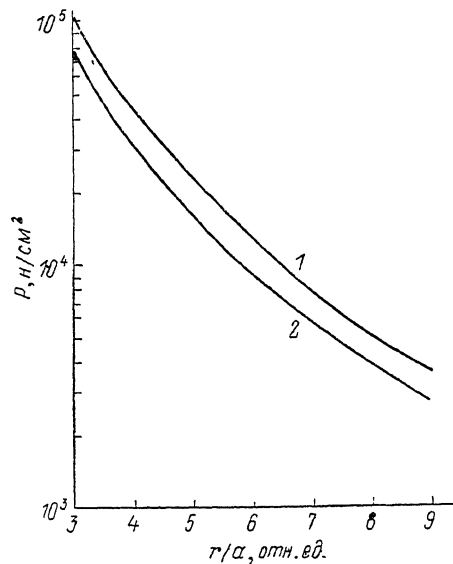


ВЛИЯНИЕ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ, СОЗДАВАЕМЫХ КОМПОНЕНТАМИ ПАР ФРЕНКЕЛЯ, НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ДЕФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ IV ГРУППЫ

Вятовский Н. А., Емцев В. В., Машовец Т. В., Михнович В. В.

Ранее авторами было высказано предположение, что упругие напряжения, создаваемые собственным межузельным атомом (I) и вакансией (V), могут существенно искажать их энергетический спектр — приводить к смещению энергетических состояний в запрещенной зоне и даже к появлению новых состояний [1, 2].

Для германия нами был выполнен расчет среднего гидростатического давления, создаваемого межузельным атомом, находящимся в различных зарядовых состояниях в месте расположения вакансии. Несмотря на то что создаваемая I и V деформация неоднородна, для оценки величины смещения энергетических состояний дефектов можно применить обычно используемую при расчетах деформаций величину — среднее гидростатическое давление. При расчете были приняты следующие значения упругих модулей: $\lambda = 4.8 \cdot 10^5$ кг/см², $\mu = -5.3 \cdot 10^5$ кг/см², $G = 6.9 \cdot 10^5$ кг/см², модуля вестороннего сжатия $K = 8 \cdot 10^5$ кг/см² [3]. Флексоэлектрические модули $G_{1,2,3} \approx e/a$, где e — заряд электрона, a — межатомное расстояние [4, 5], ковалентный радиус германия $r^* = 1.22$ Å. Принято, что ковалентный радиус вакансии $r_V = 0.95 r^*$, а межузельного атома — $r_I = 2$ Å. Расчет проведен для полярного угла $\theta = 55^\circ$ и азимутального угла $\varphi = 45^\circ$, при которых взаимодействие между I и V максимально. Полученная расчетная зависимость среднего гидростатического давления, создаваемого межузельным атомом в зарядовых состояниях I^0 и I^+ , от расстояния до этого атома показана на рисунке. Видно, что эффективное давление на расстоянии двух постоянных решетки составляет несколько кбар. Влияние одноосной деформации на энергию ионизации различных примесных и дефектных центров сравнительно хорошо исследовано для кремния [6–8]. Показано, что центры вакансионного типа характеризуются значительно большей чувствительностью энергии ионизации к давлению, чем примесные атомы. Так, например, для А-центра сдвиг уровня $E_c - 0.17$ эВ может достигать 5.2 [6] и даже 30 мэВ/кбар [7]. Значения упругих констант для германия ниже, чем для кремния, и следует ожидать, что соответствующие сдвиги могут быть еще больше. Германий в этом отношении изучен значительно слабее, но, согласно [9], сдвиг уровня $E_c - 0.2$ эВ акцепторного центра радиационного происхождения составляет несколько десятков мэВ/кбар. Таким образом, можно полагать, что в близкой паре Френкеля в германии напряжение, создаваемое межузельным атомом, приводит к сдвигу энергетического состояния изолированной вакансии. Вообще говоря, при достаточно большом давлении, вызываемом собственным межузельным атомом, в близкой паре Френкеля возможно отщепление нового уровня вакансии,



Зависимость среднего гидростатического давления, создаваемого межузельным атомом в различных зарядовых состояниях, от расстояния до этого атома.

1 — I^+ , 2 — I^0 .

