

- [1] Гуревич Ю. Г. // УФЖ. 1979. Т. 24. В. 11. С. 1610—1625.
 [2] Басс Ф. Г., Бочков В. С., Гуревич Ю. Г. Электроны и фононы в ограниченных полупроводниках. М., 1984. 288 с.
 [3] Самойлович А. Г., Коренблит И. Я., Даховский И. В. // ДАН СССР. 1961. Т. 139. В. 2. С. 355—358.
 [4] Бочков В. С., Гуревич Ю. Г. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 4. С. 728—730.
 [5] Пигус Г. Е. // ЖТФ. 1956. Т. 26. В. 1. С. 22—35.
 [6] Грибников З. С. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 3. С. 483—489.
 [7] Коппи А. М., Рудайтис В. Г., Сащук А. П. // Лит. физ. сб. 1987. Т. 27. № 6. С. 722—726.
 [8] Апсельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978. 616 с.
 [9] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М., 1977. 627 с.
 [10] Gurevich Yu. G., Mashkevich O. L. // Phys. Rep. 1989. V. 181. N 6. P. 327—394.

Харьковский государственный университет
им. А. М. Горького

Получено 1.11.1989
Принято к печати 17.03.1990

ФТП, том 24, вып. 7, 1990

ЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДОНОРОВ С ДИСЛОКАЦИЕЙ

Гольдфарб М. В., Молоцкий М. И.

1. Взаимодействие примесей с дислокациями в полупроводниках оказывает определяющее влияние на электронную структуру дислокаций, скорость сегрегации примесей, их диффузию вдоль линий дислокаций, на механические свойства кристаллов. Это обстоятельство объясняет тот устойчивый интерес, который проявляется к изучению природы взаимодействия примесей с дислокациями [1-3]. Обычно учитывают два вида взаимодействия — упругое и электростатическое. Упругое взаимодействие обусловлено в основном взаимодействием гидростатического напряжения, создаваемого дислокацией, с локальным изменением объема кристалла ΔV_a после введения примеси. Предельная величина упругого взаимодействия равна [1]

$$W_{\text{упр}} = -\frac{1}{2\pi} \frac{1+\sigma}{1-\sigma} \mu |\Delta v_a|,$$

где μ — модуль сдвига, σ — коэффициент Пуассона.

Линейный заряд дислокации определяет энергию электростатического взаимодействия иона примеси с дислокацией. В полупроводниках n -типа линия дислокации заряжена отрицательно и энергия взаимодействия с однозарядным положительным ионом равна

$$W_{\text{эл}} = e_0 \varphi_d(f),$$

где φ_d — потенциал линии дислокации. В модели Рида [2]

$$\varphi_d(f) = -\frac{e_0 f}{\epsilon a} \left[3 \ln \left(\frac{f}{f_c} \right) - 0.232 \right],$$

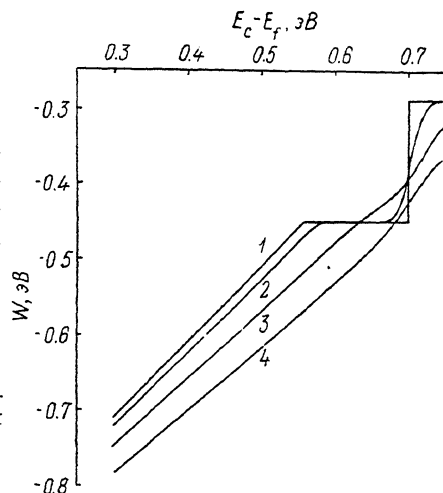
где f — доля акцепторных состояний на оборванных связях ядра дислокации, заполненных электронами, a — расстояние между оборванными связями, ϵ — диэлектрическая проницаемость, $f_c = a (\pi n_d)^{1/2}$, n_d — плотность доноров в недеформированном кристалле. Если с оборванными связями ядра дислокации связано акцепторное состояние с энергией E_d , то зависимость степени заполнения f от положения уровня Ферми E_f и температуры T определяется решением уравнения [2]

$$f = \frac{1}{\exp \left(\frac{E_d - e_0 \varphi_d(f) - E_f}{kT} \right) + 1}.$$

