

©1995 г.

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ТЕРМИЧЕСКУЮ ЭНЕРГИЮ ИОНИЗАЦИИ ОСНОВНОЙ ПРИМЕСИ В КОМПЕНСИРОВАННОМ Ge:Ga

А.Г.Андреев*, В.В.Воронков*, Г.И.Воронкова*,
А.Г.Забродский, Е.А.Петрова*

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

*Государственный институт редких металлов, Москва
(Получена 13 июня 1995 г. Принята к печати 5 июля 1995 г.)

Экспериментально исследован вопрос о роли кулоновского взаимодействия в процессе термической ионизации основного состояния доминирующей примеси в компенсированном полупроводнике на примере серии образцов нейтронно-легированного Ge:Ga со степенью компенсации $K = 0.3$. Термическая энергия ионизации ϵ_1 определялась из экспоненциальных температурных зависимостей коэффициента Холла в области классического транспорта равновесных дырок, созданных термической ионизацией основного состояния Ga, по валентной зоне. Показано, что в области слабого легирования $N < 10^{15} \text{ см}^{-3} = 0.01N_c$ (N_c — критическая для перехода металл-изолятор концентрация Ga в Ge) изменение ϵ_1 с компенсацией и уровнем легирования описывается моделью Узакова-Эфроса. При этом известный эффект уменьшения ϵ_1 с ростом уровня легирования получает объяснение как результат релаксации зарядового состояния примесной зоны при каждом акте термической ионизации (электронный аналог принципа Франка-Кондона). При промежуточном легировании $0.01N_c < N < 0.1N_c$ работает модель Лиена-Шкловского, описывающая изменение $\epsilon_1(N, K)$ как результат различия в движении энергий уровня Ферми и уровня протекания.

1. Введение

Предметом настоящей работы является экспериментальное исследование вопроса о роли кулоновского взаимодействия в процессе термической ионизации основного состояния доминирующей примеси в компенсированном полупроводнике. Термическая энергия ионизации при этом определяется из анализа экспоненциальных температурных зависимостей коэффициента Холла в области классического транспорта по зоне проводимости (валентной), обусловленной термическими забросами в зону из основного состояния.¹

¹ Иногда термическую энергию ионизации выделяют из анализа экспоненциальных температурных зависимостей так называемой ϵ_1 -проводимости. В последнем случае следует, однако, учитывать влияние температурной зависимости подвижности.

Еще полвека тому назад Пирсон и Бардин установили [1], что термическая энергия ионизации примесей в полупроводниках уменьшается с ростом уровня легирования:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_1(0) - \Delta\varepsilon_1(N), \quad (1)$$

где $\varepsilon_1(0)$ — термическая энергия ионизации для $N \rightarrow 0$, а N — концентрация основной примеси.

Концентрационно зависимый член в (1) согласно Пирсону и Бардину [1] пропорционален характерной энергии $E_C = (e^2/\kappa)N^{1/3}$ кулоновского взаимодействия в зоне основных примесных состояний

$$\Delta\varepsilon_1 = fE_C = f(e^2/\kappa)N^{1/3}, \quad (2)$$

где коэффициент пропорциональности $f \cong 2.5$, κ — диэлектрическая проницаемость.

Идея объяснения формулы (2) у Пирсона и Бардина заключается в уменьшении энергии связи из-за притяжения основных носителей тока к ионам доминирующих примесей. Кастеллан и Зетц [2], Лебай и Конвелл [3] обратили внимание на то, что при низких температурах, когда электроны вымораживаются на примеси, в формуле (2) фактически следует использовать концентрацию компенсирующей примеси. Таким образом, при низких температурах входящая в формулу (2) величина f может зависеть от степени компенсации. Добавим от себя, что в широких температурных интервалах, где применимы как представление [1], так и [2,3] величина f , а с ней и $\Delta\varepsilon_1$, может зависеть также и от температуры.

В работах [4,5] был перечислен ряд факторов, влияющих на величину ε_1 . Это:

- а) приближение основного донорного состояния к зоне проводимости из-за экранирования свободными электронами;
- б) влияние поляризации нейтральных доноров на диэлектрическую постоянную и, таким образом, на энергию связи;
- в) наличие хвоста плотности состояний у края зоны проводимости или, как теперь следует сказать, понижение порога подвижности в зоне проводимости;
- г) уширение донорного уровня из-за перекрытия волновых функций, т.е. учет квантовых эффектов, связанных с перекрытием волновых функций;

д) размазывание уровня основного состояния из-за флуктуаций потенциала (классическое «кулоновское» уширение примесной зоны);

е) экранирование ионизованными примесями, подвижными при повышенных температурах;

ж) образование квазиконтинуума электронных состояний из-за перекрытия волновых функций возбужденных состояний (сводится к п. а).

Эти факторы были разделены Забродским и Тимофеевым в работе [6] на две основные группы: те, которые связаны с квантовым перекрытием состояний носителей на атомах основной примеси, и те, которые связаны с влиянием случайного кулоновского потенциала как на отдельные примесные состояния, так и на всю примесную зону в целом.

