

## МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ ГЛУБОКИЕ ЦЕНТРЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$

Н. Т. Баграев, А. Юсупов

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021,  
Санкт-Петербург, Россия  
(Получена 21 июня 1993 г. Принята к печати 28 июня 1993 г.)

В монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  различного состава исследовались глубокие амфотерные центры золота и  $DX$ -центры. Данные температурных зависимостей фотохолловских измерений, а также спектры тушения и регенерации фотопроводимости, fotoемкости и фотоиндексированной долговременной проводимости (persistent conductivity) свидетельствуют об определяющей роли  $L$ -долины зоны проводимости в формировании уровня коррелированного электрона двухэлектронного глубокого центра, в то время как уровень его фонового электрона в запрещенной зоне  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  преимущественно формируется из волновых функций либо валентной зоны, либо  $X$ -долины зоны проводимости. Предлагаются модели глубоких амфотерных центров, учитывающие взаимосвязь их метастабильных свойств со структурой зоны проводимости монокристаллов  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ .

Монокристаллические объемные и двумерные слои  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  привлекают большое внимание в связи с широкими возможностями их использования для целей микро- и оптоэлектроники [1, 2]. Определенные трудности представляет получение монокристаллов  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$   $n$ -типа проводимости при значениях  $x > 0.15$ , которые, несмотря на высокую концентрацию доноров фосфора, имеют большое удельное сопротивление, что часто сопровождается  $n-p$ -конверсией материала [3, 4]. Подобные явления самокомпенсации наблюдались в твердых растворах  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  при условии образования в решетке кристалла метастабильных глубоких  $DX$ -центров за счет реконструкции мелких доноров, находящихся вблизи атомов алюминия [5, 6].

В настоящей работе показано, что аналогичные глубокие дефекты на основе реконструированных доноров фосфора ответственны за самокомпенсацию в монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , которая значительно усиливается при увеличении процентного содержания германия. Кроме того, варьирование состава  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  позволяет идентифицировать принадлежность уровней фонового (основного) и коррелированного (внешнего) электронов двухэлектронного глубокого центра той или иной долине зоны проводимости либо валентной зоне, что будет также продемонстрировано далее на примере исследования свойств амфотерных центров золота и  $DX$ -центров.

### Эксперимент

В работе использовались образцы  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  различного состава ( $x = 0 \div 0.4$ ), легированные фосфором [ $N(\text{P}) = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ] в процессе выращивания из расплава методом электронно-лучевой бестигельной зонной плавки [3, 4].

Холловские измерения были выполнены как в отсутствие светового облучения, так и после оптической накачки межзонным светом, источником которого служила лампа накаливания. Пример температурной зависимости электронной концентрации  $n$  для  $\text{Si}_{0.74}\text{Ge}_{0.26}$ , определенной из холловских изме-

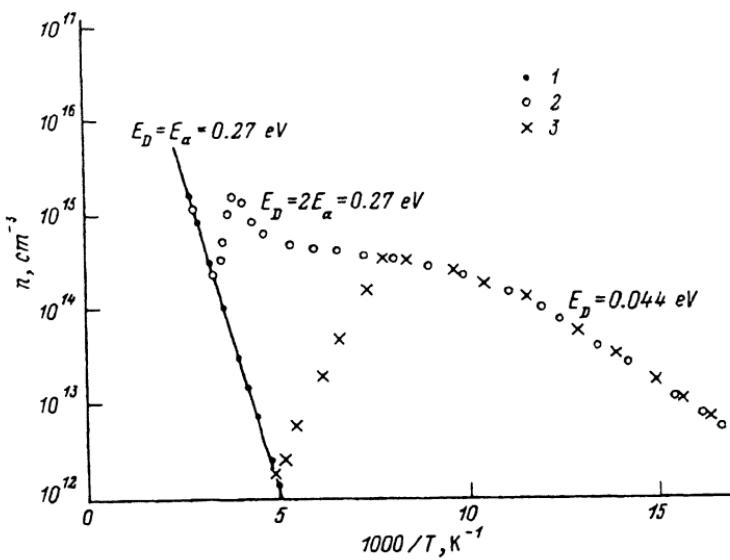


Рис. 1. Температурная зависимость холловской концентрации в монокристалле  $\text{Si}_{0.74}\text{Ge}_{0.26}$   $n$ -типа проводимости. Измерения проводились при охлаждении монокристалла в темноте (1), при увеличении температуры после облучения межзонным светом при  $4.2 \text{ K}$  (2) и в процессе охлаждения после облучения межзонным светом при  $T = 200 \text{ K}$  (3).

