

## ОБ АКЦЕПТОРНО-ДОНОРНЫХ СВОЙСТВАХ ДИСЛОКАЦИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ $p$ -ТИПА

Шикина Ю. В., Шикин В. Б.

Предложена модель дислокационного спектра электронов, объясняющая влияние дислокаций на свойства полупроводников  $p$ -типа. Модель содержит четыре параметра: положения акцепторного  $E_a$  и донорного  $E_d$  уровней в запрещенной зоне полупроводника, а также их емкости  $C_a$  и  $C_d$ . Дано обоснование использования этих параметров и определены с помощью имеющихся экспериментов их значения для деформированного  $p$ -германия.

В работе авторов [1] при обсуждении свойств заряженных дислокаций в полупроводниках  $p$ -типа предложена модель, позволяющая объяснить наблюдаемое в [2-4] поведение плотности свободных дырок в окрестности температуры  $T = T_*$ , где  $T_*$  — температура, при которой дислокации нейтральны. Модель содержит четыре феноменологических параметра: положения акцепторного  $E_a$  и донорного  $E_d$  уровней, а также их емкости  $C_a$ ,  $C_d$ . Дополнительно полагалось, что при достаточно большой плотности дислокаций взаимодействия электронов, локализованных на дислокациях, можно не учитывать.

Асимптотические свойства нейтральной модели исследованы в [1] для предельного случая  $E_a = E_d$ ,  $C_d \gg 1$ . Что касается общей картины, здесь приходится использовать численные методы. Полагая, как и в [1],  $E_a = E_d$ ,  $C_d \gg 1$ , находим зависимость плотности дырок  $n_p$  от  $T$ , представленную на рис. 1. Небольшая разница между параметрами  $E_0$ ,  $C_a$ , следующими из данных на рис. 1, и аналитическими оценками из [1] связана с разными способами подгонки экспериментальных данных [4]. В работе [1] принимались во внимание значение температуры  $T_*$  и асимптотическое значение  $n_p$  в области высоких температур. На рис. 1 подгонка шла с использованием значения  $T^*$  и наклона зависимости  $n_p(T)$  в точке  $T_*$ .

Недостатком нейтральной модели является слабая чувствительность  $n_p(T)$  к плотности дислокаций  $N_d$  в области  $N_d < N_d^*$ , где  $N_d^*$  — асимптотическое значение  $N_d$ , при котором  $n_p(T)$  перестает зависеть от  $N_d$ . Конечно, при стремлении  $N_d$  к нулю зависимость  $n_p(T)$  стремится к контрольной величине  $n_p^0$  (как это видно из рис. 1). Однако степень этой зависимости недостаточна для объяснения данных [3, 4] в области малых деформаций образца. Целью данной работы является обсуждение возможных причин, повышающих чувствительность модели к плотности дислокаций. Таких причин две: разная высота уровней  $E_a$  и  $E_d$ , а также кулоновское взаимодействие электронов, осевших на дислокации.

А. Для определения роли  $2\Delta = E_a - E_d$  в нейтральной модели

$$E_a = E_0 + \Delta, \quad E_d = E_0 - \Delta \quad (1)$$

нет необходимости во введении каких-либо дополнительных понятий. Речь идет о системе определений из [1] либо о формулах (7), (8), приведенных далее, в которых убираются кулоновские добавки. Результирующее поведение  $n_p(T)$  для условий из [4],  $C_d = 1$  и трех значений  $(\Delta/E_0) = 0.1, 0.25, 0.35$  приведено на рис. 2. Выбор параметров  $E_0$  и  $C_a$  — по двум точкам зависимости  $n_p(T)$  [положение точки  $T = T_*$  и значение  $n_p(T)$  при  $(10^3/T) \geq 5$ ]. Данные рис. 2 пока-

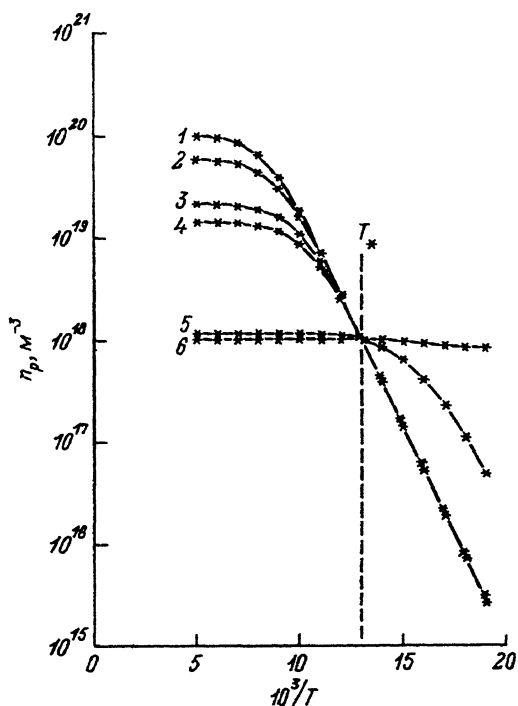


Рис. 1. Поведение  $n_p(T)$  в нейтральном приближении и условии  $E_a = E_d = E_0$ ,  $C_d = 1$ .