Эффекты квантового перекрытия основных состояний оказываются существенными лишь при концентрации N основной примеси, соизмеримой с ее значением N_c в точке перехода металл-изолятор (МИ) $N < N_c$. Однако в этой области, где величина $\Delta\varepsilon_1(N)$ в (1) составляет заметную часть от $\varepsilon_1(0)$ и как было показано в [7], уже практически невозможен достоверный анализ экспериментальных данных по температурной зависимости коэффициента Холла с целью извлечения величины энергии ионизации ε_1 . Причина заключается в необходимости конкретизации хода плотности состояний в примесной зоне и на краю зоны проводимости или валентной зоны. Поэтому нас будет интересовать лишь реально доступная для корректного анализа опытных данных область относительно невысоких концентраций основной примеси $N \ll N_c$, где $\Delta\varepsilon_1(N) \ll \varepsilon_1(0)$. В этом случае мы можем отвлечься от квантовых эффектов перекрытия и сосредоточиться лишь на влиянии случайного поля. Начнем с теоретической стороны проблемы.

2. Влияние случайного кулоновского поля на термическую энергию ионизации примесей в полупроводнике

В теории, на наш взгляд, наиболее последовательно влияние случайного кулоновского поля на термическую энергию ионизации примесей в полупроводнике было изучено в работах Лиена и Шкловского (ЛШ) [8], Узакова и Эфроса (УЭ) [9]. В них рассмотрены случаи соответственно слабого и сильного термического возбуждения электронов в примесных зонах. Критерием уровня возбуждения является отношение ширины примесной зоны W к тепловой энергии kT :

$$q = W/kT = \begin{cases} \gg 1, \\ \ll 1. \end{cases} \quad (3)$$

При $q \gg 1$ в области применимости модели ЛШ носители в примесной зоне занимают наиболее глубокие места потенциального рельефа, образованные крупномасштабными флуктуациями потенциала. В системе имеет место нелинейное статическое экранирование, радиус которого задает величину флуктуаций. Величину ε_1 (рис. 1, *a*) теория рассматривает как энергетическую щель между уровнем протекания

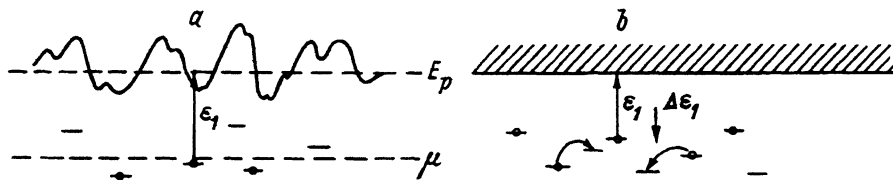


Рис. 1. Схема, поясняющая физический смысл поведения величины термической энергии ионизации ε_1 с изменением K и N ; *a* — для модели Лиена-Шкловского, которая рассматривает величину ε_1 как разность энергий уровня протекания (E_p) и уровня Ферми (μ) (см. формулу(4)); *b* — для модели Узакова-Эфроса, учитывающей релаксацию зарядного состояния примесной зоны после каждого акта термической ионизации (здесь $\Delta\varepsilon_1$ — уменьшение энергии ионизации за счет процессов релаксации).

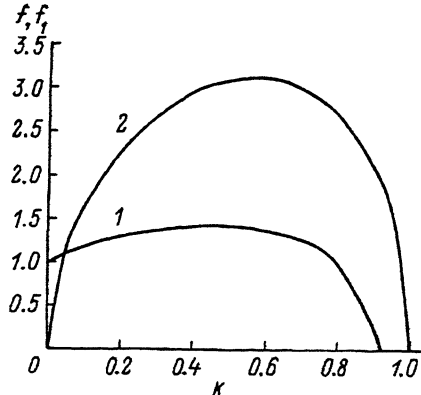


Рис. 2. Функции f (1) и f_1 (2) для моделей Лиена-Шкловского и Узакова-Эфроса соответственно.

E_p в случайном рельефе дна зоны проводимости и уровнем Ферми μ в примесной зоне:

$$\varepsilon_1 = E_p(N) - \mu(N). \quad (4)$$

В этом случае при фиксированной компенсации с увеличением уровня легирования изменяется положение E_p и μ относительно друг друга и, согласно соотношению (4), происходит изменение термической энергии ионизации ε_1 . Скорость этого изменения зависит от степени компенсации K . Таким образом, в модели ЛШ изменение термической энергии ионизации $\Delta\varepsilon_1$ описывается формулой типа (2), где величина f , однако, уже не константа, а функция степени компенсации $f = f(K)$. Поведение $f(K)$ показано на рис. 2. Из него видно, что функция $f(K)$ в пределе $K \rightarrow 0$ равна единице. Затем она слабо возрастает с увеличением K до своего максимального значения, потом убывает и при $K \cong 0.9$ меняет знак, уходя при $(1 - K) \ll 1$ на $-\infty$. Последняя особенность обусловлена резким заглублением уровня Ферми в крупномасштабных флуктуациях потенциала при $K \rightarrow 1$.

Модель УЭ рассматривает электроны примесной зоны при сильном их термическом возбуждении ($q \ll 1$), когда они могут свободно перераспределяться по состояниям зоны и обеспечивать линейное (дебаевское) экранирование (рис. 1, б). Существенным моментом при таком подходе является возможность релаксации зарядового состояния примесной зоны после каждого акта термической ионизации. Релаксация эта прекращается в двух предельных случаях: при $K \rightarrow 0$ (нет свободных мест) и $K \rightarrow 1$ (нет подвижных зарядов). Энергетический выигрыш от перераспределения зарядов по примесной зоне в ходе релаксации схематически изображен на рис. 1, б стрелкой, направленной вниз. Можно сказать, что рассматриваемая модель является в некотором смысле электронным аналогом принципа Франка-Кондона с тем существенным отличием, что релаксирует здесь не решетка, а распределение зарядов в примесной зоне. Поправка $\Delta\varepsilon_1$ в теории УЭ зависит не только от компенсации, но также и от температуры согласно следующей формуле:

$$\Delta\varepsilon_1 = \left(e^2 N^{1/3} / \kappa \right)^{3/2} (kT)^{-1/2} f_1, \quad (5)$$

