

©1994 г.

ИНВЕРСИЯ ТИПА ПРОВОДИМОСТИ В ПЛАСТИЧЕСКИ ДЕФОРМИРОВАННЫХ *n*-ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Ю.В.Шикина, В.Б.Шикин

Институт физики твердого тела Российской академии наук, 142432, Черноголовка, Россия
(Получена 21 января 1993 г. Принята к печати 15 ноября 1993 г.)

Обсуждается явление инверсии типа проводимости пластически деформированного *n*-полупроводника. Показано, что если емкость C_1 нижнего дислокационного уровня E_1 достаточно мала, то зависимость химического потенциала от плотности дислокаций имеет характерный скачок, положение которого зависит от величины C_1 . Эксперимент подтверждает предсказания теории.

Хорошо известно, что дислокации с краевой компонентой, введенные в Ge и Si, обладают акцепторными свойствами. Поэтому монотонное увеличение плотности дислокаций в *n*-полупроводнике должно приводить к инверсии типа проводимости, как это имеет место при варьировании в *n*-полупроводнике плотности точечных акцепторов [1]. Однако детали такого перехода как функции относительной плотности акцепторов n_a^0/n_d существенно различны при решении задач о точечных дефектах и дислокациях. Здесь n_a^0 и n_d соответственно плотности точечных акцепторов и доноров. Некоторые качественно интересные фрагменты этих различий обсуждаются в данной работе. Полученные результаты имеют отношение к экспериментам [2,3]. Вопрос о структуре инверсионного перехода интересен также с точки зрения апробации феноменологической модели дислокационных уровней, хорошо зарекомендовавшей себя при описании пластически деформированных полупроводников *p*-типа проводимости [4,5].

Конкретная информация связана с описанием поведения уровня Ферми в пластически деформированных полупроводниках как функции плотности дислокаций N_d при достаточно низких температурах. Соответствующее поведение химического потенциала F в образцах с точечными примесями полагается известным [1]. Грубо говоря (если задача симметрична по отношению к электронам и дыркам), зависимость $F(n_a^0/n_d)$ имеет вид ступеньки с центром в точке $n_a^0 = n_d$ и ши-

риной Δ порядка

$$\Delta \simeq T/E_g, \quad (1)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны.

Описание свойств химического потенциала F в пластически деформированном полупроводнике n -типа проводимости естественно начать с области малых плотностей дислокаций N_d , когда

$$\pi R^2 \leq N_d^{-1}. \quad (2)$$

Здесь R — так называемый радиус ридовского цилиндра вокруг отдельной заряженной дислокации. В геометрическом приближении $R \gg r_d$, где r_d — дебаевский радиус экранирования, отвечающий плотности n_d точечных доноров. Ридовский радиус определяет длину, на которой экранируется поле заряженной дислокации.

В условиях (2) эффективное уравнение нейтральности, определяющее, как обычно, поведение химического потенциала, должно быть записано следующим образом:

$$N_e \exp(F/T)(1 - V^*/V) + N_d f/a = n_d, \quad N_e = \frac{2}{\hbar^3} \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2}. \quad (3)$$

Здесь V, V^* — соответственно полный объем кристалла и объем, приходящийся на ридовские цилиндры, m_e — эффективная масса электрона, a — межатомное расстояние. В первом слагаемом левой части (3) учтено вытеснение электронов из ридовских цилиндров, второе слагаемое определяет вклад в плотность отрицательных зарядов от заряженных дислокаций, каждая из которых имеет коэффициент заполнения f . В правой части (3) мы имеем плотность доноров, которые полагаются ионизованными.

Учитывая связь между f и V^*/V

$$\frac{V^*}{V} = \frac{N_d f}{a n_d}, \quad (4)$$

нетрудно видеть, что определение F согласно (3) сводится к его определению в отсутствие дислокаций [1]

$$N_e \exp(F/T) = n_d. \quad (3a)$$

Другими словами, дислокации не влияют на поведение F , пока $R^2 < N_d^{-1}$.