рений, представлен на рис. 1. Образцы с различным процентным содержанием германия ( $x = 0 \div 0.4$ ) демонстрировали аналогичное поведение  $n(T)$  с некоторыми отличиями в области ( $1000/T = 3 \div 7$ ) после оптической накачки.

Диоды Шоттки для емкостных измерений изготавливались путем осаждения золота на грань, перпендикулярную длине монокристалла  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , ориентированной вдоль оси [111], что обеспечивало ориентацию электрического поля в диоде Шоттки строго вдоль выделенного кристаллографического направления. Это имеет большое значение при исследовании метастабильных глубоких центров с помощью емкостных методик [7-9]. DLTS-измерения были выполнены методически аналогично [5, 6, 10-12] при различных значениях величины электрического поля, что позволило определить энергию эмиссии и захвата электронов, которые обусловлены присутствием глубоких центров в монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  различного состава (рис. 2). Спектральные зависимости фотоемкости (рис. 3) регистрировались при  $T = 86 \text{ K}$  в условиях монохроматической подсветки, которая создавалась с помощью лампы накаливания в комбинации с двойным монохроматором.

Спектральное распределение фотопроводимости исследовалось при  $T = 77 \text{ K}$  в условиях различных длин волн и времен предварительной монохроматической накачки. Обнаружены интервалы энергий света предварительной накачки, приводящие к тушению сигнала фотопроводимости во всем спектре (рис. 4). Кроме того, было обнаружено, что спектр фотопроводимости может восстанавливаться при последующем облучении образцов светом с энергией, соответствующей генерации фотоемкостного сигнала (рис. 3). Вышеописанные эффекты тушения и регенерации фотопроводимости имели метастабильный характер в области низких температур и не исчезали при выключении света накачки. После каждого цикла (тушение — регенерация) производилось термическое восстановление сигнала фотопроводимости путем нагрева образца до комнатной температуры и последующего охлаждения до  $77 \text{ K}$ . Следует отметить, что на рис. 4 приведена спектральная зависимость тушения межзонной фотопроводимости, но подобное тушение так же как и регенерация

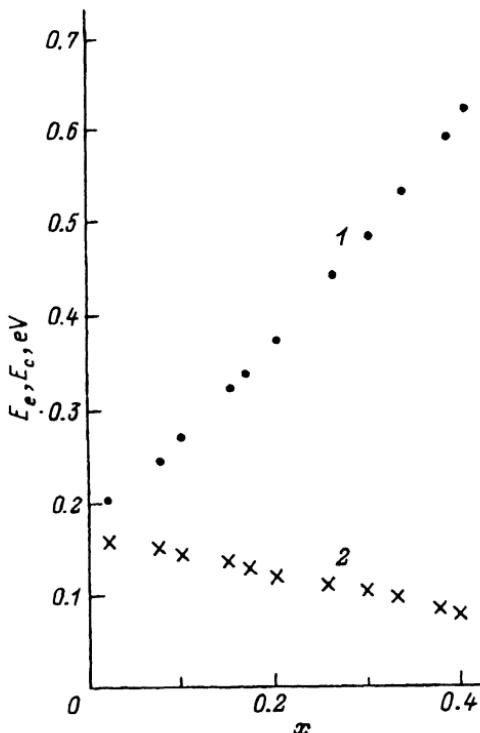


Рис. 2. Зависимость энергий термоионизации  $E_i$  (1) и захвата  $E_c$  (2) коррелированного электрона, принадлежащего  $DX$ -центру в монокристалле  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , от содержания германия  $x$  (по данным DLTS-измерений).

наблюдались во всем спектре фотопроводимости нелегированных монокристаллов  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ .

Аналогичные эффекты тушения и регенерации фотопроводимости были зарегистрированы в монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , легированных золотом путем высокотемпературной диффузии ( $1200^\circ\text{C}$ ) с последующей закалкой в масле (рис. 5). Кроме того, при облучении монохроматическим светом было обнаружено фотоиндуцированное уменьшение проводимости в монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ : Au различного состава (рис. 6, a), которое сохранилось при низких температурах после выключения света накачки и восстанавливалось только при последующем облучении светом большей энергии (рис. 6, b). Иными словами, в монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , легированных золотом, был обнаружен эффект отрицательной замороженной (persistent) фотопроводимости, обусловленный присутствием уровня коррелированного электрона глубокого центра в зоне проводимости [13, 14].