где функция f_1 обусловлена взаимодействием всех зарядов системы:

$$f_1 = (K + 3)(\pi K)^{1/2}(1 - K)^{1/2}. \quad (6)$$

На рис. 2 сравнивается поведение функций $f(K)$ и $f_1(K)$. Как видно, функция $f_1(K)$ обращается в нуль в точках $K = 0$ и имеет пологий максимум в области промежуточных значений K . Качественное согласие с формулой (1) здесь имеет место во всем интервале значений K .

В работах [6,7] значения функций f и f_1 были найдены из анализ экспериментов для $6H$ -SiC:N. Помимо этого были проанализированы данные для других полупроводниковых систем в широком диапазоне уровней легирования и компенсации. Однако полученные результаты не позволили отдать предпочтение ни одной из моделей. Дело в том, что экспериментальные данные имеют очень большую дисперсию по причине неточного знания величин N и K в изучаемых материалах, а также недостаточно точной процедуры извлечения значений ϵ_1 при анализе данных для $6H$ -SiC:N и других полупроводниковых систем, легированных металлургическим путем. Можно было лишь утверждать, что опытные данные оказываются как бы «зажатыми» между кривыми для теоретических значений функций f и f_1 . По-видимому, исследование на серии образцов со строго постоянной компенсацией (или « K -серии») с хорошо известными электрофизическими параметрами (N и K) позволило бы прояснить понимание этого вопроса.

Полезным было бы сопоставление результатов оптических и электрических измерений. Известно, например, что энергии ионизации, полученные из оптических измерений имеют слабую зависимость от концентрации [10], а в случае мелких примесей в пределе слабого легирования стремятся к значению энергии, рассчитанному в водородоподобном приближении. При этом справедливо было бы предположить, что предел слабого легирования не зависит от способа измерения и величина $\epsilon_1(0)$, полученная из холловских измерений должна быть близкой к значению, полученному в оптическом эксперименте. Для выяснения этой проблемы можно воспользоваться результатом решения предыдущей задачи об определении поведения концентрационно зависимого члена $\Delta\epsilon_1(N)$ в термической энергии ионизации (1).

Теперь мы можем сформулировать два вопроса, решение которых составило задачу данного исследования. Первый: чем определяется поведение термической энергии ионизации в области слабого легирования и может ли оно быть описано в рамках существующих моделей? Второй: каков предел «изолированной примеси» для термической энергии ионизации и как он согласуется с результатами оптических измерений. Для решения поставленных вопросов следовало иметь « K -серии» образцов с промежуточной компенсацией.

3. Материал и методика эксперимента

Всем вышеперечисленным требованиям удовлетворяет « $K = 0.3$ -серия» нейтронно-легированного (НЛ) Ge. Методика получения и характеристики электрофизических параметров материала подробно изложены в работе Забродского, Андреева, Алексеенко [11], посвященной исследованию прыжковой проводимости этого материала.

№ образца	K	N , 10^{15} см^{-3}	N' , 10^{15} см^{-3}	ε_1 , мэВ	$q = W/kT$	N'' , 10^{15} см^{-3}	f_1
1	0.31	0.055	0.063	10.92	0.24	0.054	2.27
2	0.35	0.097	0.1	10.61	0.29	0.11	2.65
3	0.31	0.37	0.48	10.45	0.49	0.61	1.73
4	0.35	0.55	0.61	10.36	0.53	0.66	1.65
5	0.35	2.28	2.36	9.45	0.73	2.73	1.43
6	0.35	6.34	5.4	8.93	0.78	5.59	1.31
7	0.31	12.0	10.4	8.11	0.81	12.11	1.35
8	0.35	29.6	20.4	7.72	0.92	23.4	1.47
9	0.35	69.9	-	-	-	-	-
10	0.35	198.4	-	-	-	-	-

Здесь мы займемся исследованием ε_1 -проводимости на серии образцов с концентрациями $N = 6 \cdot 10^{13} - 7 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (см. таблицу). Эти концентрации находились из специальных экспериментов по исследованию поведения холл-фактора в сложной валентной зоне p -Ge [16].

Измерения коэффициента Холла проводились в интервале температур 6–300 К при магнитном поле порядка 5 кЭ в области линейности вольт-амперной характеристики. Образцы монтировались на высокоомном держателе криостата фирмы Oxford Instruments, оснащенный контроллером стабилизации температуры и насосом фирмы Hewlett-Packard. Управление величиной и направлением тока магнита производилось с помощью сканнера фирмы Keithley и системы питания фирмы Hewlett-Packard. Измерение напряжения осуществлялось с помощью электрометра фирмы Keithley. Вся установка была автоматизирована на базе персонального компьютера Hewlett-Packard-86.