Таким образом, если рассматривать зависимость химического потенциала от параметра n_a/n_d ($n_a = N_d/a$), то задача о дислокационной инверсии типа проводимости в области $n_a/n_d \simeq 1$ ничего особенного не содержит (в отличие от задачи с точечными центрами, где область $n_a^0/n_d \simeq 1$ является критической). В самом деле, неравенство (2) с учетом $\pi r^2 n_d = f/a$ может быть переписано как

$$\pi R^2 N_d = f(n_a/n_d) < 1, \quad n_a = N_d/a. \quad (5)$$

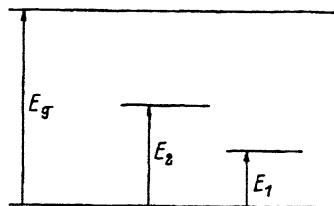


Рис. 1. Схема дислокационных уровней в кремнии.

Учитывая, что максимальное значение f для n -Ge и n -Si не превышает значения $f \simeq 10^{-1}$, нетрудно видеть, что в области $n_a/n_d \simeq 1$ исходный n -полупроводник остается таковым, поскольку неравенство (5) здесь еще не нарушено.

Рассмотрим область $R^2 N_d > 1$. В условиях, обратных (5), дислокации в состоянии собрать все электроны с доноров, и поэтому положение химического потенциала становится зависимым от плотности дислокаций. Этот эффект будет описан нами в цилиндрической модели, которая качественно правильно трактует основные зависимости, за исключением критического значения N_d^0 плотности дислокаций, начиная с которой вступает в силу приближение $R^2 N_d \geq 1$. Величина N_d^0 зависит от конкретного распределения дислокаций в образце и может варьироваться в определенных пределах в окрестности $\pi R^2 N_d \sim 1$.

В рамках простой цилиндрической модели коэффициент заполнения отдельной дислокации f , как и выше (см. (4)), связан с эффективным радиусом R , характеризующим теперь среднее расстояние между дислокациями, соотношением

$$\pi R^2 n_d = f/a, \quad (6)$$

В отсутствие свободных электронов и дырок, плотность которых мы полагаем экспоненциально малой, соотношение (6) является условием, обеспечивающим полную нейтральность кристалла.

Что касается положения химического потенциала F , то оно следует из определения величины f :

$$f = C_1 \left(\exp(E_1 + V_c - F)/T + 1 \right)^{-1} + C_2 \left(\exp(E_2 + V_c - F)/T + 1 \right)^{-1}, \quad (7)$$

$$V_c = \frac{\pi e^2}{k} n_d R^2 \left\{ 2 \ln(\pi R^3 n_d) - \left(1 - (\pi^2 R^6 n_d^2)^{-1} \right) \right\}. \quad (7a)$$

В выражении (7) учтена структура дислокационных уровней (E_1, E_2), полученная в результате обработки данных о поведении дислокаций в полупроводниках p -типа проводимости [4,5], схема этих уровней представлена на рис. 1. Кроме того, использованы достоинства цилиндрической модели. Очевидно, что эта модель приводит к достаточно простому виду для V_c (7a), содержащему все качественные детали процесса инверсии. Обрезающий фактор в V_c (7a) выбран равным $c = a/f$.

Критическое значение R_0 , начиная с которого определение (7) имеет смысл, возникает из требования, что при $R = R_0$ химический потенциал F должен занимать положение, характерное для полупроводника n -типа проводимости при $T = 0$ в отсутствие дислокаций, т.е.

