

- [1] *Smith S. D.* Appl. Optics, 1986, v. 25, N 10, p. 1550—1564.
 [2] *Jäger D., Forsmann F., Wedding B.* IEEE J. Quant. Electr., 1985, v. QE-21, N 9, p. 1453—1457.
 [3] *Голук Л. Л., Григорьянц А. В., Елинсон М. И., Балкарей Ю. И.* Квант. электр., 1981, т. 8, № 9, с. 2058—2061.
 [4] *Orenstein M., Speiser S., Katriel J.* IEEE J. Quant. Electr., 1985, v. QE-21, N 9, p. 1513—1522.
 [5] *Satchell J. S., Parriger C., Sandle W. J.* Optics Comm., 1983, v. 45, N 3, p. 230—235.
 [6] *Великович А. Л., Голубев Г. П., Кауфман И. Х., Лучинский Д. Г.* Письма в ЖТФ, 1987, т. 13, № 3, с. 161—166.
 [7] *Голубев Г. П., Кауфман И. Х., Лучинский Д. Г.* Опт. и спектр., 1987, т. 62, № 4, с. 721—724.
 [8] *Великович А. Л., Голубев Г. П., Лучинский Д. Г.* Письма в ЖТФ, 1986, т. 12, № 14, с. 879—885.
 [9] *Mackenzie M. A., Reid J. J., Al-Attar H. A., Abraham E.* Optics Comm., 1986, v. 60, N 3, p. 181—186.

Всесоюзный научно-исследовательский
 институт метрологической службы
 Москва

Поступило в Редакцию
 25 июня 1987 г.

УДК 537.311.33

Журнал технической физики, т. 58, в. 9, 1988

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ДИФФУЗИЯ ПРИМЕСЕЙ ПО ДИСЛОКАЦИЯМ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

М. И. Молоцкий

1. Диффузия примесей по дислокациям может существенно превышать объемную даже при сравнительно низкой плотности дислокаций [1]. Поэтому изучение механизмов дислокационной диффузии и поиски возможных путей управления ею представляют интерес для создания методов контролируемого легирования полупроводников. Существующие теории диффузии примесей по дислокациям (см., например, [1, 2] и приведенные там ссылки) не учитывают изменения электронной структуры примесей при переходе из объема кристалла на дислокацию, хотя, как показывают расчеты [3], такое изменение может быть очень сильным. Поскольку радиус ускоренной диффузии на дислокациях в полупроводниках (десятки ангстрем) близок к радиусу связанного состояния кулоновского центра, то дислокации должны оказывать заметное влияние на электронную структуру диффундирующих частиц. В настоящей работе изучена роль этого влияния на диффузию примесей.

В существующих теориях диффузии по дислокациям роль дислокации сводится к образованию области с повышенной концентрацией вакансий. Вакансии ускоряют диффузию примесей замещения. Такое влияние дислокаций является косвенным. Мы рассмотрим другой случай, когда роль дислокаций проявляется в прямом влиянии на электронную структуру примесей. Это возможно, например, при диффузии междоузельных атомов. Такие атомы притягиваются к области недостающей полуплоскости, в которой плотность вакансий меньше, чем в объеме. Поэтому ускорение диффузии по вакансионному механизму невозможно. Ускорение диффузии может быть обусловлено уменьшением ее энергии активации при растяжении решетки.

В дальнейшем мы будем рассматривать диффузию атомов щелочных металлов, которые создают только мелкие донорные уровни в объеме ковалентных полупроводников. При комнатной температуре примеси в объеме полностью ионизованы, и поэтому они диффундируют в виде ионов. На линии дислокации энергия связи электрона с кулоновским центром резко возрастает [3]. Примесный центр на дислокации может находиться в трех зарядовых состояниях: нейтральном, положительном и отрицательном. В полупроводниках *n*-типа, в которых линия дислокации имеет избыточный отрицательный заряд, отрицательный ион сильно отталкивается от дислокации, и поэтому плотность таких ионов в области ускоренной диффузии невелика. Положительные ионы образуют прочную донорно-акцепторную связь с оборванными орбиталями ядра дислокации, захватившими дополнительный электрон, и не участвуют в ми-

рации. Поэтому следует ожидать, что заряженные формы примеси не вносят заметного вклада в дислокационную диффузию и в отличие от диффузии в объеме диффузия щелочных атомов вдоль дислокаций будет осуществляться в виде нейтральных атомов. К тому же известно [4], что локализация электронов на междоузельных ионах приводит к дополнительному уменьшению энергии активации диффузии.