постоянных решетки составляет несколько кбар. Влияние одноосной деформации на энергию ионизации различных примесных и дефектных центров сравнительно хорошо исследовано для кремния [6–8]. Показано, что центры вакансионного типа характеризуются значительно большей чувствительностью энергии ионизации к давлению, чем примесные атомы. Так, например, для А-центра сдвиг уровня $E_c - 0.17$ эВ может достигать 5.2 [6] и даже 30 мэВ/кбар [7]. Значения упругих констант для германия ниже, чем для кремния, и следует ожидать, что соответствующие сдвиги могут быть еще больше. Германий в этом отношении изучен значительно слабее, но, согласно [9], сдвиг уровня $E_c - 0.2$ эВ акцепторного центра радиационного происхождения составляет несколько десятков мэВ/кбар. Таким образом, можно полагать, что в близкой паре Френкеля в германии напряжение, создаваемое межузельным атомом, приводит к сдвигу энергетического состояния изолированной вакансии. Вообще говоря, при достаточно большом давлении, вызываемом собственным межузельным атомом, в близкой паре Френкеля возможно отщепление нового уровня вакансии,

как это и требуется для интерпретации результатов по низкотемпературному облучению германия [1, 2, 10].

С другой стороны, оценка показала, что среднее гидростатическое давление, создаваемое вакансией (независимо от ее зарядового состояния), приблизительно в 20 раз меньше, и, следовательно, нельзя ожидать существенного сдвига энергетических состояний межузельного атома вблизи вакансии.

Л и т е р а т у р а

- [1] Емцев В. В., Витовский Н. А., Машовец Т. В. // ФТП. 1987. Т. 12. В. 1. С. 145—149.
- [2] Емцев В. В., Дабагян А. В., Витовский Н. А., Машовец Т. В. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 5. С. 924—926.
- [3] Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. М., 1985. 352 с.
- [4] Коган Ш. М. // ФТТ. 1963. Т. 5. В. 10. С. 2829—2831.
- [5] Иденбом В. Л., Логинов Е. Б., Осипов М. А. // Кристаллография. 1981. Т. 26. В. 6. С. 1157—1162.
- [6] Семенов А. К., Назарчук П. Ф. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 7. С. 1331—1333.
- [7] Лебедев А. А., Султанов Н. А. // Препринт ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР. Л. 1986. № 1080.
- [8] Лебедев А. А., Султанов Н. А., Экке В. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 2. С. 321—324.
- [9] Семенов А. К., Панкевич З. В., Федосов А. В., Доскоч В. П. Радиационные дефекты в полупроводниках. Минск, 1972. 284 с.
- [10] Calcott T. A., MacKay J. W. // Phys. Rev. 1967. V. 161. N 3. P. 689—710.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получено 27.06.1988
Принято к печати 26.07.1988

ФТП, том 23, вып. 1, 1989

ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ ТАЛЛИЯ В СУЛЬФИДЕ СВИНЦА ПО ДАННЫМ ИК ПОГЛОЩЕНИЯ

Вейс А. Н., Крупицкая Р. Ю.

Авторы работы [1] на основании сравнения электрофизических и оптических данных для $\text{PbTe}\langle\text{Tl}\rangle$ с привлечением результатов исследования ЭПР предположили, что примесь Tl в теллуриде свинца является центром с отрицательной корреляционной энергией. Одним из аргументов, свидетельствующих о необходимости радикального пересмотра существующих представлений о таллии [2], явилась отмеченная в [1] значительная разница между термической $E_0^{\text{тер}}$ (определяемой из величины энергии Ферми в режиме пиннинга E_F^*) и оптической $E_0^{\text{оп}}$ энергиями примесного уровня. Однако в $\text{PbTe}\langle\text{Tl}\rangle$ заметное влияние на величину E_F^* оказывает не только перезарядка примесных центров, но и заполнение дырками тяжелого экстремума валентной зоны, вершина которого расположена вблизи E_F^* . В связи с этим объектом исследований в настоящей работе служит $\text{PbS}\langle\text{Tl}\rangle$, в котором величина E_F^* определяется только свойствами примесных центров (энергетический зазор между неэквивалентными экстремумами валентной зоны ΔE_v в PbS является наибольшим среди всех халькогенидов свинца, приблизительно вдвое превышающим E_F^*).

По причинам, изложенным в [1], полученные ранее значения $E_0^{\text{оп}}$ в $\text{PbS}\langle\text{Tl}\rangle$ [3] не могут быть использованы для сравнения с E_F^* . Поэтому в настоящей работе были выполнены новые исследования спектров коэффициента поглощения $\alpha(\hbar\omega)$ в $\text{PbS}\langle\text{Tl}\rangle$ с различными концентрациями таллия N_{Tl} и степенью компенсации его акцепторного действия собственными дефектами (это достигалось введением в шихту сверхстехиометрического свинца $\text{Pb}_{\text{изб}}$). Роль собственных дефектов в формировании спектров $\alpha(\hbar\omega)$ в $\text{PbS}\langle\text{Tl}\rangle$ была выяв-