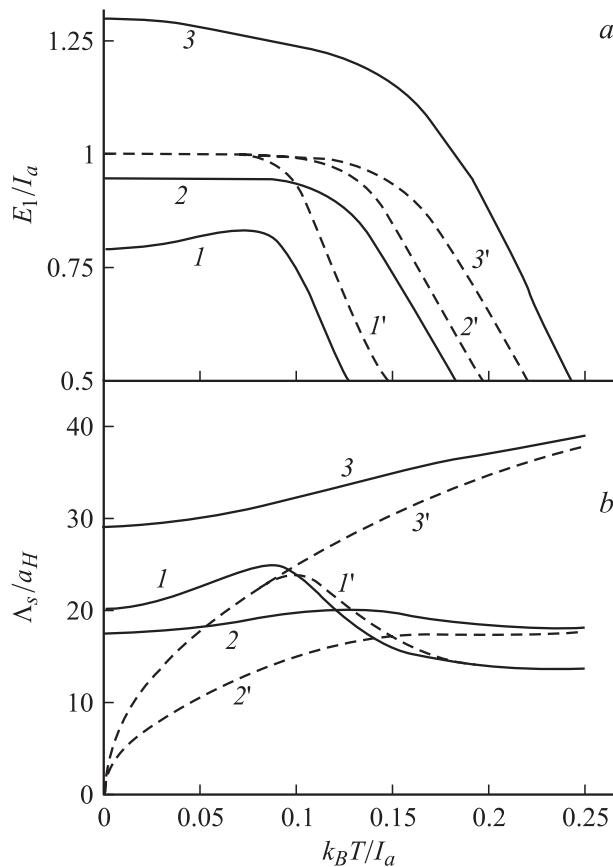


Рис. 1. Расчетная температурная зависимость термической энергии ионизации E_1 атомов Ga и длины экранирования Λ_s кулоновского поля иона примеси для разных степеней компенсации K атомов галлия в p -Ge: 1, 1' — $K = 0.1$; 2, 2' — $K = 0.5$; 3, 3' — $K = 0.9$. (а) 1–3 — расчет E_1 при $I_a = 11.32$ meV, $N = 10^{15}$ cm $^{-3}$ по (11) с учетом (1)–(9); 1'–3' — расчет E_1 для случая, когда одновременно $W_a \rightarrow 0$ и $\bar{E}_a \rightarrow I_a$. (б) 1–3 — расчет Λ_s при $N = 10^{15}$ cm $^{-3}$ по (9) с учетом (1)–(8); 1'–3' — расчет по (9) для $W_a \rightarrow 0$ и $\bar{E}_a \rightarrow I_a$.

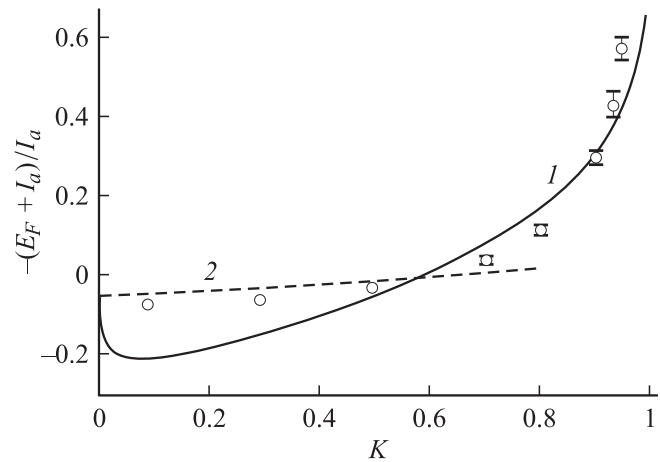


Рис. 2. Зависимость уровня Ферми E_F , приведенного к энергии ионизации одиночного атома галлия $I_a = 11.32$ meV в германии, от степени компенсации K для $N = 10^{15}$ cm $^{-3}$ при температуре $T \rightarrow 0$ (1). Кружки — результат численного моделирования [19,36]; 2 — расчет $-(E_F + I_a)/I_a$ по модели [20].

$\Lambda_s \approx \Lambda_h = (\epsilon k_B T / e^2 K(1 - K)N)^{1/2}$, поэтому в области низких температур кривые 1'(K = 0.05) и 3'(K = 0.95) совпадают.