Полученные результаты будут рассмотрены далее в рамках модели глубокого центра с немонотонной зависимостью константы электрон-колебательного взаимодействия от зарядового состояния [8, 9, 15, 16].

### Результаты и их обсуждение

Следуя интерпретации фотохолловских измерений, предложенной для  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As} : DX$  [17, 18], выделим на температурной зависимости  $n(T)$  три участка (рис. 1).

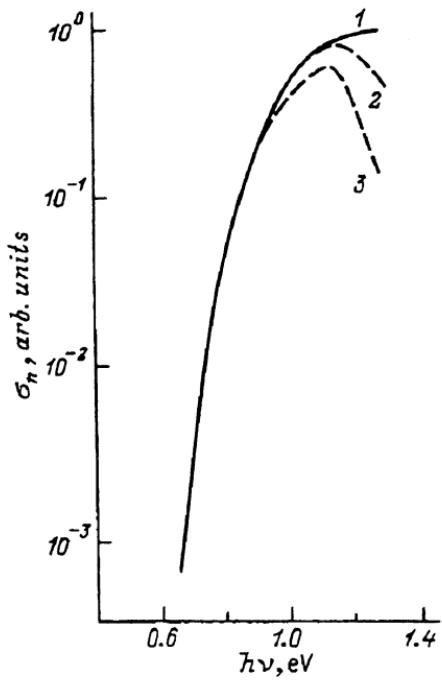


Рис. 3. Спектральная зависимость сечения фотоионизации  $D^-$ -состояния  $DX$ -центра  $\sigma_n$  (по данным измерений fotoемкости) в монокристаллах: 1 —  $Si_{0.84}Ge_{0.16}$ , 2 —  $Si_{0.74}Ge_{0.26}$ , 3 —  $Si_{0.66}Ge_{0.34}$ .

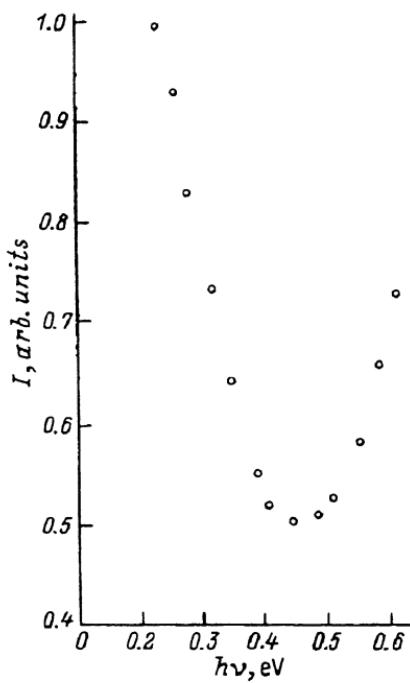


Рис. 4. Спектральная зависимость тушения межзонной фотопроводимости в монокристалле  $Si_{0.74}Ge_{0.26}$  в условиях предварительной монохроматической накачки.

В процессе охлаждения образца  $Si_{1-x}Ge_x$  от комнатной температуры до 200 К (интервал  $1000/T = 3 \div 5$ ) наблюдается монотонное уменьшение  $n$ , которое в отсутствие светового облучения является обратимым при последующем увеличении или уменьшении температуры. Активационная энергия данного процесса (0.27 эВ) соответствует холловской энергии ионизации глубокого донора, поскольку, согласно измерениям удельного сопротивления, при  $x > 0.15$  исследуемые монокристаллы  $Si_{1-x}Ge_x$  являются сильно компенсированными.

После светового облучения при  $T = 4.2$  К и последующего повышения температуры были индуцированы еще два участка изменения электронной концентрации на температурной зависимости  $n(T)$ : ( $1000/T = 4 \div 8$  и  $1000/T = 8 \div 17$ ). В интервале  $1000/T = 8 \div 17$  эти изменения являются обратимыми, тогда как после монотонного уменьшения при  $1000/T < 5$  поведение  $n$  необратимо и соответствует данным измерений, проведенных в отсутствие светового облучения (рис. 1). Энергия активации проводимости в интервале  $1000/T = 8 \div 17$  совпадает с энергией ионизации мелкого донора фосфора ( $E_D = 0.044$  эВ), компенсированного глубокими центрами. Причем ход температурной зависимости  $n(T)$  выявляет наличие области «истощения» мелких доноров при  $1000/T < 10$ , которая показывает, что его концентрация [ $N(P) = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ] меньше концентрации глубоких центров с энергией активации 0.135 эВ, «проявившихся» при  $1000/T < 5$  (рис. 1). Следует отметить, что облучение образца  $Si_{1-x}Ge_x$  межзонным светом после охлаждения до 200 К также индуцирует избыточную концентрацию электронов, которая вымораживается при захвате на мелкие доноры фосфора при последующем снижении температуры (рис. 1).

