

ПЕРВОЕ АКЦЕПТОРНОЕ СОСТОЯНИЕ ЗАМЕЩАЮЩИХ АТОМОВ ПРИМЕСИ НИКЕЛЯ В СИСТЕМЕ $Ge_{1-x}Si_x$

Р.З. КЯЗИМЗАДЕ

*Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия
370010, Баку, пр.Азадлыг, 20*

Представлены результаты исследований энергии связи первого акцепторного состояния замещающих атомов примеси никеля (Ni_i) в кристаллах $Ge_{1-x}Si_x$ ($0 \leq x \leq 0.3$), полученные на основе холловских измерений. Показано, что усредненная энергия активации первого уровня Ni_i в $Ge_{1-x}Si_x$ изменяется линейно с составом в соответствии с моделью виртуального кристалла для твердых растворов и описывается уравнением: $E_1^x = E_v + (0,23 + 0,2x)$ эВ.

Никель относится к разряду глубоких примесных центров в Ge, Si и в их твердых растворах. В германии, легированном никелем, обнаружены два акцепторных уровня: $E_v + 0,23$ эВ и $E_c - 0,30$ эВ [1]. Равенство концентраций этих уровней позволяет отнести эти уровни к замещающим атомам никеля (Ni_i) в Ge. Имея два электрона на внешней электронной оболочке, атом никеля, замещая атом четырехвалентного германия в узле решетки, может принять два электрона из валентной зоны и завершить восполнение связей в решетке кристалла. Наличие никеля в Si также приводит к образованию двух акцепторных уровней [1]: $E_v + 0,23$ эВ и $E_c - 0,35$ эВ. О соотношении концентраций этих уровней и их идентификации в литературе сведений нет. Акцепторные уровни никеля исследовались и в германиеподобных составах твердых растворов $Ge_{1-x}Si_x$ ($0 \leq x \leq 0.15$) на основе холловских измерений [2]. Было показано, что увеличение концентрации Si в кристалле приводит к росту энергии активации уровней, наблюдаемых в германии.

В настоящей работе приводятся результаты исследований энергии активации первого акцепторного уровня (E_1) Ni_i в $Ge_{1-x}Si_x$, охватывающих как германие- так и кремниеподобные составы ($0 \leq x \leq 0.30$), с целью установления закономерностей изменения E_1 с составом кристалла, а также связи акцепторных уровней, наблюдаемых в кремнии, легированном Ni с замещающими атомами этой примеси.

Кристаллы системы $Ge_{1-x}Si_x$, с содержанием кремния до 30 ат.%, получали методом выращивания из большого объема [3]. Образцы размерами $(1 \div 2) \times (2 \div 3) \times (12 \div 15)$ мм³, вырезанные из этих кристаллов, после соответствующей обработки и очистки поверхности [4], легировали никелем диффузионным методом при 1050-1150 К. Исходная эффективная концентрация мелких акцепторных (N_a) и донорных (N_d) примесей, а также никеля в образцах составляла $10^{14} - 10^{15}$ см⁻³. Энергию активации исследуемого уровня определяли на основе холловских измерений в интервале 77-350 К. В зависимости от исходной концентрации мелких акцепторных и донорных примесей, а также температуры диффузионного легирования образцов никелем в холловских измерениях проявляется первое или второе акцепторное состояние Ni_i . При этом первое акцепторное состояние Ni_i проявляется в образцах с дырочной проводимостью, а второе - с электронной, как и в случае германия [1]. Результаты исследований большого набора образцов, в которых проявляется первое акцеп-

торное состояние Ni_i с различной степенью компенсации, показывают следующие особенности: зависимости концентрации свободных дырок от T не описываются уравнением электрической нейтральности в рамках локального уровня с определенной энергией активации; увеличение степени компенсации уровня Ni_i приводит к росту его эффективной энергии активации. Эти особенности не имеют место в случае простых полупроводников и наблюдаются только в кристаллах твердых растворов, свидетельствуя о размытии глубоких уровней в последних. О размытии глубоких уровней в кристаллах твердых растворов сообщалось и ранее (см, например [5-7]). Причиной такого размытия является следующее обстоятельство [5]. Волновые функции глубоких примесей локализованы в непосредственной близости от этих центров и охватывают относительно небольшие объемы матрицы. Эти объемы в силу хаотического характера распределения атомов компонентов твердого раствора (Ge и Si) будут отличаться друг от друга по составу. Так как энергия связи электрона (дырки) примеси зависит от композиции ближайшего окружения примеси, в котором волновая функция центра отлична от нуля, то вместо локальных уровней с одинаковой E , отвечающей энергии активации примесного центра в простом полупроводнике, в системе твердых растворов будет иметь место размытия уровней в зону. Учитывая это обстоятельство, в твердых растворах оперируют понятием усредненной энергии связи (активации) глубокого примесного центра. За величину этого параметра для первого уровня Ni_i , как и в [6], принято такое значение E_1 , которое в уравнении электрической нейтральности наилучшим образом описывает ход экспериментальной кривой концентрации свободных дырок от T в кристаллах с нулевой степенью компенсации примесного уровня. Уравнение электрической нейтральности для этого случая имеет вид [8]:

$$\frac{p^2 - N_a}{(N_{Ni} + N_a) - p} = \frac{2(2\pi m_p^* kT)^{3/2}}{\gamma \exp(E_1/kT)} \quad (1)$$