Для определения параметров  $E_0$  и  $C_a$  использованы экспериментальные [4] положение  $T = T_*$  и наклон кривой  $n_p(T)$  в этой точке ( $E_0 = 0,077$  эВ,  $C_a = 0,144$ ).  $I_2^{-6}$  — для плотностей дислокаций  $N_d$  соответственно  $3,5 \cdot 10^{11}$ ,  $2 \cdot 10^{11}$ ,  $7 \cdot 10^{10}$ ,  $4,5 \cdot 10^{10}$ ,  $10^9$ ,  $10^7$  м<sup>-2</sup> (для первых четырех кривых плотность  $N_d$  взята из [4]).

зывают, что с ростом  $\Delta$  верс кривых  $n_p(T)$  в окрестности точки  $T = T_*$  возрастает. Однако начиная с  $(\Delta/E) > 0,25$  в температурной зависимости  $n_p(T)$  появляются новые качественные детали (дополнительные изгибы), отсутствующие на экспериментальных кривых. Поэтому увеличение  $\Delta$  в область  $(\Delta/E_0) > 0,25$  не имеет смысла.

Что касается абсолютной величины верса кривых  $n_p(T)$  в окрестности  $T = T_*$ , то он все еще недостаточен для объяснения экспериментальной ситуации из [3,4], и теория должна усложняться в сторону учета кулоновских эффектов.

Б. Кулоновское взаимодействие зарядов на дислокации в области  $T = T_*$  можно условно разбить на две части:

$$V_c = V_c^+ + V_c^- \quad (2)$$

Энергия  $V_c^+$  отвечает знакопеременному распределению заряда вдоль дислокации при равенстве нулю общего заряда. Очевидно, что  $V_c^+ \neq 0$  в точке  $T = T_*$  и может быть определена выражением, являющимся разновидностью энергии Маделунга в теории ионных кристаллов:

$$V_c^+ = \frac{2e^2}{\kappa a} \nu^+ \ln 2,$$

$$\nu^+ = \frac{1}{2} \left[ \frac{C_a}{1 + \exp\left(\frac{E_0 - V_c^+ - F}{T}\right)} + \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{F + E_0 - V_c^+}{T}\right)} \right], \quad (3)$$

