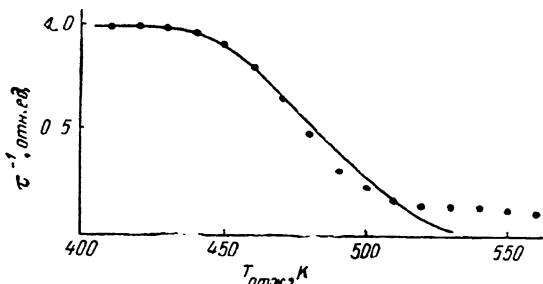


материала КЭФ-1 представлены на рисунке. Аналогичные зависимости будут наблюдаться для кремния с другим содержанием легирующей примеси.

Для проверки изложенной модели был проведен отжиг образцов кремния КЭФ-1, содержащих РО. Образцы облучались нейтронами реактора при температуре, близкой к комнатной. Доза быстрых нейтронов составляла $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Концентрация электронов в зоне проводимости после облучения изменилась незначи-



Изменения τ^{-1} при изохронном отжиге после нейтронного облучения.

Материал КЭФ-1. Сплошная кривая — расчет, точки — эксперимент.

тельно (измерения по эффекту Холла). Величина τ измерялась по сигналу стационарной фотопроводимости при возбуждении в собственной полосе. Как видно из рисунка, в области $T_{отж}$ до $\sim 520 \text{ K}$ экспериментальные и расчетные данные находятся в удовлетворительном согласии. Расхождение при более высоких температурах отжига обусловлено наличием в облученных образцах других радиационных дефектов (кроме дивакансий), не учтенных в расчете.

Л и т е р а т у р а

- [1] Вопросы радиационной технологии полупроводников / Под ред. Л. С. Смирнова. Новосибирск, 1980. 294 с.
- [2] Cheng L. J., Lori J. — Phys. Rev., 1968, v. 171, N 3, p. 856—862.
- [3] Newman R. C., Totterdell D. H. J. — J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1975, v. 8, N 12, p. 3944—3954.
- [4] Михнович В. В. — ФТП, 1984, т. 18, в. 9, с. 1670—1673.
- [5] Kimerling L. C. — In: Rad. Eff. Semicond. Conf. Ser. N 31. London—Bristol, 1977, p. 221—230.
- [6] Кожевников В. П., Михнович В. В. — ЖТФ, 1981, т. 51, в. 1, с. 153—156.
- [7] Кожевников В. П., Михнович В. В. — ЖТФ, 1983, т. 53, в. 7, с. 1361—1367.
- [8] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М., 1977. 672 с.

Институт физики полупроводников
СО АН СССР
Новосибирск

Получено 15.10.1986
Принято к печати 14.01.1988

ФТП, том 22, вып. 6, 1988

БЕЗЫНЕРЦИОННАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ВАЛЕНТНОГО ПОЛУПРОВОДНИКА ЛОКАЛИЗОВАННЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ВОЗБУЖДЕНИЕМ

Бутько В. Г., Гусев А. А.

Квазимолекулярная модель валентных полупроводников [1], в которой основными структурными элементами являются двухэлектронные валентные связи (квазимолекулы) между ближайшими атомами, позволяет изучать как основное, так и возбужденные состояния кристалла. Если для основного состояния расчетные характеристики хорошо согласуются с экспериментом [2], то для дырочных зон [3], и в особенности для возбужденных состояний типа экситонов Френкеля, количественные характеристики не могут считаться удовлетворительными [4]. Это связано с узостью базисного набора функций и с большой степенью локализации возбужденных состояний, построенных с его по-

мощью. Учет же релаксации электронной подсистемы при этом позволил бы в значительной степени разрешить указанную проблему.

В настоящей работе предпринята попытка неэмпирического расчета эффектов поляризации валентного полупроводника локализованным двухэлектронным возбуждением.