На рис. 2 изображена зависимость уровня Ферми E_F (кривая 1) при температуре $T \rightarrow 0$ от степени компенсации K , рассчитанная из уравнения электронейтральности $N_{-1} = KN$ с учетом (3)–(8). Кружками показан результат численного моделирования зависимости в [19,36]; штриховая линия (2) — аналитическое соотношение для $-(E_F + I_a)/I_a$ по модели [20]. Заметим, что при $T \rightarrow 0$ для случая, когда $W_a \rightarrow 0$ и $\bar{E}_a \rightarrow I_a$, уровень Ферми $E_F \rightarrow I_a$ для степеней компенсации $0 < K < 1$.

3. Сравнение с экспериментом

На рис. 3 точками (квадраты, кружки, треугольники) представлены результаты обработки по формуле (11) экспериментальных данных [12] для образцов нейтронно-легированного Ge:Ga с разными уровнями легирования.⁴ Для этого экспериментальные значения $p(1/T)$ аппроксимировались в полулогарифмическом масштабе полиномом шестой степени и затем аналитически бралась производная по обратной температуре. Отметим, что в области прыжковой проводимости по акцепторам зависимость $\ln p$ от $1/T$ спрямлялась согласно соотношению (см., например, [7,12,37]) $p = (eR_H)^{-1}(1 + \sigma_h/\sigma_v)^{-2}$, где $R_H = R_v$ — коэффициент Холла дырок v -зоны; σ_v, σ_h — удельные электропроводности на участках зонного (v) и прыжкового (h) механизмов переноса дырок соответственно. При этом, согласно экспериментальным данным [12,37], для

⁴ При обработке экспериментальных данных в [12] холл-фактор для дырок v -зоны считался равным 1 во всем диапазоне изменения температуры.

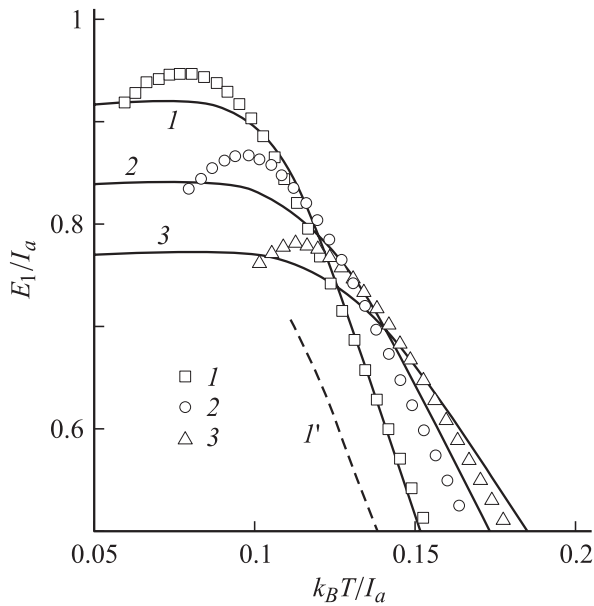


Рис. 3. Температурная зависимость термической энергии ионизации акцепторов Ga в p -Ge ($K = 0.35$). Точки получены из экспериментальных данных [12]. 1–3 — расчет $E_1(T)$ по (11) с учетом (1)–(9); I' — расчет по модели [38]. I, I' — $N = 3.7 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 2 — $N = 2.3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, 3 — $N = 6.3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

$2 \cdot 10^{14} < N < 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ и $K \approx 0.35$ температура T_h , при которой наблюдается равенство удельных электропроводностей за счет дырок v -зоны σ_v и прыжковой σ_h по атомам Ga, определяется аппроксимацией $T_h = 5.3 \cdot 10^{-4} N^{0.27}$, где $[T_h] = \text{K}$; $[N] = \text{cm}^{-3}$.

Линиями на рис. 3 показан соответствующий расчет по формуле (11) температурной зависимости энергии ионизации с учетом также функций (1)–(9). Видно, что предлагаемая нами модель хорошо передает основные экспериментальные особенности поведения ТЭИ как с изменением уровня легирования, так и температуры.