4. Результаты измерений и качественный анализ

Результаты измерений температурных зависимостей удельного сопротивления $\rho(T)$ НЛ Ge:Ga в широком интервале температур приведены на рис. 3. Кривые $\rho(T)$ отличаются от известных из литературы данных Фришче и Кэваса [12] хорошо выраженной областью насыщения прыжковой проводимости по состояниям примесной зоны. Температурный интервал на рис. 3 включает три характерные области: I — область собственно ε_1 -проводимости, где концентрация дырок в валентной зоне экспоненциально зависит от термической энергии ионизации примесей; II — область проводимости по примесям, которая на изоляторной стороне перехода металл-изолятор при $N < N_c$ носит прыжковый характер. При этом, как было показано в [11], к области ε_1 -проводимости непосредственно примыкает четко выраженная область насыщения прыжковой проводимости, где она практически не зависит от температуры и определяется интервалом перекрытия дырочных волновых функций. Данные измерений коэффициента Холла $R(T)$ приведены на рис. 4. При понижении температуры, когда тепловая энергия возбуждения kT уже недостаточна для заброса существенного количества дырок из примесной зоны в валентную, замет-

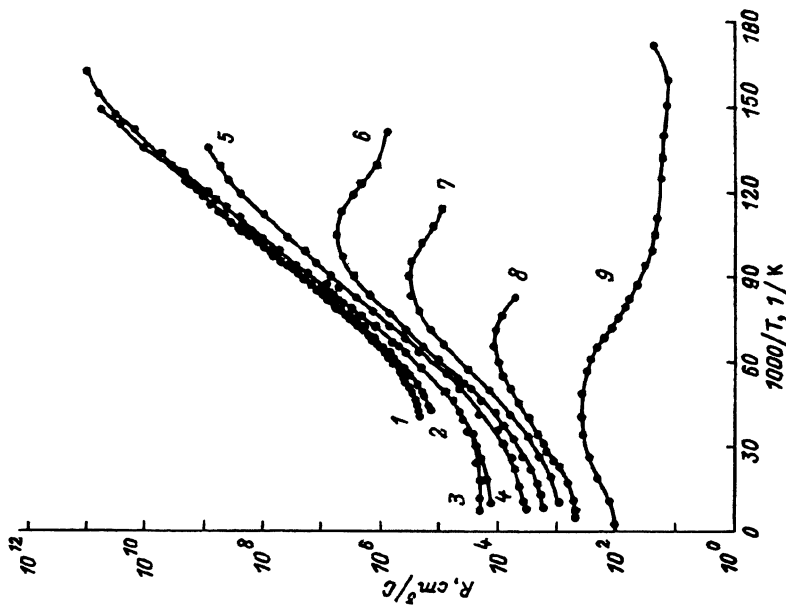


Рис. 4. Температурные зависимости коэффициента Холла. Номера кривых соответствуют номерам образцов в таблице.

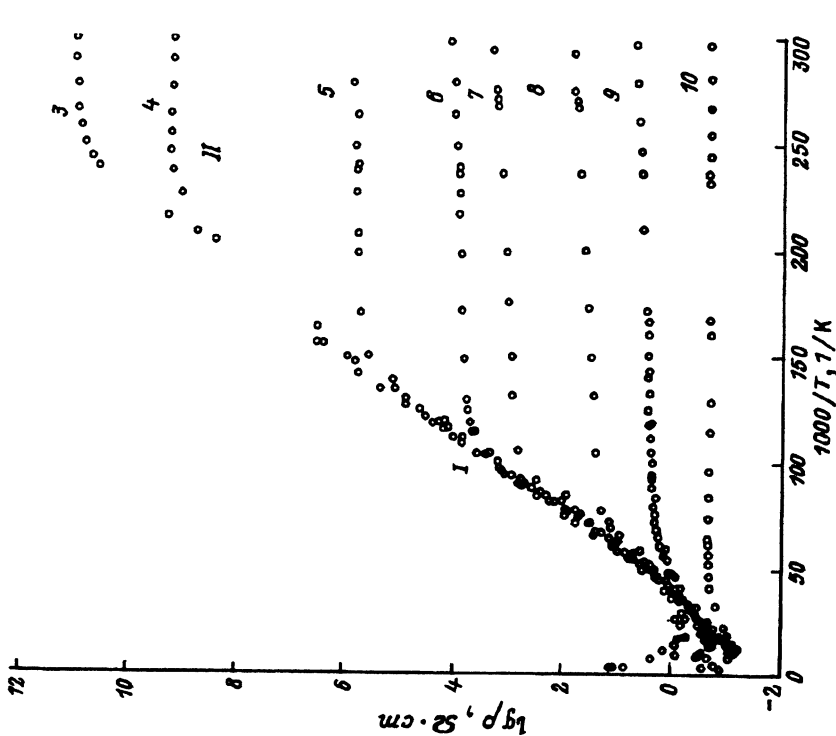


Рис. 3. Температурные зависимости удельного сопротивления нейтронно-легированного Ge:Ga. Римскими цифрами указаны (на примере образца 4) области: I — ϵ_1 -проводимости, II — проводимости по примесям. Номера кривых соответствуют номерам образцов в таблице.

