

ЭНЕРГИЯ АКТИВАЦИИ АКЦЕПТОРНОГО УРОВНЯ ПРИМЕСИ БОРА В $Ge_{1-x}Se_x$

Р.З.КЯЗИМЗАДЕ

Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия
370012, Баку, пр. Азадлыг, 20

На основе холловских измерений твердых растворов $Ge_{1-x}Si_x$ в интервале 6-300 К определены энергии основного состояния мелкого акцепторного уровня примеси бора в кристаллах различного состава ($0 \leq x \leq 0,3$). Исследования проведены на кристаллах, выращенных без специального легирования.

Показано, что энергия активации мелких акцепторов (ϵ) растет линейно с концентрацией кремния в исследованных составах кристаллов и описывается соотношением: $\epsilon_e = (10,2 + 28,4x)$ мэВ. Показано, что теория эффективной массы дает только качественное согласие с экспериментальной зависимостью ϵ от состава. С увеличением концентрации кремния в кристалле, короткодействующая часть потенциала примесного остова растет. Характер изменения энергии активации мелких акцепторов и величина короткодействующей части потенциала примесного центра с составом $Ge_{1-x}Si_x$ согласуется с представлением модели виртуального кристалла для твердых растворов.

Мелкие примеси играют важную роль в физике полупроводников и обладают особыми свойствами, допускающими универсальное описание их энергетических состояний. К разряду мелких акцепторов в Si и Ge, относятся элементы III группы периодической системы. Теоретические значения энергии связи основного состояния мелких акцепторов в ϵ Si и Ge, полученные в рамках метода эффективной массы, составляют 31,56 мэВ и 9,73 мэВ [1]. Экспериментально определенные значения энергии связи мелких акцепторов в Si и Ge, как правило, превышают теоретические и зависят от природы примеси. Отличие теоретических и экспериментальных значений ϵ связано с неправильным учетом в теории короткодействующей части потенциала примесного остова, которая создает заметное увеличение энергии связи основного состояния [1]. Наиболее близкими к теоретическим значениям ϵ в Si и Ge являются энергии связи примеси бора, которые равны 44,5 мэВ в Si и 10,47 мэВ в Ge [1].

Известно, что кристаллы твердых растворов $Ge_{1-x}Se_x$, выращенные без специального легирования методами подпитки расплава и кристаллизацией из большого объема, содержат мелкие акцепторные центры с концентрацией $\sim 10^{14} + 10^{15} \text{ см}^{-3}$ [2]. В работе [3] показано, что эти центры являются атомами бора.

Настоящая работа посвящена установлению закономерности изменения энергии основного состояния неконтролируемых мелких акцепторов (бора) в кристаллах $Ge_{1-x}Se_x$ ($0 \leq x \leq 0,3$) с составом твердого раствора и оценке влияния короткодействующего потенциала на величину ϵ .

Однородные кристаллы твердых растворов германий-кремний с содержанием кремния до 30 ат.% получались методом выращивания из большого объема. Для исследований энергий связи мелких акцепторов из кристаллов отбирались образцы с наименьшей концентрацией примесных центров $\sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Как известно, при больших концентрациях примеси наблюдаются эффекты, связанные с влиянием концентрации на величину ϵ [4].

Энергию активации мелких акцепторов определяли из холловских измерений в интервале 6-300 К. Концентрацию свободных дырок P вычисляли из данных коэффи-

циента Холла и холл-фактора [5]. Анализ данных проводили на основании уравнения электронейтральности для случая с частичной компенсацией примесного уровня [6].

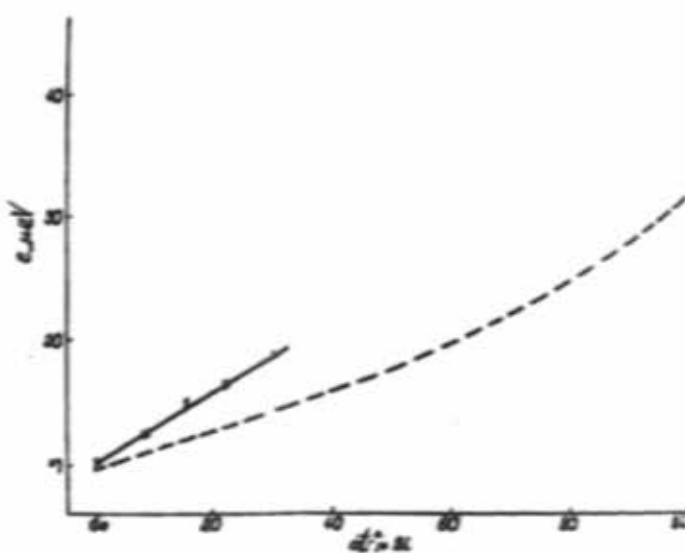


Рис. 1. Зависимость энергии основного состояния мелких акцепторов от состава кристалла $Ge_{1-x}Se_x$. Крестиками обозначены экспериментальные данные, пунктирная линия теоретическая, рассчитанная в рамках метода эффективной массы.