В работе [4] построены возбужденные состояния типа экситонов Френкеля, где в качестве базиса использовались функции вида

$$\Phi_{ns}^f = \text{A. c. } \Psi_{ns}^f(r_{n1}^n, r_{n2}^n) \prod_{n's'} \Psi_{n's'}^0(r_{s'1}^{n'}, r_{s'2}^{n'}); \quad (1)$$

здесь n — номер ячейки, s — номер связи в ячейке, Φ_{ns}^f — многоэлектронная волновая функция кристалла, Ψ_{ns}^f — возбужденная геминаль, построенная, как в [4], на том же базисе локализованных одноэлектронных функций (sp^3 -гибридов), что и геминаль основного состояния Ψ_{ns}^0 .

Отклик кристалла на возмущение, вносимое Φ_{ns}^f , будем рассматривать как поляризацию валентных связей. При этом волновые функции окружения выбираются в виде суперпозиции основного и возбужденных состояний

$$\Psi_{n's'} = c_{n's'}^0 \Psi_{n's'}^0 + \sum_{i=1}^{\infty} c_{n's'}^i \Psi_{n's'}^i, \quad (2)$$

причем поправка первого порядка к волновой функции и поляризуемость ищутся на основе вариационной теории возмущений для отдельной связи [5, 6]. Подставляя (2) в формулу для энергии возбужденного кристалла

$$E = \int \Phi_{ns}^f \hat{H} \Phi_{ns}^f d\tau - \int \Phi_{ns}^0 \hat{H} \Phi_{ns}^0 d\tau \quad (3)$$

(где \hat{H} — гамильтониан кристалла [2], Φ_{ns}^0 получается из Φ_{ns}^f , если Ψ_{ns}^f заменить на Ψ_{ns}^0), получим энергию поляризации как квадратичную функцию $c_{n's'}^i$. Введем средние дипольные моменты окружающих связей $P_{s'}^{n'}$ и квадрупольный момент возбужденной связи $Q_{s'\alpha\beta}^n$ по формулам

$$P_{s'\alpha}^{n'} = -4 \sum_i c_{n's'}^i \int \Psi_{n's'}^0 r_{\alpha} \Psi_{n's'}^i d\tau, \quad (4)$$

$$Q_{s'\alpha\beta}^n = -2 \int (|\Psi_{ns}^f|^2 - |\Psi_{ns}^0|^2) (3r_{\alpha} r_{\beta} - r^2 \delta_{\alpha\beta}) d\tau \equiv ea^2 Q_0 (l_{s\alpha} l_{s\beta} - \delta_{\alpha\beta}).$$

Здесь $l_{s\alpha}$ — векторы с единичными компонентами, дающие направление связи [7], a — постоянная решетки. Воспользуемся для минимизации среднего гамильтониана методикой работ [8, 9], позволяющей выразить коэффициенты $c_{n's'}^i$ через средние дипольные моменты $P_{s'}^{n'}$. Тогда для энергии поляризации получим следующее выражение:

$$U = -\frac{e}{2Na} \sum_{k s s' \alpha \beta} E_{s\alpha}(-\mathbf{k}) C_{s s' \alpha \beta}^{-1}(\mathbf{k}) E_{s'\beta}(\mathbf{k}), \quad (5)$$

где $C_{s s' \alpha \beta}^{-1}(\mathbf{k})$ — динамическая матрица, полученная в [7], играющая роль обратной поляризуемости кристалла, параметры которой вычислены в [6], $E_{s'\alpha}(\mathbf{k})$ — фурье-компонента поля, создаваемого возбужденной связью:

$$E_{s'\alpha}(\mathbf{k}) = -i \left[Q_0 \sum_{\beta \gamma} (l_{s'\gamma} l_{s'\beta} - \delta_{\gamma\beta}) \gamma_{\alpha\beta\gamma}^{s's'} + (D_1 l_{s'\alpha} + D_2 l_{s\alpha}) \sin \frac{\mathbf{k}}{4} (l_{s'} - l_s) \right]. \quad (6)$$

Здесь $\gamma_{\alpha\beta\gamma}^{s's'}$ — преобразованная по Эвальду третья производная от кулоновского потенциала, а безразмерные константы D_1 и D_2 , учитывающие отличие во взаимодействии ближайших соседей от мультипольного, могут быть вычислены с помощью функций (2), так же как в [6].