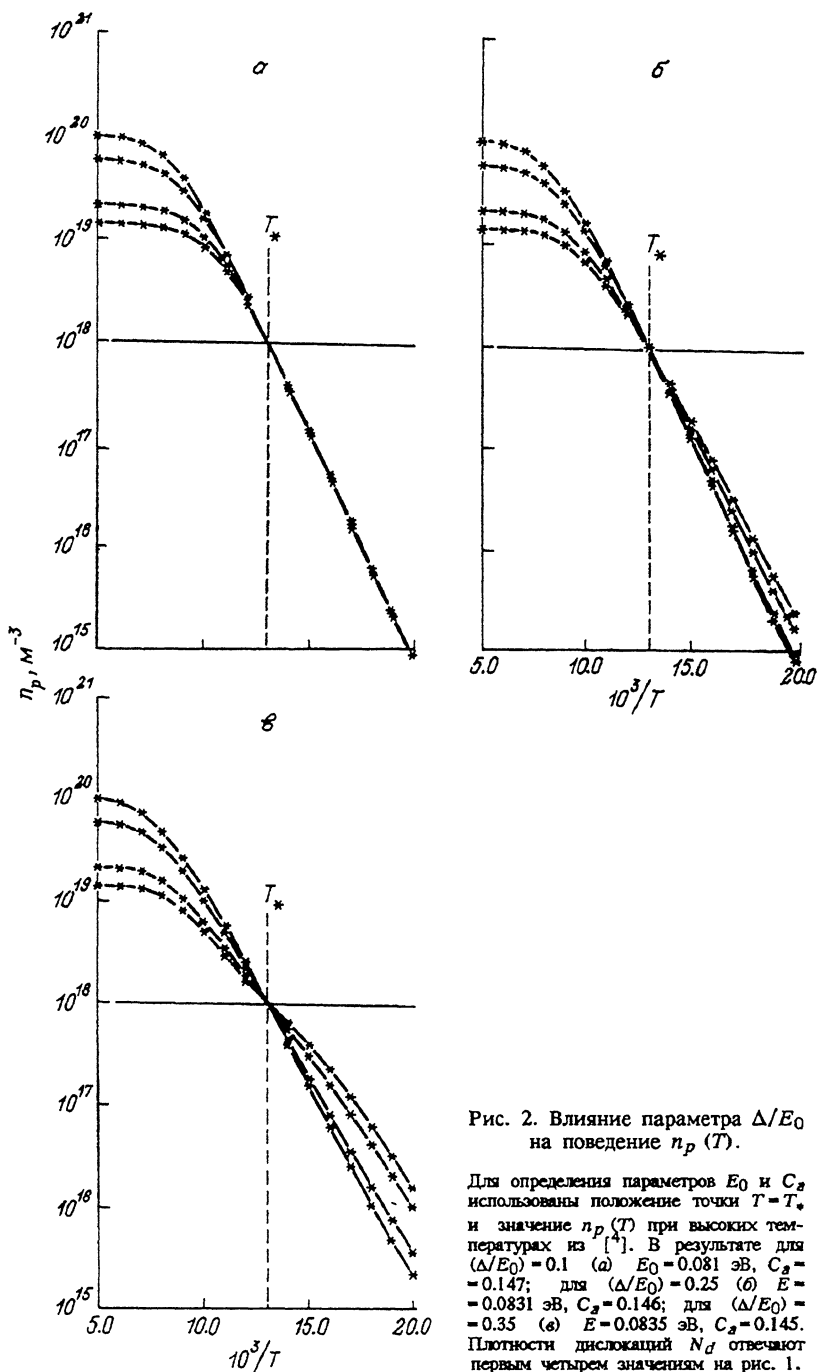


Рис. 2. Влияние параметра  $\Delta/E_0$  на поведение  $n_p(T)$ .

Для определения параметров  $E_0$  и  $C_2$  использованы положение точки  $T = T_*$  и значение  $n_p(T)$  при высоких температурах из [4]. В результате для  $(\Delta/E_0) = 0.1$  (а)  $E_0 = 0.081$  эВ,  $C_2 = -0.147$ ; для  $(\Delta/E_0) = 0.25$  (б)  $E_0 = 0.0831$  эВ,  $C_2 = 0.146$ ; для  $(\Delta/E_0) = 0.35$  (в)  $E_0 = 0.0835$  эВ,  $C_2 = 0.145$ . Плотности дислокаций  $N_d$  отвечают первым четырем значениям на рис. 1.

где  $\kappa$  — диэлектрическая постоянная,  $a$  — межатомное расстояние,  $F$  — химический потенциал. Энергия  $V_c^+$  понижает энергию как акцепторов, так и доноров дислокационного происхождения:

$$E_a = E_0 - V_c^+, \quad E_d = E_0 - V_c^+. \quad (3a)$$

Напоминаем, что, согласно [1], эксперименты [3,4] дают для  $E_a$  и  $E_d$  в нейтральном приближении близкие значения  $E_a - E_d = E_0$ .

Энергия  $V_c^-$  возникает в условиях отсутствия компенсации положительного и отрицательного зарядов на дислокации. Вводя эффективный коэффициент заполнения дислокации

$$\nu^- = \frac{C_a}{1 + \exp\left(\frac{E_a^- - F}{T}\right)} - \frac{C_d}{1 + \exp\left(\frac{F - E_d^-}{T}\right)}, \quad (4)$$

можно полагать, что

$$V_c^- = \frac{e^2 \nu^-}{\kappa a} \ln\left(\frac{r_d}{a} \nu^-\right), \quad r_d^2 = \frac{\kappa T}{4\pi e^2 n_p(T)}. \quad (5)$$

Дебаевская экранировка в (5) позволяет использовать  $V_c^-$  лишь в окрестности  $T_*$ .

В условиях  $V_c^- \neq 0$  энергии  $E_a$  и  $E_d$  не равны друг другу, даже если в нейтральной модели они совпадали. В самом деле, если, например, дислокация заряжена в целом положительно, то она притягивает электроны (понижает энергию  $E_a$ ) и отталкивает дырки (повышает энергию  $E_d$ ). В результате мы должны полагать, что

$$E_a^- = E_0 - V_c^- + \Delta, \quad E_d^- = E_0 - V_c^- - \Delta. \quad (6)$$

Очевидно, что роль  $V_c^-$  возрастает при удалении от точки  $T = T_*$ . Что касается  $V_c^+$ , то ее наличие в наибольшей мере проявляется в окрестности  $T = T_*$ . Для общности в определение  $E_a^-$ ,  $E_d^-$  (6) добавлена  $\Delta \neq 0$  из (1).