Здесь N_{Ni} - концентрация замещающих атомов никеля; m_p^* - эффективная масса плотности состояний дырок в валентной зоне; N_a - эффективная концентрация мелких акцепторов, шунтирующих исследуемый уровень;

γ -фактор вырождения уровня. В расчетах γ принимался равным четырём [7]. Для значений m_p^* в кристаллах различного состава использовались данные работы [9]. Значения N_{Ni} и E_1 определялись путём подгонки расчетных кривых на основе (1) к экспериментальным данным с использованием метода наименьших квадратов. Результаты проведенных исследований показывают, что усредненная энергия активации первого акцепторного состояния Ni_s в $Ge_{1-x}Si_x$ растёт линейно с концентрацией кремния и описывается уравнением:

$$E_1^x = E_v + (E_1^0 + 0,2x) \text{ эВ}, \quad (2)$$

где $E_1^0=0,23$ эВ – энергия активации Ni_s в Ge. Согласно (2) энергия активации Ni_s в Si составляет: $E_v+0,43$ эВ. Этот результат показывает, что наблюдаемые в ле-

гированном никелем кремнии акцепторные уровни $E_v+0,23$ эВ и $E_c-0,35$ эВ= $E_v+(\Delta E_{Si}-0,35 \text{ эВ})=E_v+0,76$ эВ ($\Delta E_{Si}=1,11$ эВ – ширина запрещенной зоны Si [10]) не относятся к замещающим атомам этой примеси и имеют иную природу.

Результаты исследований энергетического спектра примесных состояний в дырочных кристаллах $Ge_{1-x}Si_x$ с примесью никеля позволяют сделать следующее заключение. Энергия активации первого акцепторного уровня Ni_s растёт линейно с содержанием кремния в кристалле и во всём ряду твердых растворов уровень находится в нижней половине запрещенной зоны, как и в Ge. Отсутствие литературных данных по этому уровню в Si, очевидно связано с малой растворимостью Ni_s в этом полупроводнике, как и в случае примеси меди [11]. Линейный рост энергии активации Ni_s с концентрацией Si в $Ge_{1-x}Si_x$ согласуется с представлениями модели виртуального кристалла для твердых растворов.

- | | |
|--|--|
| [1] А.Милнс. В кн. "Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках", "Мир", 1977, с.562. | [6] Р.З.Кязимзаде. ФТП, 1995, т. 29, № 6, с. 1101-1104. |
| [2] Г.Х. Аждаров, В.И. Тагиров. ФТП, 1971, т. 5, № 6, с. 1107-1110. | [7] G.Kh. Azhdarov, R.Z.Kyazimzade. Turkish Journal of Physics, 1996, v. 20, № 3, p. 269-274. |
| [3] В.И. Романенко. В кн. "Управление составом полупроводниковых кристаллов", Москва, "Металлургия", 1976, с. 368. | [8] Д. Блекмор. В кн. "Статистика электронов в полупроводниках", Москва, "Мир", 1964, с.392. |
| [4] I. Kamiura and F. Hashimoto. Phys.Stat.Sol., 1979, 54 (a), p. 697-700. | [9] Р.З. Кязимзаде. Докторская диссертация, Баку, 1998, с. 347. |
| [5] L. Samuelson. In Proc. 13-th Intern. Conf. On Defects in Semiconductors, Coronado, CA, 1984; publ. By metal Society of AIME, Warrendale, PA (1985), p.101. | [10] Srinivasan, Krishnamurthy, A. Sher, A. Chen. Phys.Rev. (B), 1986, v. 33, № 2, p. 1026-1035. |
| | [11] Г.Х.Аждаров, Р.З.Кязимзаде, В.В.Мур-Багиров. ФТП, 1992, т. 26, № 3, с. 553-556. |

R.Z. Kazimzade

Ge_{1-x}Si_x SİSTEMİNDƏ QƏFƏS DÜYÜNLƏRİNDƏ YERLƏŞƏN NİKEL ATOMLARININ BİRİNCİ AKSEPTOR HALI

Xoll ölçmələri əsasında alınan, $Ge_{1-x}Si_x$ ($0 \leq x \leq 0.3$) kristallarında qəfəs düyünlərində yerləşən nikel aşqarı atomlarının (Ni_s) birinci akseptor halının rabitə enerjisinin tədqiq nəticələri gətirilir. Göstərilmişdir ki, bərk məhlullar üçün virtual kristal modelinə uyğun olaraq, $Ge_{1-x}Si_x$ -də Ni_s -in birinci akseptor səviyyəsinin aktivləşmə enerjisi tərkibdən asılı olaraq xətti dəyişir və $E_1^x = E_v + (0,23 + 0,2x) \text{ eV}$ ifadə ilə təyin olunur.

R.Z. Kyazimzade

THE FIRST ACCEPTOR STATE OF SUBSTITUTIONAL NICKEL IMPURITY ATOMS IN Ge_{1-x}Si_x SYSTEM

The investigation results of the first acceptor state binding energy of the substitutional Nickel impurity atoms (Ni_s) in $Ge_{1-x}Si_x$ ($0 \leq x \leq 0.3$) crystals are given, on the basis of Hall measurements. It is shown, that the average activation energy of the first Ni_s acceptor level varied linearly with composition in $Ge_{1-x}Si_x$, due to the virtual crystal model for solid solutions and could be described by the relationship: $E_1^x = E_v + (0,23 + 0,2x) \text{ eV}$.