Конкретные расчеты были проведены для Si, где оказалось, что $Q_0 = -0.151$, $D_1 = -0.935$, $D_2 = 1.24$. Интегрирование по зоне Бриллюэна в (5) производилось по методу специальных точек [10]. Энергия поляризации получилась равной

$U = -0.217$ а. е., что понижает полную энергию кристалла E до 0.298 а. е. Но поскольку последняя величина представляет собой диагональный матричный элемент в расчетах экситонных состояний [4], то с учетом расщепления в зону это дает для дисперсионной частоты значение ~ 0.194 а. е., что близко к положению второго пика на кривой поглощения [11].

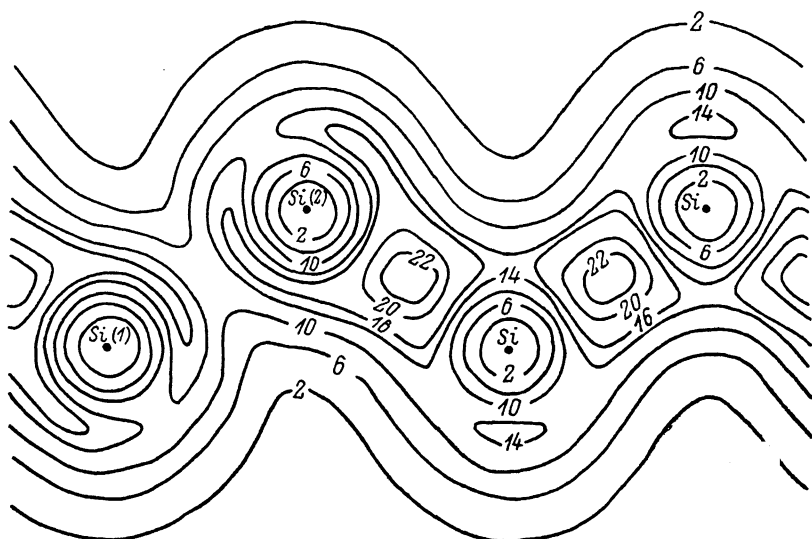


Рис. 1. Распределение плотности валентного заряда в плоскости $(1, 1, 0)$. Значения плотности приведены в ед. e/Ω ; $\Omega = 2a^3$ — объем элементарной ячейки.

Кроме того, по формуле

$$P_{s\alpha}^n = \sum_{k s' \beta} C_{s s', \alpha \beta}^{-1}(k) E_{s' \beta}(k) e^{i k r_s^n} \quad (7)$$

были вычислены наведенные дипольные моменты для 90 ближайших к возбуждению связей, что позволило построить карты распределения соответствующей

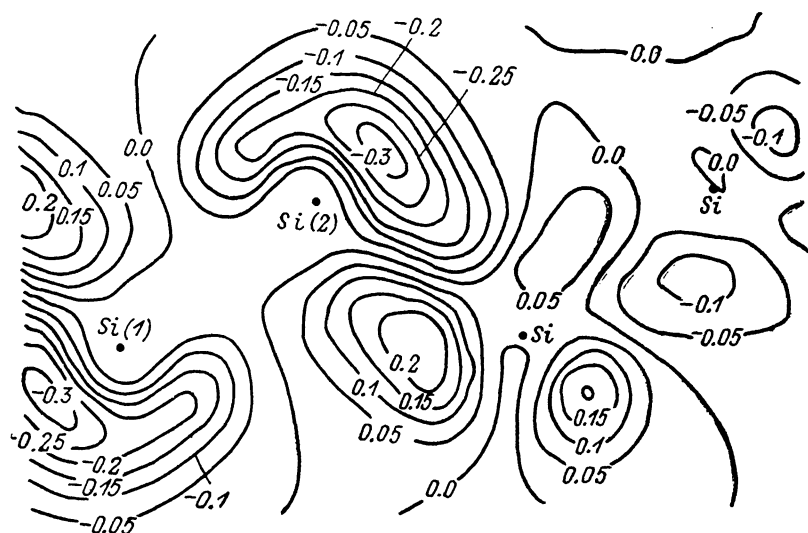


Рис. 2. Распределение индуцированной плотности в плоскости $(1, 1, 0)$ (в ед. e/Ω).