Имеет смысл сравнить кривые 1–3 на рис. 3 с расчетными по модели [38], учитывающей „прыжковое“ экранирование кулоновских полей ионов при каждом акте термической ионизации соответствующего нейтрального атома. Согласно [38], в области высоких температур ($k_B T \gg W_a$) энергетический уровень „среднего“ акцептора определяется выражением

$$\bar{E}_a = I_a - \frac{e^3 N^{1/2}}{8\pi(\epsilon_r \epsilon_0)^{3/2} (k_B T)^{1/2}} (K + 3) \sqrt{K(1 - K)}. \quad (12)$$

Штриховая линия I' на рис. 3 представляет результаты расчета $E_1(T)$ по (11) с учетом (12) для $N = 3.7 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ и $K = 0.35$ в приближении бесконечно узкой примесной зоны: $g_a \rightarrow \delta(E_a - \bar{E}_a)$ — дельта-функция Дирака. Проведенные расчеты $E_1(T)$ по модели [38] для концентраций, соответствующих кривым 2 и 3, дают значения, много меньшие $E_1/I_a = 0.5$.

На рис. 4 представлены рассчитанные по методу [39] с учетом формул (1)–(9) зависимости $-k_B T(dp/dE_F)$ от положения уровня Ферми $E_F < 0$ в запрещенной зоне p -Ge:Ga ($N = 6.3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$; $K = 0.35$) при увеличении температуры от 10 до 100 К. Видно, что в целом учет конечной ширины и сдвига акцепторной зоны к v -зоне приводит к лучшему согласию с экспериментальными данными [12], нежели расчет для случая, когда $W_a \rightarrow 0$ и $\bar{E}_a \rightarrow I_a$.

Более определенные выводы о согласии предлагаемой модели ТЭИ с экспериментом можно сделать, проанализировав концентрационную зависимость температуры $T_{1/2}$, при которой нейтральная (при $T \rightarrow 0$) часть примесных атомов при нагревании оказывается ионизованной ровно наполовину (рис. 5). Из уравнения (1) получаем, что при $T_{1/2}$ выполняется соотношение: $p(T_{1/2}) = N_{-1}(T_{1/2}) - KN = (1 - K)N/2$, где учтено, что при $T \rightarrow 0$ уже ионизовано KN акцепторов. Таким образом, $p(T_{1/2})$ представляет концентрацию дырок при температуре $T_{1/2}$, когда ионизована половина из $(1 - K)N$ нейтральных акцепторов; $N_{-1}(T_{1/2}) = (1 + K)N/2$. Зная концентрацию акцепторов N и степень их компенсации K донорами, можно, используя соотношение для $p(T_{1/2})$, оценить значение $T_{1/2}$ из экспериментального графика температурной зависимости концентрации дырок. На рис. 5 представлен расчет зависимости температуры $T_{1/2}$ с учетом формул (1)–(9) для p -Ge со степенью компенсации $K \approx 0.35$ от концентрации акцепторов N в единицах $N_M \approx 1.85 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Для сравнения на том же графике точками изображены значения $T_{1/2}$, полу-

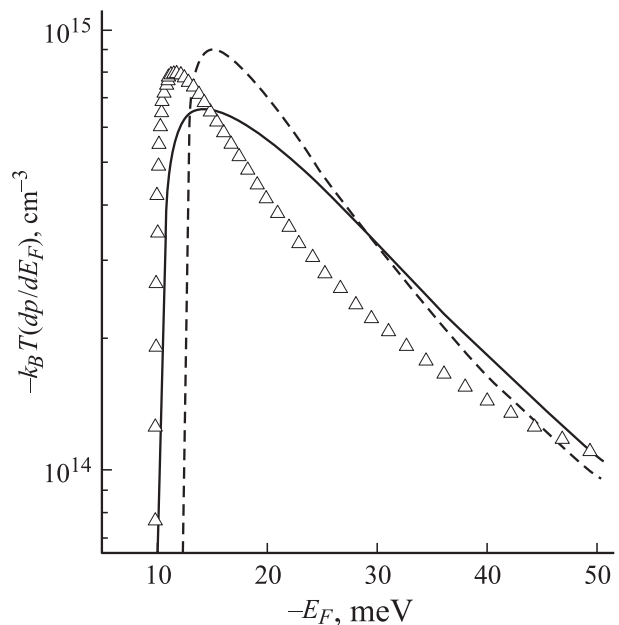


Рис. 4. Зависимость $-k_B T(dp/dE_F)$ от положения уровня Ферми в запрещенной зоне p -Ge:Ga для $N = 6.3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ и $K = 0.35$. Экспериментальные данные (треугольники) получены из [12]; сплошная линия — расчет по (1)–(9); штриховая линия — расчет для случая, когда $W_a \rightarrow 0$ и $\bar{E}_a \rightarrow I_a$.