Для иона фосфора в кремнии при $\mu=7.55 \cdot 10^{11}$ дин/см², $\sigma=0.27$, $\Delta v_a = -0.11 V_0$ ($V_0=2 \cdot 10^{-23}$ см³ — объем, приходящийся на один атом кремния) энергия упругого взаимодействия $W_{\text{упр}} = -0.29$ эВ и при типичных значениях $n_d=10^{16}$ см⁻³, $f_c=1.5 \cdot 10^{-2}$, $f=0.1$ [2], $a=5$ Å, $\epsilon=11.4$ энергия электростатического взаимодействия $W_{\text{эл}} = -0.14$ эВ, т. е. энергии $W_{\text{упр}}$ и $W_{\text{эл}}$ — величины одного порядка.

2. Дополнительный вклад в энергию взаимодействия вносит изменение электронной структуры дислокации при осаждении примесей. Осаждение доноров на дислокации приводит к появлению новых состояний, отщепляющихся от дна одномерных дислокационных зон [4-7]. Переход электронов в эти состояния понижает энергию кристалла, что приводит к дополнительному притяжению донора к дислокации.

Расчет энергии такого взаимодействия проведем в рамках модели [8], описывающей электронную структуру фосфора на дислокации в кремнии. Согласно [8], примесь расположена не на самой линии дислокации, а вблизи нее, на расстоянии порядка постоянной решетки. Атом фосфора, для которого $\Delta v_a < 0$,



Зависимость энергии взаимодействия атома фосфора с дислокацией в кремнии от положения уровня Ферми.

$T, K: 1 - 4.2, 2 - 77, 3 - 300, 4 - 600.$

затягивается упругими силами в область экстраплоскости. Электронное сродство оборванных связей дислокации на порядок превышает энергию ионизации донора, и поэтому валентный электрон примеси практически полностью затягивается на оборванные связи. Такие связи не перекрываются с ионом фосфора, расположенным в области экстраплоскости, что позволяет объяснить наблюдаемое отсутствие сверхтонкого расщепления соответствующего сигнала ЭПР с ядром примеси [9]. Модель [8] также позволяет объяснить природу DLTS-состояний, появляющихся при осаждении фосфора на дислокации и расположенных выше дна одномерной дислокационной зоны [10]. Такие состояния представляют собой резонансы, возникающие при рассеянии дислокационных электронов на отрицательных ионах фосфора.

Способность модели [8] описать известные эксперименты [9, 10] позволяет надеяться на то, что ее можно применять для построения количественной теории электронного взаимодействия донора с дислокацией. Согласно [8], атом фосфора на дислокации в кремнии создает донорные и акцепторные состояния с энергиями $E_g = E_c - 0.70$ и $E_a = E_c - 0.56$ эВ, расположенные ниже дна дислокационной зоны $E_d = E_c - 0.54$ эВ [10]. При заполнении одноэлектронного состояния выигрыш в энергии равен $E_g - E_d$, двухэлектронного — $E_g - E_d + E_a - E_d$. Если вероятности заполнения этих состояний электронами равны γ_0 и γ_{-} , то энергия электронного взаимодействия примеси с дислокацией имеет вид

$$W_g = (E_g - E_d) \gamma_0 + (E_g - E_d + E_a - E_d) \gamma_{-}.$$

Предельное значение энергии $W_g = -0.18$ эВ достигается при $\gamma_0 = 0$ и $\gamma_{-} = 1$. Следовательно, энергия электронного взаимодействия не мала и является величиной того же порядка, что упругое и электростатическое взаимодействие. Энергия электронного взаимодействия всего лишь в 2 раза меньше энергии упругого взаимодействия.