щей электронной плотности. Полная плотность валентного заряда для возбужденного состояния кристалла приведена на рис. 1. Распределение только индуцированной возбужденной геминально электронной плотности построено на рис. 2 [на обоих рисунках возбуждена геминаль между атомами Si (1) и Si (2)].

Изменение электронной плотности за счет поляризации составляет $\sim 2\%$, что оправдывает использование теории возмущений.

Таким образом, удалось провести последовательный неэмпирический расчет эффектов поляризации, оказавшихся в данном случае существенными. Разработанный в работе подход может оказаться полезным для первопринципных расчетов энергетических зон, диэлектрических свойств, динамики решетки этих кристаллов.

Авторы благодарят К. Б. Толпыго за полезное обсуждение работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Толпыго К. Б. — ФТТ, 1975, т. 17, в. 6, с. 1769—1778.
- [2] Резник И. М. — ФТТ, 1977, т. 19, в. 2, с. 463—468.
- [3] Резник И. М., Толпыго К. Б. — ФТТ, 1979, т. 21, в. 5, с. 968—972.
- [4] Толпыго К. Б., Шаталов В. М. — УФЖ, 1975, т. 20, в. 9, с. 1476—1483.
- [5] Dalgarno A., Lewis J. T. — Proc. Roy. Soc. A, 1955, v. 233, N 1192, p. 70—74.
- [6] Гусев А. А. — ФТП, 1987, т. 21, в. 7, с. 1332—1334.
- [7] Бутько В. Г., Гусев А. А. — ФТТ, 1982, т. 24, в. 8, с. 2242—2248.
- [8] Толпыго К. Б. — УФЖ, 1957, т. 2, в. 3, с. 242—260.
- [9] Толпыго К. Б. — ФТТ, 1961, т. 2, в. 10, с. 2655—2665.
- [10] Chadi D. J., Cohen M. L. — Phys. Rev. B, 1973, v. 8, N 12, p. 5747—5753.
- [11] Philipp H. R., Ehrenreich H. — Phys. Rev., 1963, v. 129, N 4, p. 1550—1560.

Донецкий физико-технический
институт АН УССР

Получено 4.05.1987
Принято к печати 14.01.1988

ФТП, том 22, вып. 6, 1988

ПОЛЕВОЙ ТРАНЗИСТОР СО СТРУКТУРОЙ МТДП НА ОСНОВЕ $Cd_xHg_{1-x}Te$

Салмин Е. А., Пономаренко В. П., Стафеев В. И.

Твердые растворы теллуридов кадмия—ртути широко используются для создания фотоприемников ИК диапазона. Однако имеется всего лишь несколько сообщений о создании активных элементов на этом материале. Сообщается о создании полевых [1—5] и биполярных [6, 7] транзисторов, в которых $p-n$ -переходы образовывались методами ионной имплантации в $Cd_xHg_{1-x}Te$ p -типа проводимости.

В настоящей работе сообщаются результаты исследования свойств диодов Шоттки с прослойкой туннельно-прозрачного диэлектрика (МТДП диоды) и полевых транзисторов с МТДП диодами в качестве стока и истока.

Для изготовления МТДП диодов и транзисторов был использован $p-Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x=0.32$) с концентрацией дырок $8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и подвижностью $400 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ (77 К). Слой туннельно-прозрачного диэлектрика создавался напылением Al_2O_3 толщиной 3—5 нм. В качестве контактного металла использовался хром.

В транзисторах подзатворный и «периферийный» слои диэлектриков также создавались напылением Al_2O_3 толщиной 0.1 мкм. Вне затвора наносилось дополнительное защитное покрытие из SiO_2 толщиной 0.2 мкм.

Поперечное сечение МТДП транзистора показано на вставке к рис. 1. Длина канала $L=60$ мкм, ширина $Z=280$ мкм, площади стока и истока $S=2.3 \times 10^{-4} \text{ см}^2$. Для обеспечения эффективной модуляции проводимости канала затвор частично перекрывает области стока и истока.

МТДП диоды при 85 К и нулевом смещении имели сопротивление $R_0 \approx 1 \text{ МОм}$, в пропускном направлении это сопротивление 150—200 Ом, в обратном направлении ток насыщения менее 0.1 мкА. Вольтамперная характеристика