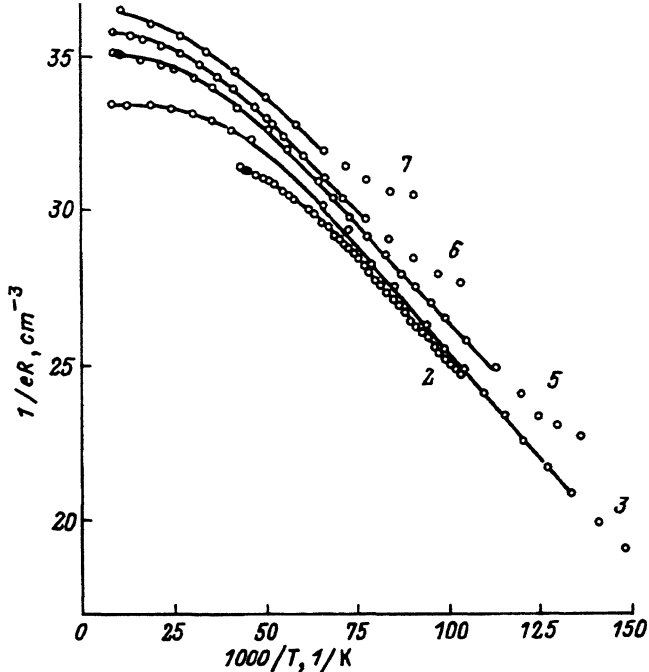


Рис. 5. Температурные зависимости концентрации дырок: точки — эксперимент, сплошные кривые показывают результаты подгонки по формуле (9). Номера кривых соответствуют номерам образцов в таблице.

ную роль начинает играть прыжковая проводимость. На кривых $R(T)$ для различных N это проявляется в виде отклонения от линейности и характерного двухзонного максимума, который двигается в сторону высоких температур с увеличением уровня легирования. Зависимости такого вида должны описываться в рамках двухзонной модели, как это было показано Фришпе в работе [13], для которой коэффициент Холла описывается выражением $R = (R_1\sigma_1^2 + R_3\sigma_3^2)/(\sigma_1 + \sigma_3)^2$. В нашем последующем «однозонном» анализе область двухзонного холловского максимума исключалась с помощью процедуры, описанной далее. В этом случае данные по $R(T)$ позволяют получить температурные зависимости концентрации свободных носителей в валентной зоне с помощью соотношения²

$$p(T) = 1/eR(T). \quad (7)$$

Полученные таким образом зависимости $p(T)$ представлены на рис. 5 в аррениусовском масштабе для области температур слева от холловского максимума, хотя, строго говоря (и мы обсудим это далее), область применимости (7) несколько меньше. Величина постоянного углового коэффициента в области линейности кривых на рис. 5 приблизительно соответствует значению энергии термической ионизации ϵ_1 акцепторной примеси Ga в Ge.

² Выражение (7) записано в приближении холл-фактора $r_p = 1$, что не отражается на изучаемых далее температурных зависимостях $p(T)$.

Повышение температуры приводит к тому, что все дырки из примесной зоны переходят в валентную и их концентрация достигает величины $N - N_d$, т. е. происходит истощение примесей, которое ограничивает изучаемую область ε_1 -проводимости со стороны высоких температур.

5. Стандартная процедура подгонки решения уравнения нейтральности к экспериментальным данным

Чтобы найти аналитическое выражение для $p(T)$ в области ε_1 проводимости, учитывающее истощение, нужно решить уравнение электронейтральности, которое для одноуровневой модели имеет вид [14]

$$\frac{p(p + N_d)}{N_a - N_d - p} = \frac{N_V}{\beta} \exp\left(\frac{\varepsilon_1}{kT}\right), \quad (8)$$

где $N_V = 4.831 \cdot 10^5 (m_V/m_0)^{3/2} T^{3/2} \text{ см}^{-3}$ — эффективная плотность состояний на краю валентной зоны p -Ge, $m_V = (m_h^{3/2} + m_l^{3/2})^{2/3} = 0.384m_0$ — эффективная масса плотности состояний, m_0 — масса свободного электрона, $m_h = 0.374m_0$, $m_l = 0.042m_0$ — массы тяжелых и легких дырок [14], $\beta = 4$ — фактор вырождения для валентной зоны Ge.

Введем обозначение $A(T) = (N_V/\beta) \exp(\varepsilon_1/kT)$ и запишем решение (8)

$$p = \left| \sqrt{D} - [N_D + A(T)] \right| / 2, \quad (9)$$

где D — дискриминант

$$D = [N_D + A(T)]^2 + 4A(T)N_D(1 - K)/K. \quad (10)$$

Значения ε_1 находились методом двухпараметрической подгонки аналитической зависимости (9) к экспериментальным значениям $p(T)$, когда в качестве подгоночных параметров использовались концентрация N' основной примеси Ga и величина ε_1 термической энергии ионизации. Значения степени компенсации определялись из специальных экспериментов с использованием кинетики нейтронного легирования [15] и приведены в таблице. При этом, чтобы определить область применимости однозонной модели, использовалась процедура постепенного сокращения массива данных со стороны низких температур. В области влияния проводимости по примесной зоне это приводит к монотонному возрастанию определяемого значения термической энергии ионизации ε_1 с последующим выходом на «однозонное» плато (рис. 6). Ограничивающая его температура T_1 показана стрелками. Как показано в [11], температура перехода от ε_1 -проводимости к прыжковой пропорциональна ширине примесной зоны и характерной кулоновской энергии $(e^2/\kappa)N^{1/3}$. В нашем случае исключение представляют наименее легированные образцы 1 и 2, где отклонение от однозонной модели начиналось несколько раньше. Это было обусловлено возникающей неомичностью вольт-амперной характеристики, а также влиянием фоновой подсветки. На этих же наиболее чистых образцах при высоких температурах было заметно влияние глубоких примесных состояний,