2. Для определения вероятности нейтрального состояния примеси на дислокации необходимо знать положение одно- и двухэлектронных уровней. Двухэлектронные состояния примесей на дислокации ранее не изучались. Рассмотрим такие состояния. Короткодействующий потенциал ядра дислокации, спадающий на расстояниях порядка величины вектора Бюргерса b , будем аппроксимировать выражением

$$V(\rho) = -V_0 \exp\left(-\frac{\rho}{b}\right). \quad (1)$$

Если поперечное движение электрона в поле (1) описывать функцией

$$\Psi(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha_d \exp(-\alpha_d \rho), \quad (2)$$

то минимизация функционала полной энергии позволяет установить связь параметров V_0 и α_d с экспериментальным значением глубины ловушки E_d на дислокации

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{8m_e b^2} \left[1 + 2 \left(\frac{m_e b^2 E_d}{\hbar^2} \right)^{1/3} \right]^3, \quad \alpha_d = \left(\frac{m_e E_d}{b \hbar^2} \right)^{1/3},$$

Зависимость относительного коэффициента дислокационной диффузии в кремнии от положения уровня Ферми при $T=300$ (1) и 1000 К (2).

m_e — эффективная масса электрона. В кремнии $b=3.84 \text{ \AA}$, $m_e=0.26 m_0$ при $E_d=0.52 \text{ эВ}$ [5] получаем $V_0=2.94 \text{ эВ}$ и $\alpha_d=1.666 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$.

Волновая функция основного состояния одномерного атома водорода падает экспоненциально [6]. Поэтому полагая, что поперечное движение электрона по-прежнему описывается функцией типа (2), пробную вариационную функцию основного состояния кулоновского центра на дислокации выберем в виде

$$\Phi(\rho, z) = \sqrt{2\delta/\pi} \alpha \exp(-\alpha\rho - \delta|z|).$$

Энергия состояния определяется минимумом функционала

$$J[\Phi] = \frac{\hbar^2}{2m_e} \int |\text{grad } \Phi|^2 d\mathbf{r} + \int V(\rho) \Phi^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{e_0^2}{z} \int \frac{\Phi^2(\mathbf{r})}{r} d\mathbf{r}, \quad (3)$$

где κ — диэлектрическая проницаемость кристалла. В кремнии $\kappa=12$, минимум функционала (3) $J=-0.64 \text{ эВ}$ достигается при $\alpha=1.76 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$ и $\delta=5.063 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$.

Кулоновские центры в объеме полупроводника не способны захватить второй электрон при комнатной температуре, так как сродство к электрону исчезающе мало ($\sim 1 \text{ мэВ}$) [7]. Поле ядра дислокации (1) стабилизирует двухэлектронные центры. Основное синглетное состояние такого центра определяется минимумом функционала, включающего два функционала (3) и энергию кулоновского отталкивания локализованных электронов

$$K_{12}[\Phi] = \frac{e_0^2}{z} \iint \frac{\Phi^2(\mathbf{r}_1) \Phi^2(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2.$$

Расчет двухэлектронного состояния энергии дает $J_{12}=-1.19 \text{ эВ}$ при $\alpha=1.723 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$ и $\delta=4.014 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$. Учитывая энергию связи одного электрона (0.64 эВ), видим, что энергия связи второго электрона равна 0.55 эВ , т. е. соответствующий двухэлектронный уровень расположен на 0.03 эВ ниже дна дислокационной зоны.