На рис. 1. крестиками обозначены экспериментальные значения ϵ в германии и $Ge_{1-x}Se_x$, полученные из наклонов зависимостей $\lg(P T^{-3/2})$ от $10^3/T$ в области температур $\sim 6-20$ К. Германий, выращенный в тех же условиях, что и сплавы, являлся контрольным образцом. В кристалле с содержанием кремния 30 ат.% значение ϵ составляет $\sim 18,7$ мэВ и почти на 90 % превышает энергию активации мелких акцепторов в германии, равную $\sim 10,2$ мэВ. Сравнение значения ϵ , полученного для Ge с литературными данными, показывает наибольшую вероятность связи этих уровней с атомами бора, в соответствии с результатами ранней работы [3]. Определенная

оптическим методом энергия активации бора в германии составляет, как было указано выше, 10,47 мэВ [1].

Несколько заниженное значение ϵ , полученное в настоящей работе, можно отнести на счет различий в применяемых методиках и на относительно большую концентрацию компенсируемых примесей в наших кристаллах.

Как видно из рис. 1, в исследуемых составах кристаллов имеет место практически линейный рост ϵ с концентрацией кремния, который описывается соотношением:

$$\epsilon_x = (\epsilon_0 + 28,4x) \text{ мэВ}$$

Здесь ϵ_0 - энергия связи мелких акцепторных центров (бора) в германии, x - доля атомов кремния в кристалле.

В рамках теории эффективной массы рост ϵ с увеличением содержания кремния в кристаллах может быть связан как с утяжелением эффективных масс дырок, так и с уменьшением диэлектрической проницаемости полупроводника. Кроме того, заметное влияние на рост ϵ может оказать усиление короткодействующего потенциала примесного остова с содержанием кремния в кристалле. Усиление короткодействующего потенциала примесного остова с содержанием кремния в $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$ следует ожидать, основываясь на том, что отличие экспериментальных значений ϵ от теоретических, полученных в рамках метода эффективной массы, составляет в Ge ~7,6% а в Si ~41% (см. выше).

Анализ полученной зависимости энергии связи мелких акцепторов от состава кристалла в рамках метода эффективной массы требует знания значений диэлектрической проницаемости и эффективных масс легких (m_0) и тяжелых (m_1) дырок в $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$.

В расчетах принималось, что диэлектрическая проницаемость в кристаллах меняется линейно с составом, что в первом приближении согласуется с экспериментальным результатом [7]. (Отметим, что диэлектрические проницаемости Ge (~15) и Si (~11,4) отличаются менее, чем на 30%). Эффективные массы легких и тяжелых дырок определялись с помощью интерполяционной процедуры [8] с использованием параметров составных компонентов. При этом, согласно данным работы [8], считалось, что с изменением состава кристалла оптические матричные элементы между различными зонами в центре зоны Бриллюэна остаются неизменными, а величины энергетических интервалов между этими зонами изменяются линейно.

Рис. 2 демонстрирует зависимости эффективных масс легких и тяжелых дырок от состава $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$, полученные интерполяционной процедурой. Как видно, массы как легких, так и тяжелых дырок монотонно растут с содержанием кремния в кристалле.

На рис. 1 пунктирная линия показывает теоретическую зависимость ϵ от состава кристалла, рассчитанного

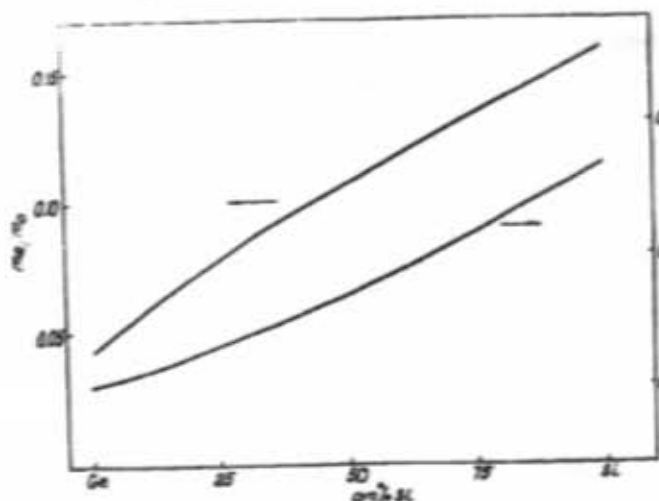


Рис. 2. Эффективные массы легких (m_0) и тяжелых (m_1) дырок в кристаллах $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$, рассчитанные с помощью интерполяционной процедуры [8] с использованием параметров составных компонентов.