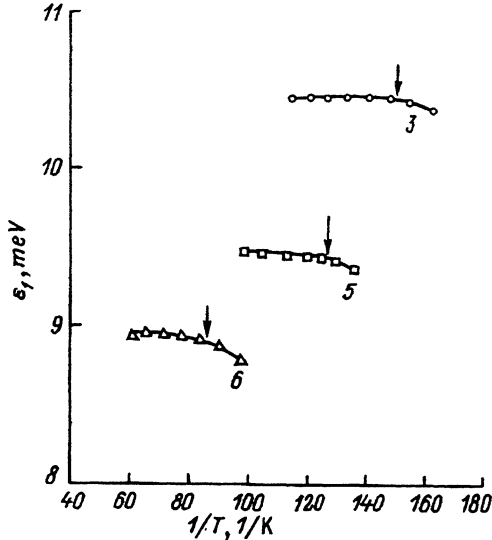


Рис. 6. Зависимость определяемой из процедуры подгонки величины энергии ионизации ϵ_1 от низкотемпературной границы массива данных. Стрелки соответствуют температуре T_1 — началу проявления проводимости по состояниям примесной зоны.

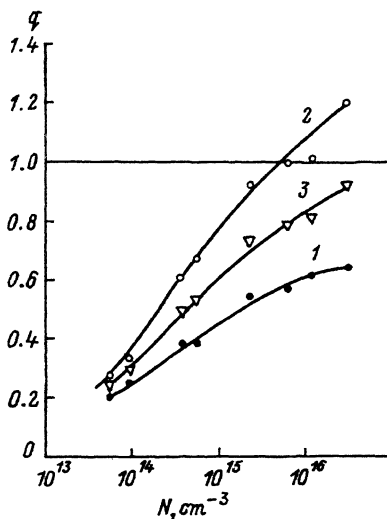


Рис. 7. Концентрационная зависимость параметра $q = W/kT$ для низко- (1) и высокотемпературных (2) границ диапазона подгонки, а также для среднего значения (3).

введенных в процессе приготовления образцов. Чтобы не учитывать их, массив данных ограничивался и со стороны высоких температур.

Величины N' найдены для $r_p = 1$. Из таблицы видно, что они слабо отличаются от полученных при исследовании поведения холл-фактора в сложной валентной зоне p -Ge [16]. Таким образом, использованное приближение холл-фактора, равного единице, является удовлетворительным.

6. Анализ полученных результатов в рамках моделей Узакова–Эфроса и Лиена–Шкловского

Введенный соотношением (3) параметр q определяет характер распределения электронов по состояниям примесной зоны от равномерно ($q \ll 1$) до случая вырождения с фермиевской ступенькой ($q \gg 1$). Входящая в величину q ширина примесной зоны определяется кулоновским разбросом основных состояний Ga в поле неосновных примесей (As, Se) и может быть оценена из формулы [19]

$$W = (e^2/\kappa)N_d^{1/3}. \quad (12)$$

В температурном интервале подгонки параметр q естественным образом меняется с температурой, однако наибольшим весом в процедуре подгонки при определении термической энергии ионизации ϵ_1 обладает область линейности в аррениусовском масштабе (рис. 5), которая и задает характерный диапазон изменения параметра q . На рис. 7 изображена концентрационная зависимость его максимальных

и минимальных значений для низко- и высокотемпературных граничных интервалов линейности, а также соответствующих им средних значений

$$q = \frac{q_{\max} + q_{\min}}{2}. \quad (11)$$

Из рис. 7 видно, что в нашем случае параметр $q < 1$. Таким образом, можно сказать, что предпочтительнее реализация условий для модели УЭ, согласно которой носители в валентной и примесной зонах достаточно подвижны, чтобы обеспечить близкий к линейному (дебаевский) характер экранирования. Следует учитывать, что в рамках модели УЭ поправка к термической энергии ионизации $\Delta \varepsilon_1$ является температурно зависимой и вычисляется по формуле (5), которая теоретически обоснована для случая $q \ll 1$. Это сильное неравенство, как следует из рис. 7, выполняется только для четырех наименее слабо легированных образцов. В зависимости $\varepsilon_1(N^{1/2})$, построенной на рис. 8 на основании формулы (5), им соответствуют четыре точки слева. С помощью метода наименьших квадратов для соответствующего им диапазона концентраций $(0.5-5) \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ находим коэффициенты линейной зависимости согласно формуле (5)

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_1(0) - BN^{1/2} \quad (12)$$

со свободным членом

$$\varepsilon_1(0) = (11.2 \pm 0.3) \text{ мэВ}. \quad (13)$$

Фигурирующая здесь погрешность на 2/3 своей величины определяется разбросом точек на рис. 8 и на 1/3 задается погрешностью величины холл-фактора для p -Ge в пределе слабого легирования, которая порядка 10% [16]. Это значение термической ионизации в пределе «изолированной примеси» оказывается близким к величине $\varepsilon_1^{\text{opt}} = 11.32 \text{ мэВ}$, найденной из оптических измерений для слабо легированных образцов в работах [17,18]. С этой точки зрения применимость модели УЭ в пределе слабого легирования представляется обоснованной.