3. При низких температурах примесь на дислокации нейтральна, если уровень Ферми ϵ_f расположен между уровнями ϵ_1 и ϵ_2 одно- и двухэлектронных состояний. В кремнии допустимые значения ϵ_f образуют узкую зону, расположенную на глубине $0.55-0.64 \text{ эВ}$ под дном зоны проводимости. С ростом температуры зона размывается. При произвольной температуре вероятность нейтрального состояния примеси равна

$$\eta_0 = \left\{ 1 + 2 \exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon}{2kT}\right) \operatorname{ch} \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_f}{kT} \right\}^{-1},$$

где $\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ и $\varepsilon_0 = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$.

Если пренебречь вкладом заряженных форм примеси в дислокационную диффузию, то эффективный коэффициент диффузии будет равен $D_{ef} = D_0 \eta_0$, где D_0 — коэффициент дислокационной диффузии нейтрального атома. Значения D_{ef} сильно зависят от положения уровня Ферми. Как видно из рисунка, даже при высоких температурах смещение уровня Ферми на несколько десятых электронвольта способно изменить порядок величины D_{ef} . Поэтому диффузией примесей по дислокациям можно управлять путем контролируемого изменения положения ε_f при введении примесей, облучения кристалла светом, наложения электрического поля и т. п.

Автор благодарен М. В. Гольдфарбу за помощь при проведении численных расчетов на ЭВМ.

Литература

- [1] Болтакс Б. И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. Л.: Наука, 1972. 384 с.
- [2] Le Claire A. D., Rabinovith A. J. Phys. C: Solid State Phys., 1981, v. 14, N 27, p. 3863—3879.
- [3] Молоцкий М. И., Малюгин В. Б. ЖТФ, 1985, т. 55, № 11, с. 2275—2277.
- [4] Винецкий В. Л., Холодарь Г. А. Радиационная физика полупроводников. Киев: Наукова думка, 1979, с. 210.
- [5] Ossipyan Yu. A. Crystal Res. and Technol., 1981, v. 16, N 2, p. 239—246.
- [6] Loudon R. Am. J. Phys., 1959, v. 27, N 9, p. 649—655.
- [7] Стоунгэм А. М. Теория дефектов в твердых телах. М.: Мир, 1978, т. 2. 358 с.

Воронежский государственный университет
им. Ленинского комсомола

Поступило в Редакцию
26 июня 1987 г.

К ВОПРОСУ О РАСЧЕТЕ ПОЛОЖЕНИЯ ВЕРШИН ОБЩИХ ЗОН СТАБИЛЬНОСТИ ДЛЯ ГИПЕРБОЛОИДНЫХ МАСС-АНАЛИЗАТОРОВ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ПИТАНИИ

Э. П. Шертов, А. П. Борисовский, В. И. Банин

Гиперболоидные масс-спектрометры в настоящее время получили широкое распространение в самых разнообразных областях науки и техники [1, 2]. Недавно на базе гиперболоидного масс-спектрометра типа трехмерной ловушки был создан инструмент для космических исследований при реализации проекта «Вега» [3]. Широкое распространение сейчас получает метод импульсного питания анализаторов таких приборов [4, 5], что связано с возможностью при его использовании существенно снизить потребляемую мощность и улучшить массогабаритные показатели приборов.

В настоящей работе показана возможность получения простых соотношений, определяющих конфигурацию границ общих зон стабильности для всех известных гиперболоидных масс-анализаторов при импульсном питании. В линейном случае задача определения траектории заряженной частицы в гиперболоидном масс-спектрометре сводится к решению трех независимых уравнений Хилла. Можно показать, что при импульсном питающем напряжении прямоугольной формы уравнения преобразования проекций координаты и скорости на избранную ось после воздействия n -го периода высокочастотного поля могут быть записаны в следующем виде:

$$\begin{aligned} y(n+1) &= y(n) \psi_1(\Delta) + \dot{y}(n) \psi_2(\Delta), \\ \dot{y}(n+1) &= y(n) \psi_3(\Delta) + \dot{y}(n) \psi_4(\Delta), \end{aligned} \quad (1)$$

где $y(n)$ и $\dot{y}(n)$ — координата и составляющая скорости частицы до «воздействия» n -го импульса, $y(n+1)$ и $\dot{y}(n+1)$ — соответствующие величины после «воздействия», Δ — фаза определения $y(n)$ и $y(n+1)$. Для $\psi_j(\Delta)$ имеют место два фундаментальных соотношения