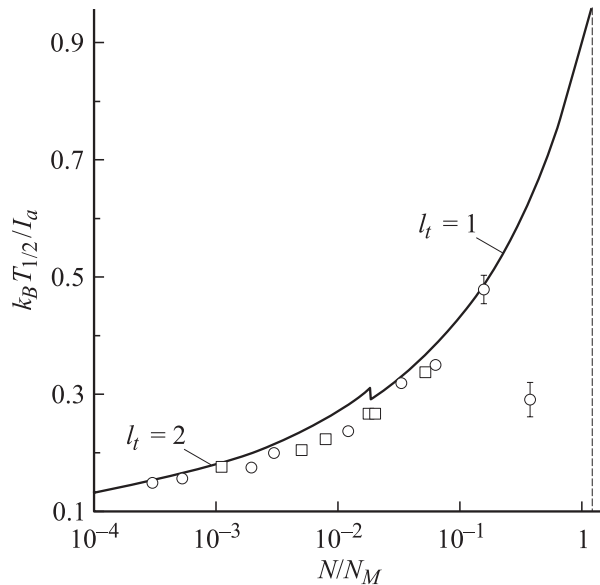


Рис. 5. Температура $T_{1/2}$, при которой ионизуется половина нейтральных (для $T \rightarrow 0$) атомов Ga при нагревании p -Ge:Ga со степенью компенсации $K \approx 0.35$ в зависимости от их концентрации N (в единицах $N_M = 1.85 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Сплошная линия — расчет по (1)–(9); излом линии отражает изменение числа учитываемых по (8) возбужденных состояний Ga, а штриховая — ($l_t < 1$; $T_{1/2} \rightarrow 0$). Точки — значения $T_{1/2}$, полученные из экспериментальных данных [12,37].

ченные согласно описанной процедуре из экспериментальных данных [12,37]. Отклонение вниз от расчетной кривой экспериментальной точки для концентрации галлия $N > 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ обусловлено приближением к переходу изолятор–металл и, по-видимому, проявлением хвостов плотности состояний v -зоны в термодинамике ионизационных процессов. Излом сплошной линии на рис. 5 обусловлен переходом, согласно (8), от числа уровней $l_t = 2$ к числу $l_t = 1$ (нет возбужденных состояний) с ростом концентрации галлия в Ge. Штриховая линия соответствует отсутствию связанных состояний дырки на атоме Ga, т.е. $l_t < 1$, и температуре $T_{1/2} \rightarrow 0$. Здесь отметим, что расчет зависимости $T_{1/2}(N)$ для „идеального“ кристалла ($W_a \rightarrow 0$; $\bar{E}_a \rightarrow I_a$) фактически совпадает с приведенным расчетом (сплошная линия на рис. 5), т.е. только дифференциальные зависимости позволяют выявить конечность ширины примесной зоны (рис. 1, 3, 4).

Таким образом, предложено теоретическое описание зависимости термической энергии ионизации водородоподобных примесей в кристаллических полупроводниках от температуры, концентрации легирующей примеси и степени ее компенсации в достаточно удаленной от точки перехода изолятор–металл области. Развитая модель предсказывает следующую особенность температурной зависимости ТЭИ для разных степеней компенсации: если при промежуточных и больших степенях компенсации ТЭИ падает с температурой, то при малых

возможна область температуры, где она возрастает. Слабый рост ТЭИ обусловлен превалярованием сдвига центра акцепторной зоны от v -зоны над ее уширением при увеличении температуры в области $k_B T \ll I_a$.

Сравнение с экспериментом для температурной зависимости ТЭИ на серии образцов умеренно компенсированного Ge:Ga, полученного путем нейтронного легирования, показывает хорошее согласие с результатами выполненного моделирования ТЭИ.