$$F = E_g. \quad (8)$$

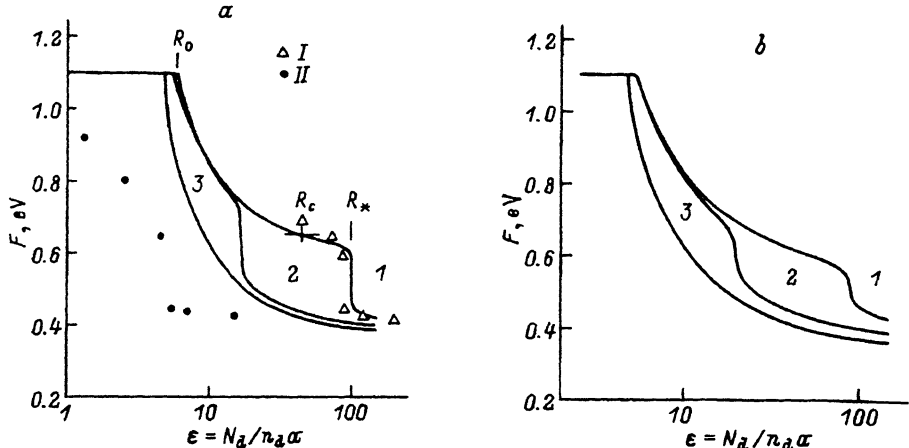


Рис. 2. Зависимость химического потенциала F от безразмерной плотности дислокаций $\varepsilon = N_d/n_d a$ при 300 К (а) и 200 К (б) для трех значений параметра C_1 : 1 — 0.01, 2 — 0.06, 3 — 0.2. а: для 1, 3 значения C_1 выбирались такими, чтобы расчетные положения скачков $F(\varepsilon)$ совпадали с данными [2] (I) и [3] (II), для 2 — взято промежуточное значение C_1 ; на 1 отмечено положение точек R_0 — (9), R_c — (10), R_* — (12).

В результате выражение для R_0 имеет вид

$$\pi R_0^2 n_d a = C_1 \exp \left\{ [E_1 + V_c(R_0) - E_g] / T + 1 \right\}^{-1} + C_2 \exp \left\{ [E_2 + V_c(R_0) - E_g] / T + 1 \right\}^{-1}. \quad (9)$$

Что касается общей связи между F и N_d в области $R < R_0$, то она следует из (6), (7), (7а). Поведение F в области $R < R_0$ для значений $E_1 = 0.42$ эВ, $E_2 = 0.67$ эВ, взятых из [2], $C_2 = 1$ и разных C_1 представлено на рис. 2, а, б. Некоторые детали этого рисунка заслуживают специального внимания. Во-первых, химический потенциал F начинает погружаться в глубь запрещенной зоны плавно, а не скачком, как это имеет место для точечных примесей. При этом пересечение в точке $R = R_c$ уровня

$$F = +0.5 E_g, \quad (10)$$

что формально отвечает инверсии типа проводимости, ничем не выделено (см. положение точки R_c на рис. 2, а, б). Во-вторых, примечателен ход уровня химического потенциала в нижней части запрещенной зоны. Возникающий здесь скачок ΔF имеет масштаб

$$\Delta F \simeq E_2 - E_1 \quad (11)$$

и положение R_* , следующее из оценки

$$\varepsilon_* C_1 \simeq 1, \quad \varepsilon_* \simeq (\pi R_*^2 n_d a)^{-1} \equiv N_d^* (n_d a)^{-1}. \quad (12)$$

Численное определение величины R_* с помощью (7), (7а) для разных значений C_1 подтверждает зависимость $R_*^{-2} \sim C_1$ (см. рис. 3) с коэффициентом пропорциональности в соответствии с (12). Таким образом, в

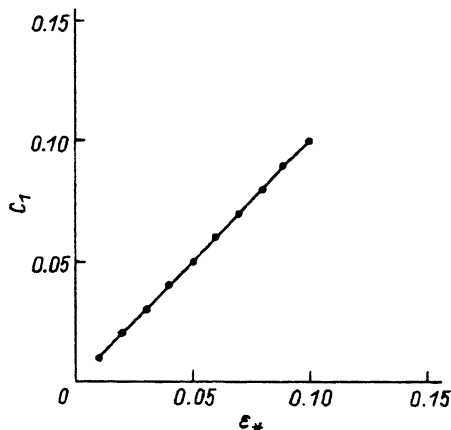


Рис. 3. Связь между C_1 и положением ϵ_* скачка $F(\epsilon)$, следующая из (6), (7). Количественно $C_1(\epsilon_*)$ соответствует расчету по (12).

модели двух уровней E_1, E_2 с ограниченной емкостью C_1 зависимость $F(\epsilon)$ при дислокационной инверсии проводимости содержит характерный скачок, положение которого зависит от величины C_1 .

Полученные выше результаты могут быть привлечены к анализу экспериментальных данных [2,3] о дислокационной инверсии проводимости в кремнии. В обеих работах исходный кремний, легированный в качестве доноров фосфором примерно с одной и той же концентрацией ($n_d \simeq 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ в [2] и $n_d \simeq 4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ в [3]), менял тип проводимости (что фиксировалось по изменению знака коэффициента Холла) при монотонном увеличении плотности дислокаций. В обеих работах наблюдался скачок химического потенциала при переходе через середину запрещенной зоны. Однако положения этого скачка ϵ_* на оси $\epsilon = N_d/n_a$ в работах [2] и [3] существенно различны, что хорошо видно из рис. 2,а. Отметим для дальнейшего, что в областях правее скачка, т.е. в областях $\epsilon > \epsilon_*$ данные [2] и [3] для $F(\epsilon)$ практически не обнаруживают дисперсии. Другими словами, в этих областях химический потенциал фиксируется примерно на одной высоте $E_1 \simeq 0.42 \text{ эВ}$ над валентной зоной.