Положение химического потенциала  $F^\pm$  определяется уравнением локальной нейтральности

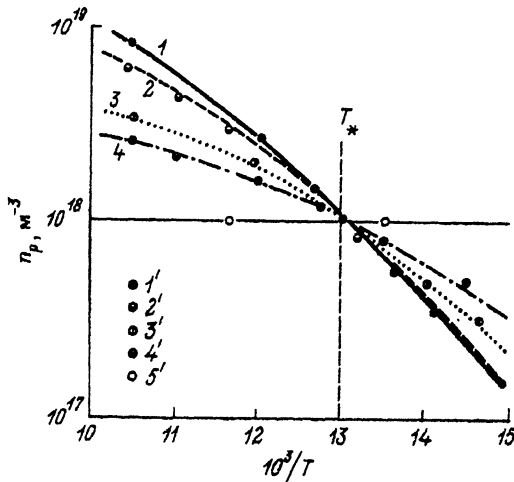


Рис. 3. Поведение  $n_p(T)$  при наличии  $\Delta \neq 0$  и кулоновского взаимодействия между электронами, осевшими на дислокации.

1—4 — решение уравнений (4)—(8) для экспериментальных значений  $N_{ch} \text{ м}^{-2}$ : 1 —  $3.5 \cdot 10^{11}$ , 2 —  $2 \cdot 10^{11}$ , 3 —  $7 \cdot 10^{10}$ , 4 —  $4.5 \cdot 10^{10}$ ; 1'—4' — экспериментальные значения  $n_p$ ; 5' — контрольный образец без дислокаций. Параметры теории:  $E_0 = 0.0813$  эВ,  $C_a = 0.106$ ,  $C_d = 1$ ,  $(\Delta/E_0) = 0.1624$ .

$$N_v(T) e^{-F^\pm/T} + \frac{N_d C_d / a}{1 + \exp\left[\frac{E_d^\pm - F^\pm}{T}\right]} = \frac{N_d C_a / a}{1 + \exp\left[\frac{E_a^\pm - F^\pm}{T}\right]} + n_a^0, \quad (7)$$

что имеет смысл лишь в окрестности  $T \sim T_*$ . Здесь  $n_a^0$  — плотность точечных акцепторов,  $N_v(T)$  — плотность состояний в валентной зоне, плотность свободных дырок  $n_p(T)$  связана с  $F^\pm$  соотношением

$$n_p(T) = N_v(T) \exp(-F^\pm/T). \quad (8)$$

Решение (7), (8) совместно с (1) в условиях  $V_c^\pm = 0$  приводит к результатам рис. 2. Комментарии к ним собраны в разделе А. Введение в расчет энергии  $V_c^\pm$  [т. е. система (7), (8) вместе с (3), (3а)] приводит к незначительной перенормировке  $E_0$  и практически не влияет на веер  $n_p(T)$  (порядка 10%).

Наконец, поведение  $n_p(T)$  при наличии  $V_c^-$  (4)—(6) представлено на рис. 3 вместе с экспериментальными точками [4], отвечающими разным плотностям дислокаций. Оптимальный набор параметров, использованный для этого, выглядит так:  $E_0 = 0.081$  эВ,  $C_a = 0.1$ ,  $\Delta = 0.16 E_0$ .

Таким образом, можно сделать следующие выводы.

Наблюдаемые свойства  $n_p(T)$  и [2—4], включая зависимость от  $N_d$ , можно объяснить в предложенной нами модели, полагая, что  $\Delta \neq 0$ , и учитывая кулоновские эффекты, сопровождающие заполнения дислокаций электронами.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Шикина Ю. В., Шикин В. Б. // ФТП. 1992. Т. 26. В. 6. С. 992—995.
- [2] Schröter W. // Phys. St. Sol. 1967. V. 21. P. 211—224.
- [3] Осипьян Ю. А., Шевченко С. А. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 698—704.
- [4] Kolubakin A. I., Shevchenko S. A. // Phys. St. Sol. 1981. V. 63A. P. 677—685.

Институт физики твердого тела РАН  
Черноголовка

Получена 2.10.1991  
Принята к печати 26.11.1991