Список литературы

- [1] Е.В. Кучис. Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования. Радио и связь, М. (1990).
- [2] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло, Г. Бискупски. ФТП **33**, 415 (1999).
- [3] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло. ФТП **33**, 402 (1999).
- [4] В. Штиллер. Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика. Мир, М. (2000).
- [5] В. Эбелинг, В. Крефт, Д. Кремпл. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. Мир, М. (1979).
- [6] S.K. Chun. J. Appl. Phys. **80**, 4773 (1996).
- [7] Дж. Блекмор. Статистика электронов в полупроводниках. Мир, М. (1964).
- [8] Б.И. Болтакс, М.К. Бахадырханов, С.М. Городецкий, Г.С. Куликов. Компенсированный кремний. Наука, Л. (1972).
- [9] А. Милнс. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. Мир, М. (1977).
- [10] В.О. Барисс, Э.Э. Клотыньш. Определение параметров локального уровня в полупроводниках. Зинатне, Рига (1978).
- [11] J.H. Nevin, H.T. Henderson, K.L. Shen. Mater. Res. Bull. **17**, 1111 (1982).
- [12] А.Г. Андреев, В.В. Воронков, Г.И. Воронкова, А.Г. Забродский, Е.А. Петрова. ФТП **29**, 2218 (1995).
- [13] А.Г. Андреев, А.Г. Забродский, И.П. Звягин, С.В. Егоров. ФТП **31**, 1174 (1997).
- [14] А.И. Вейнгер, А.Г. Забродский, Т.В. Тиснек. ФТП **34**, 46 (2000).
- [15] M.N. Alexander, D.F. Holcomb. Rev. Mod. Phys. **40**, 815 (1968).
- [16] М.В. Алексеенко, А.Г. Забродский, М.П. Тимофеев. ФТП **21**, 810 (1987).
- [17] T. Tshepe, J.F. Prins, M.J.R. Hoch. Diamond and Related Materials **8**, 1508 (1999).
- [18] H. Sternschulte, T. Albrecht, K. Thonke, R. Sauer. 23rd Int. Conf. The Physics of Semiconductors. Berlin, Germany (1996). World Scientific, Singapore (1996). Vol. 1. P. 169.
- [19] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ФТП **14**, 825 (1980).
- [20] Ю.Я. Ткач, Е.В. Ченский. ЖЭТФ **102**, 1683 (1992).
- [21] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. Наука, М. (1990).
- [22] K. Seeger. Semiconductor physics: An introduction. Springer, Berlin (1999).
- [23] А.Г. Забродский, М.В. Алексеенко. ФТП **28**, 168 (1994).
- [24] Нейтронное трансмутационное легирование полупроводников / Под ред. Дж. Миза. Мир, М. (1982).
- [25] И.С. Шлимак. ФТТ **41**, 794 (1999).

- [26] Дж. Займан. Модели беспорядка. Мир, М. (1982).
- [27] Т.М. Лифшиц. ПТЭ *1*, 10 (1993).
- [28] Semiconductors–Basic Data / Ed. by O. Madelung. Springer, Berlin (1996).
- [29] Handbook Series on Semiconductor Parameters / Ed. by M. Levinstein, S. Rumyantsev, M. Shur. World Scientific, Singapore (1996). Vol. 1; World Scientific, Singapore (1999). Vol. 2.
- [30] В.С. Вавилов. УФН **167**, 17 (1997).
- [31] A.G. Zabrodskii, A.G. Andreev, S.V. Egorov. Phys. Stat. Sol. (b) **205**, 61 (1998).
- [32] Н.А. Поклонский. Изв. вузов. Физика **27**, 41 (1984).
- [33] И.С. Шлимак, В.В. Емцев. Письма в ЖЭТФ **13**, 153 (1971).
- [34] N.A. Poklonski, V.F. Stelmakh, V.D. Tkachev, S.V. Voitikov. Phys. Stat. Sol. (b) **88**, K165 (1978).
- [35] А.А. Узаков, А.Л. Эфрос. ЖЭТФ **81**, 1940 (1981).
- [36] Н.В. Лиен, Б.И. Шкловский. ФТП **13**, 1763 (1979).
- [37] Л.В. Говор, В.П. Доброго, Н.А. Поклонский. ФТП **18**, 2075 (1984).
- [38] А.А. Узаков, А.Л. Эфрос. ФТП **21**, 922 (1987).
- [39] H.-J. Hoffmann. Appl. Phys. **19**, 307 (1979).