Из рис. 8 следует, что при $N \geq 10^{15} \text{ см}^{-3}$ концентрационная зависимость $\varepsilon_1(N)$ ослабевает по сравнению с предсказанной моделью УЭ. Можно думать, что это вызвано переходом к области действия модели ЛШ. Но тогда следовало предположить, что условия для осуществления нелинейного экранирования не так строги и при $N \geq 10^{15} \text{ см}^{-3}$ поведение системы описывается моделью ЛШ. Найденная для этого случая по формуле (2) функция $f(K)$ представлена на рис. 2. Находя коэффициенты для линейной зависимости из процедуры подгонки данных $\varepsilon_1(N^{1/3})$ по формулам (1) и (2) (рис. 9), получаем, что $\varepsilon_1(0) = (11.3 \pm 0.3) \text{ мэВ}$. Это совпадает со значением $\varepsilon_1^{\text{opt}}$, что в какой то степени обосновывает применимость модели ЛШ. С другой стороны, мы можем провести проверку ее применимости, сравнив теоретическое значение функции $f_{th}(0.3) = 1.37$ с ее экспериментальной величиной. Последняя определяется из той же процедуры подгонки, что и $\varepsilon_1(0)$, и оказывается равной $f_{\text{exp}}(0.3) = 1.4$. Таким образом, имеет место и хорошее согласие по параметру f .

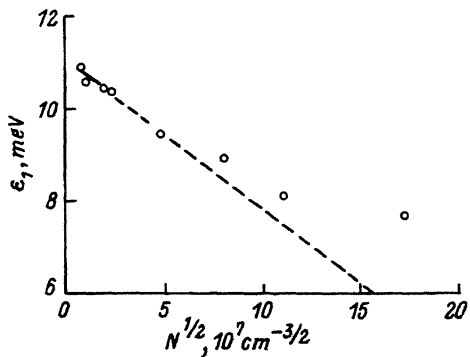


Рис. 8. Концентрационная зависимость термической энергии ионизации согласно модели Узакова-Эфроса.

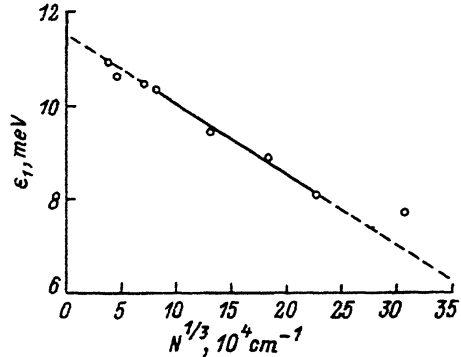


Рис. 9. Концентрационная зависимость термической энергии ионизации согласно модели Лиена-Шкловского.

Итак, при умеренных уровнях легирования $5 \cdot 10^{14} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ работает модель ЛШ. Со стороны малых уровней легирования при $N \leq 5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ она уступает место модели УЭ. Однако обоснование последней было проведено нами выше для предела «изолированной примеси».

Поэтому представляется интересным провести количественную проверку модели УЭ подобно тому, как это было сделано для модели ЛШ.

7. Количественная проверка модели Узакова-Эфроса

При определении экспериментального значения функции f_1 согласно модели УЭ существенное осложнение связано с тем, что для этой модели слагаемое $\Delta\epsilon_1$ в формуле (1) зависит от температуры. Авторы работ [6,7] обходили эту проблему, определяя величину f_1 для температуры в середине диапазона линейности на рис. 5. В результате такой процедуры были получены оценочные значения для f_1 с невысокой точностью. В настоящей работе предлагается процедура, позволяющая определить величину f_1 для всего интервала температур.

Суть подхода заключается в параметрической подгонке зависимостей $p(T)$ (рис. 5) с помощью уравнения (8) с учетом температурной зависимости энергии ионизации ϵ_1 , которая описывается законом (5) в модели УЭ. Процедура аналогична использованной ранее для определения ϵ_1 с той разницей, что искомым параметром теперь является значение функции f_1 при заданной компенсации. Поскольку рассматриваемая величина $\Delta\epsilon_1$ в температурном интервале подгонки существенно нелинейна, то следует использовать минимум подгоночных параметров. В нашем решении это значения N_d и f_1 . Задавались заранее две величины: компенсация K (см. таблицу) и $\epsilon_1(0)$, которое, как показано выше, соответствует пределу термической энергии ионизации для изолированной примеси. В качестве $\epsilon_1(0)$ было использовано найденное с меньшей погрешностью оптическое значение, равное 11.32 мэВ. Полученные нами данные приведены в таблице. На рис. 10 показано соответствующее изменение термической энергии ионизации с температурой в характерном для формулы (5) масштабе. Там же горизонтальными отрезками изображены постоянные значения ϵ_1 , полученные

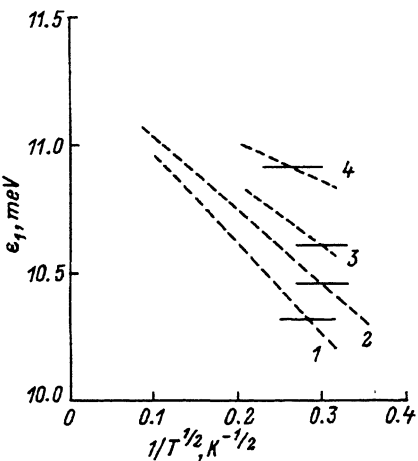


Рис. 10. Температурная зависимость термической энергии ионизации примесей Ga в нейтронно-легированном Ge:Ga, извлеченная из опыта согласно модели Узакова-Эфроса. Горизонтальные отрезки — постоянные значения ϵ_1 , полученные без учета температурной зависимости поправки $\Delta\epsilon_1$. Номера кривых соответствуют номерам образцов в таблице.