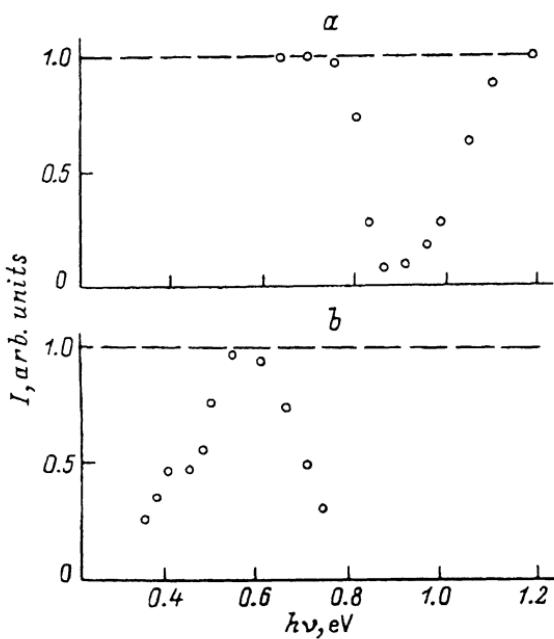


Рис. 5. Спектральная зависимость туннеляния (а) и регенерации (б) межзонной фотопроводимости в монокристалле  $\text{Si}_{0.98}\text{Ge}_{0.02} : \text{Au}$ .

Аналогичные температурные зависимости  $n$  были зарегистрированы для всех исследованных образцов с различным процентным содержанием германия ( $x = 0 \div 0.4$ ). Их отличительной особенностью было постепенное исчезновение с ростом  $x$  пика с энергией активации  $E_a = 0.135$  эВ и уменьшение концентрации фотоиндуцированных мелких доноров, что коррелировало с увеличением степени компенсации при  $x > 0.15$ . Данный факт в совокупности с обратимостью поведения  $n$  при  $1000/T > 8$  и  $1000/T < 4$  позволяет сделать вывод, что активационный процесс с  $E_a = 0.135$  эВ также обусловлен холловской ионизацией глубокого донора с  $E_D = 0.27$  эВ ( $E_D = 2E_a$ ), который в условиях межзонной подсветки не является столь сильно компенсированным, как в ее отсутствие (где  $E_D = E_a$ ).

Таким образом, температурные зависимости фотохолловских измерений показывают, что в монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  значительная часть мелких доноров реконструируется с образованием метастабильных глубоких доноров, которые подобно  $DX$ -центрам в  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  самокомпенсируются с увеличением  $x$ . Причем метастабильность свойств амфотерных  $DX$ -центров в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  проявляется не только при термо- и фотовозбуждении фонового электрона ( $D^0 \rightarrow D^+$ ,  $E_d = 0.27$  эВ), но и коррелированного электрона ( $D^- \rightarrow D^0$ ), на что указывает значительная разница в энергиях термо- и фотоионизации  $D^-$ —состояния (см. рис. 2 и 3) [5, 6, 12, 18–21]. Наглядно это может быть продемонстрировано с помощью двухэлектронных адиабатических потенциалов, соответствующих разным зарядовым состояниям реконструированного донора фосфора, электрон которого туннелирует при перезарядке ( $D^- \rightarrow D^0 \rightarrow D^+$ ) между позициями различной симметрии ( $C_{3v} \rightarrow C_{2v} \rightarrow D_{2d}$ ) (рис. 7) [14, 20]. Энергетический зазор между минимумами адиабатических потенциалов на рис. 7, соответствующих центрам разной симметрии, представляет собой энергию холловской ионизации коррелированного ( $-/-0$ ) и фонового ( $0/+$ ) электронов соответственно. Пересечение адиабатических потенциалов демонстрирует разницу в энергиях термоэмиссии и захвата электронов, которые