Положение экспериментальных точек [3] относительной кривой \mathcal{F} на рис. 2,а указывает на неприменимость для их описания цилиндрической модели инверсионного перехода, развитой выше. В самом деле, согласно [3], химический потенциал начинает существенно зависеть от ϵ в области, где он должен сохранять свое значение, не зависящее от плотности дислокаций. Более того, как отмечалось авторами [3], нужно ставить под сомнение не только цилиндрическую модель инверсионного перехода, но и саму идею Рида о локализации дислокационных зарядов в узкой трубке радиуса $c = a/f \ll R$. С использованием модели Рида и данных [3] получаем, что кулоновская энергия в области $R > R_0$ превосходит ширину запрещенной зоны E_g , чего не может быть. Попытки найти выход из положения привели авторов [3] к необходимости рассмотрения альтернативной модели, в которой дислокационный заряд «размазан» практически внутри всего ридовского цилиндра [6].

Обратим, однако, внимание на одну экспериментальную деталь, мало чувствительную к модели, используемой при обработке экспери-

ментальных данных, и практически одинаковую для обеих серий экспериментов [2,3]. Как отмечено выше, дисперсия $F(\varepsilon)$ в области $\varepsilon > \varepsilon_*$ практически отсутствует. Такое поведение $F(\varepsilon)$ объясняется в цилиндрической модели инверсии типа проводимости в предельном случае $C_1 \ll 1$. Если C_1 находится в области $C_1 \simeq 0.2$, т.е. там, где расположен скачок F из [3], то здесь, согласно рис. 2,а, неизбежна сильная дисперсия $F(\varepsilon)$, чего не наблюдается экспериментально.

Таким образом, отсутствие заметной дисперсии $F(\varepsilon)$ в области $\varepsilon > \varepsilon_*$ для экспериментов [3] свидетельствует, с нашей точки зрения, о том, что реальное значение C_1 находится в области $C_1 \ll 1$. Другими словами, плотности дислокаций из [3], найденные по ямкам травления, несколько занижены по сравнению с реальными. Возможно, что в [2], напротив, плотности дислокаций завышены (здесь использовался метод электронного парамагнитного резонанса). Поэтому точное значение емкости C_1 , имеющее, согласно рис. 2,а, кривая 1, масштаб $C_1 = 0.01$, в последующих экспериментах может быть уточнено. Ясно лишь, что эта константа C_1 должна быть достаточно малой, $C_1 \ll 0.1$.

Резюмируя сказанное, отметим, что в работе предложена цилиндрическая модель дислокационной инверсии типа проводимости, основанная на ридовских представлениях о структуре заряженных дислокаций в полупроводниках. Модель позволяет объяснить все качественные детали поведения химического потенциала в процессе инверсии и приводит к заключению об ограниченной емкости C_1 нижнего уровня E_1 дислокационного спектра. Численное значение этого параметра, согласно [2] и рис. 2,а, оказывается равным $C_1 = 0.01$. Некоторые детали зависимости $F(\varepsilon)$ оказываются полезными для анализа противоречивых экспериментальных данных [2,3] в этой области.

Авторы благодарны Е.Якимову за обсуждение результатов работы.

Список литературы

- [1] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. М.: Наука (1977).
- [2] V. Grazhulis, Kveder V., V. Mukhiha. Phys. St. Sol. (a), **43**, 407 (1977).
- [3] В. Еременко, В. Никитенко, Е. Якимов, Н. Ярыкин. ФТП, **12**, 273 (1978).
- [4] Ю.В. Шикина, В.Б. Шикин. ФТП, **12**, 2225 (1991).
- [5] Ю.В. Шикина, В.Б. Шикин. ФТП, **26**, 927 (1992).
- [6] S. Koveshnikov, O. Feklisova, E. Yakimov, N. Yarykin. Phys. St. Sol. (a), **127**, 67 (1991).

Редактор Л.В. Шаронова