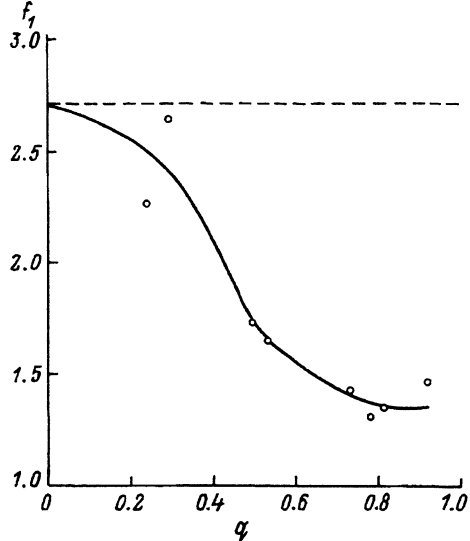


Рис. 11. Экспериментальные значения функции f_1 в зависимости от параметра q (см. таблицу). Пунктиром изображено теоретическое значение f_1 для $K = 0.3$.

выше без учета температурной зависимости поправки $\Delta\epsilon_1$. Как видно, изменение ϵ_1 с температурой является резким и весьма существенным, чтобы можно было достаточно уверенно определить величину f_1 , а с другой стороны, это изменение заметно меньше фигурирующей в формуле (13) величины $\epsilon_1(0)$, т. е. носит характер поправки.

Дополнительным подтверждением корректности выполненной процедуры является хорошее совпадение найденных по данным для N_d значений концентрации N'' основной примеси Ga с полученными ранее из других видов анализа.

На рис. 11 построена зависимость f_1 от характеристического параметра q . Видно, что, чем лучше выполняется условие $q \ll 1$, тем ближе экспериментальные значения к теоретическому предсказанию модели УЭ — величине $f_1 = 2.72$.

Это позволило впервые подтвердить сделанный ранее качественный вывод о том, что в области слабых уровней легирования работает модель УЭ, и произвести ее количественную проверку.

8. Основные результаты и выводы

В области слабого легирования $N < 10^{15} \text{ см}^{-3}$, когда ширина примесной зоны W много меньше тепловой энергии kT , изменение термической энергии ионизации с компенсацией и уровнем легирования $\Delta\epsilon_1 = \Delta\epsilon_1(N, K)$ описывается в рамках модели УЭ. При этом физический смысл уменьшения энергии ионизации с уровнем легирования

обусловлен релаксацией зарядового состояния примесной зоны при каждом акте термической ионизации примесей (электронный аналог принципа Франка-Кондона).

При более высоких уровнях легирования $N > 10^{15} \text{ см}^{-3}$ работает модель ЛШ, описывающая поправку к величине $\varepsilon_1(0)$ как разность энергий уровней Ферми и протекания. Найденная из анализа в рамках обеих моделей УЭ и ЛШ величина $\varepsilon_1(0)$ для предела изолированной примеси совпадает со значением, полученным оптическими методами.

Авторы благодарят участников научного семинара Лаборатории неравновесных процессов в полупроводниках ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН за полезное обсуждение результатов и признательны М.В.Алексеевко за содействие в характеризации образцов.

Работа на заключительном этапе поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 94-02-05058.

Список литературы

- [1] G.L. Pearson, J. Bardeen. Phys. Rev., **88**, 865 (1949).
- [2] Дж. Кастеллан, Ф. Зейтц. *Об энергетических уровнях в кремнии. Полупроводниковые материалы*. (М., Иностран. лит., 1954).
- [3] P.P. Debye, E.M. Conwell. Phys. Rev., **93**, 693 (1954).
- [4] T.F. Lee, T.G. McGill. J. Appl. Phys., **46**, 373 (1975).
- [5] J. Monese, W. Siegel, E. Ziegler, G. Fuhnel. Phys. St. Sol. b, **103**, 269 (1981).
- [6] А.Г. Забродский, М.П. Тимофеев. ФТП, **21**, 2217 (1987).
- [7] М.В. Алексеевко, А.Г. Забродский, М.П. Тимофеев. ФТП, **21**, 810 (1987).
- [8] Н. Лиен, Б.И. Шкловский. ФТП, **13**, 1763 (1979).
- [9] А.А. Узаков, А.Л. Эфрос. ФТП, **21**, 922 (1987).
- [10] H.H. Woodbury, M. Aven. Phys. Rev. B, **9**, 5195 (1974).
- [11] А.Г. Забродский, А.Г. Андреев, М.В. Алексеевко. ФТП, **26**, 431 (1992).
- [12] H. Fritzsche, M. Cuevas. Phys. Rev., **119**, 1239 (1960).
- [13] H. Fritzsche. J. Phys. Chem. Sol., **6**, 69 (1958).
- [14] Д. Блекмор. *Статистика электронов и дырок в полупроводниках* (М., Мир, 1964).
- [15] А.Г. Забродский, М.В. Алексеевко. ФТП, **27**, 2030 (1993).
- [16] М.В. Алексеевко, А.Г. Андреев, А.Г. Забродский, В.В. Попов. ФТП, **22**, 140 (1988).
- [17] A. Baldereschi, N.A. Lipari. Phys. Rev. B, **8**, 2697 (1973); Phys. Rev. B, **9**, 1525 (1974).
- [18] Б.А. Андреев, В.Б. Иконников, Е.Б. Кезитов, В.Б. Шмагин. В сб.: *Высококичестные вещества* (Ин-т химии АН СССР, Горький, 1988) № 2, с. 180.
- [19] В.И. Shklovskii, A.L. Efros. *Electronic Properties of Doped Semiconductors* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, N.-Y., Tokyo, 1984).

Редактор Т.А. Полянская