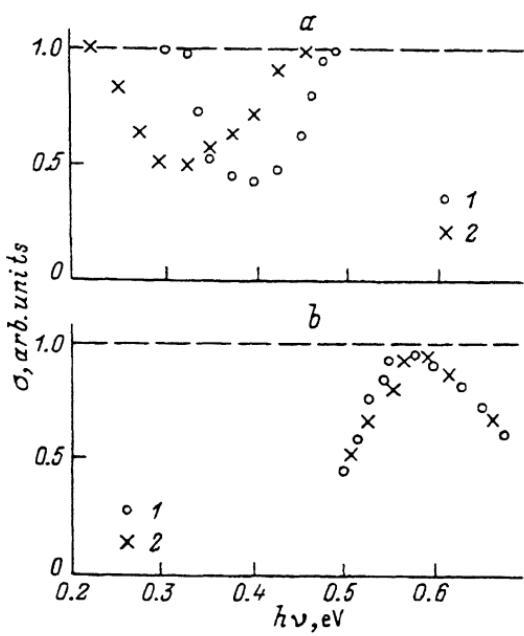
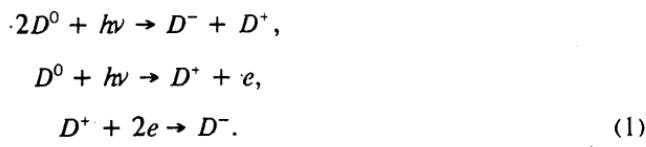


Рис. 6. Спектральная зависимость фотоиндукционного тушения (отрицательная замороженная фотопроводимость), (a) и регенерации проводимости (b) монокристаллов: 1 —  $\text{Si}_{0.48}\text{Ge}_{0.02} : \text{Au}$ , 2 —  $\text{Si}_{0.74}\text{Ge}_{0.26} : \text{Au}$ .

могут быть определены с помощью DLTS (рис. 2), тогда как дистанция между минимумами адиабатических потенциалов в отсутствие сдвига вдоль конфигурационной координаты  $Q_1$  или  $Q_2$  согласуется с энергиями фотоионизации  $D^-$ - и  $D^0$ -состояний  $DX$ -центра, полученными из спектральных зависимостей фотоемкости (рис. 3) и тушения фотопроводимости (рис. 4) [5, 20].

Как было отмечено выше, энергия холловской ионизации нейтрального состояния  $DX$ -центра в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  не зависит от процентного содержания германия (рис. 7, d; рис. 8). Это означает, что уровень фонового электрона ( $0/+$ ) «отслеживает»  $X$ -долину зоны проводимости при увеличении  $x$  (рис. 8), хотя и существует некоторое отличие между энергиями его термо- и фотоионизации (рис. 7, d). Иная ситуация возникает при рассмотрении процессов ионизации  $D^-$ -состояния  $DX$ -центра в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ . В этом случае при увеличении  $x$  наблюдаются существенные изменения в значениях энергий термоионизации и захвата электронов (рис. 2; 7, a, c), в то время как энергия фотоионизации остается постоянной (рис. 3; 7, a, b, c), что свидетельствует о принадлежности уровня коррелированного электрона  $L$ -долине зоны проводимости (рис. 8).

Одним из следствий метастабильности  $DX$ -центров, возникающей из-за наличия энергетических барьеров между позициями различных зарядовых состояний, является возможность их фотодиссоциации в процессе двухэлектронного захвата [16, 20]



Поэтому предварительное облучение монокристалла  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  монохроматическим светом с энергией, соответствующей фотоионизации фонового