В зависимости от положения уровня Ферми и температуры примесь на дислокации может находиться в трех зарядовых состояниях — нейтральном, положительном и отрицательном. Соответствующие вероятности равны

$$\eta_+ = \left\{ 1 + \frac{g_0}{g_+} \exp\left(\frac{E_f - E_g + e_0\varphi_d(f)}{kT}\right) + \frac{g_-}{g_+} \exp\left(\frac{2E_f - E_g - E_a + 2e_0\varphi_d(f)}{kT}\right) \right\}^{-1},$$

$$\eta_- = \eta_+ \frac{g_0}{g_+} \exp\left(\frac{E_f - E_g + e_0\varphi_d(f)}{kT}\right), \quad \eta_- = \eta_+ \frac{g_-}{g_+} \exp\left(\frac{2E_f - E_g - E_a + 2e_0\varphi_d(f)}{kT}\right),$$

где g_i — кратность вырождения состояния. При вычислениях считалось, что $g_0=2$, $g_+=1$, $g_-=1$.

На рисунке представлена зависимость полной энергии взаимодействия $W=W_{\text{упр}}+W_{\text{эл}}+W_{\text{о}}$ от E_f и T . Видно, что, изменяя положение уровня Ферми, можно существенно изменить величину энергии взаимодействия. Это позволяет управлять процессами на дислокациях путем контролируемого изменения положения уровня Ферми. При низких температурах на зависимости $W(E_f)$ видны изломы, возникающие в тех случаях, когда уровень Ферми пересекает донорный или акцепторный уровень примеси и появляется дополнительный член в энергии электронного взаимодействия. Поэтому появление таких изломов в опытах, в которых проявляется взаимодействие дислокации с примесями, например, при определении предела текучести, может служить новым методом определения положения примесных уровней на дислокациях.

Авторы глубоко благодарны Б. М. Даринскому и Э. И. Рашбе за полезное обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Фридель Ж. Дислокации. М., 1967. 644 с.
- [2] Матаре Г. Электроника дефектов в полупроводниках. М., 1974. 464 с.
- [3] Sumino K. // Defect and Properties of Semiconductors: Defect Engineering. KTK Scientific Publishers. Tokyo, 1987. P. 227—259.
- [4] Kechechyan K. O., Kirakossyan A. A. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 87. N 2. K125—K126.
- [5] Велявский В. И., Даринский Б. М., Шалимов В. В. // Изв. вузов СССР. Физика. 1981. № 9. С. 73—78.
- [6] Молоцкий М. И. // ЖТФ. 1988. Т. 58. В. 9. С. 1811—1813.
- [7] Heggie M. I., Jones R., Lister G. M. S., Umerski A. // Proc. 6 Int. Symp. on the Structure and Properties of Dislocations in Semiconductors. Oxford, 1989. P. 4.
- [8] Гольдфарб М. В., Молоцкий М. И. // Тез. докл. XIV Всес. (Пекаровского) совещ. по теории полупроводников. Донецк, 1989. С. 53.
- [9] Weber E., Alexander H. // Sol. St. Commun. 1980. V. 37. N 5. P. 371—373.
- [10] Omling P., Weber E. R., Montelius L., Alexander H., Michel J. // Phys. Rev. 1985. V. B32. N 10. P. 6571—6581.

Воронежский государственный университет
им. Ленинского комсомола

Получено 7.12.1989
Принято к печати 17.03.1990

УСТОЙЧИВЫЕ СОСТОЯНИЯ И СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В АМОРФНОМ ГИДРОГЕНИЗИРОВАННОМ КРЕМНИИ

Маслюк В. Т.

Известны сложности в интерпретации эффекта Стеблера—Вронского [1], состоящего в изменении проводимости полупроводников на основе аморфного гидрогенизированного кремния ($a\text{-Si:H}$) при длительном освещении. Ранее аналогичные эффекты, названные фотоструктурными превращениями, были обнаружены в халькогенидных стеклах (ХС) [2]. В случае ХС имеется ряд теоретических методов, позволяющих, например, описать концентрационную зависимость ряда физико-химических параметров при фотоиндуцированных прев-