с помощью графика зависимости энергии основного состояния мелкого акцепторного уровня от отношения масс легкой и тяжелой дырок, полученного в работе [9]. Как видно из рис. 1, теория эффективной массы лишь качественно описывает изменение ϵ от состава $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$. Различие в экспериментальных и теоретических значениях растет с увеличением кремния в кристалле. Так, например, в кристаллах с 15 ат.% и 30 ат.% Si это различие составляет ~20,5% и 30,9%, соответственно. Такой характер расхождения между экспериментальными и теоретическими значениями ϵ в $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$ свидетельствует о существенном росте короткодействующей части потенциала центральной ячейки с увеличением кремния в твердом растворе.

Выводы

В твердых растворах $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$ ($0 \leq x \leq 0,3$) энергия основного состояния мелких акцепторов (бора) растет линейно с содержанием кремния в кристалле. Теоретическая зависимость ϵ от состава $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$, рассчитанная в рамках метода эффективной массы, качественно согласуется с экспериментальными данными. С увеличением концентрации кремния в кристалле короткодействующая часть потенциала примесного остова растет. Характер изменения энергии активации мелких примесных центров и короткодействующей части потенциала примесного остова с составом $\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_x$ согласуется с представлениями модели виртуального кристалла для твердых растворов.

[1] F. Bassani, G. Iadonisi, B. Preziosi. Reports on Prog. Phys., 1974, v. 37, p. 1099-1118.

[2] В.В. Мур-Багиров. Спектр основных примесных состояний меди в кристаллах твердых растворов

германий-кремний. Дис. канд. физ.-мат. Наук, Баку, 1992, 102 с.

[3] Г.Х. Аждаров, А.С. Ганиев, М.Г. Шахматовский. Доклады АН Азерб. ССР, 1981, т. 17, № 8, с. 36-40.

- [4] Н.А. Пенни, Б.Г. Журкин, Б.А. Волков. РТТ, 1965, т. 7, № 11, с. 3188-3193.
- [5] Н.А. Агаев. Холл-фактор и подвижность свободных носителей зарядов в кристаллах твердых растворов германий-кремний. Дис. канд. физ.-мат. наук, Баку, 1990, 121 с.
- [6] Д. Блекмор. Статистика электронов в полупроводниках. М., Изд. Мир, 1964, 392с.
- [7] M. Glisman. Phys. Rev., 1958, v. 111, № 1, p. 125-128.
- [8] R. Braunstein. Phys. Rev., 1963, v.130, №3, p. 869-879.
- [9] Б.Л. Гельмонт, М.Н. Дьяконов. ФТП, 1971, т. 5, № 11, с. 2191-2193.

R.Z. Kazınzade

$Ge_{1-x}Si_x$ -DƏ BOR AŞQARININ AKSEPTOR SƏVIYYƏSİNİN AKTİVLƏŞMƏ ENERJİSİ

$Ge_{1-x}Si_x$ ($0 \leq x \leq 0,3$) bərk məhlullarının 6-300 K temperatur intervalında Hall ölçüləri əsasında bor aşqarının dayaz akseptor səviyyəsinin əsas halının enerjisi təyin edilmişdir. Tədqiqat xüsusi aşqarlama olmayan kristallarda aparılmışdır.

Göstərilmişdir ki, tədqiq olunmuş kristallarda borun dayaz akseptor səviyyəsinin aktivləşmə enerjisi kremniyumun artması ilə artır və aşağıdakı kimi ifadə olunur: $\epsilon_x = (10,2 + 28,4x)$ meV.

Effektiv kütlə nəzəriyyəsi ϵ -nin tərkibdən eksperimental asılılığı ilə ancaq kəmiyyətce uzlaşır. Kristalda kremniyumun konsentrasiyasının artması ilə aşqar mərkəzin potensialının qısa məsafədə təsir edən hissəsi artır. Dayaz akseptorların aktivasiya enerjisinin dəyişmə xarakteri və aşqar mərkəzin potensialının qısa məsafədə təsir edən hissəsinin qiyməti $Ge_{1-x}Si_x$ -in tərkibindən asılı olaraq bərk məhlullar üçün virtual kristalın modelinə uyğun gəlir.

R.Z. Kyazınzade

ACTIVATION ENERGY OF BORON IMPURITY ACCEPTOR STATE IN $Ge_{1-x}Se_x$

On the basis of the Hall measurement of $Ge_{1-x}Se_x$ solid solutions in the range 6-300 K the ground-state energies of the shallow acceptors (B) in different crystal compositions ($0 \leq x \leq 0,3$) are determined. The investigations are carried out on crystals grown without special doping.

It is shown that the activation energy of the shallow acceptors increases linearly with silicon concentration in investigated crystal compositions and is described by the relation: $\epsilon_x = (10,2 + 28,4x)$ meV. It is shown that the effective mass theory gives only qualitative agreement with the experimental values of ϵ vs composition. It is shown that the central core effect part of the impurity potential rises with increasing of silicon concentration in the crystals.

Дата поступления: 10.01.97

Редактор: Б.Г. Тагиев