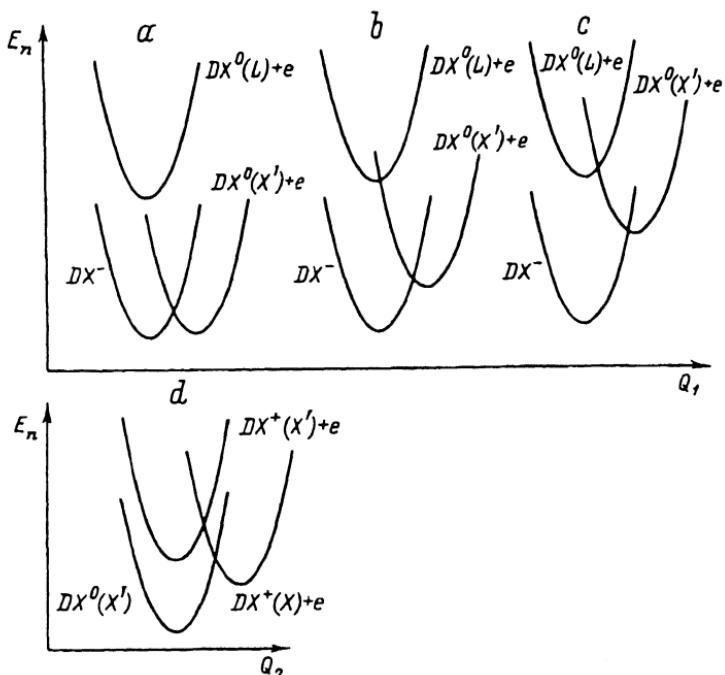


Рис. 7. Адиабатические потенциалы  $E_n$  различных зарядовых состояний  $DX$ -центра в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{P}$  в случае термо/фотовозбуждения коррелированного (a, b, c) и фонового (d) электронов. Переход от (a) к (b) соответствует увеличению значения  $x$ .

электрона  $DX$ -центра, стимулирует negative persistent conductivity и тушение фотопроводимости во всем спектре (рис. 4) [16, 20]. Данный эффект является результатом уменьшения времени жизни неравновесных носителей вследствие сильной оже-рекомбинации, которая индуцируется метастабильной ( $D^- + D'$ )-комбинацией состояний  $DX$ -центра. Максимальное тушение наблюдается при облучении светом с энергией, соответствующей фотовозбуждению фонового электрона в [110] минимум зоны проводимости (см. рис. 4; 7, d; рис. 8).

Независимым подтверждением предложенного механизма тушения фотопроводимости в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:DX$  является обнаружение ее регенерации при последующей накачке, спектр которой совпадает со спектральной зависимостью фотоионизации  $D^-$ -состояния  $DX$ -центра (рис. 3).



Следует отметить, что уменьшение энергии захвата электронов [ $(D^0 \rightarrow D^-)$ -процесс] при увеличении  $x$  усиливает степень компенсации  $DX$ -центров [ $(2D^0 \rightarrow D^- + D^+)$ ] и тем самым также снижает время жизни неравновесных носителей и соответственно стимулирует тушение сигнала фотосмкости при межзонной накачке (рис. 3).

Сравнение энергий термо- и фотовозбуждения фонового и коррелированного электронов позволило определить величины конфигурационных сдвигов при перезарядке  $DX$ -центра в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  (рис. 7). Относительные величины этих сдвигов соответствуют реальным расстояниям в решетке кристалла, между которыми глубокий реконструированный центр туннелирует при эмиссии или

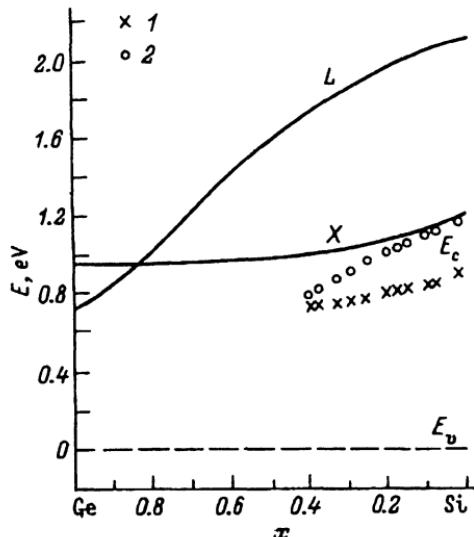


Рис. 8. Одноэлектронная зонная схема монокристалла  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x : \text{DX}$  в зависимости от содержания германия. Значками 1 и 2 показаны изменения в положении уровней фонового и коррелированного электронов амфотерного  $\text{DX}$ -центра соответственно.

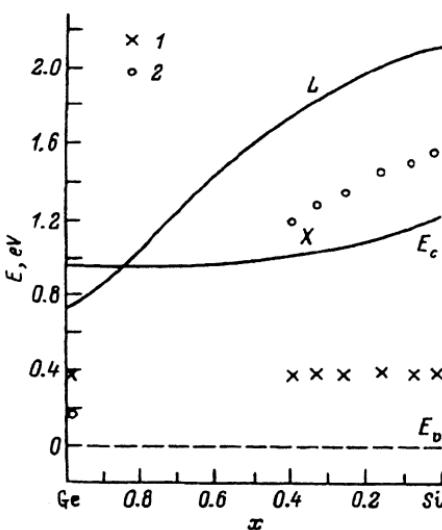


Рис. 9. Одноэлектронная зонная схема монокристалла:  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x : \text{Au}$  в зависимости от содержания германия. Значками 1 и 2 показаны изменения в положении уровней фонового и коррелированного электронов амфотерного центра золота соответственно.

захвате электронов [5, 16, 20]. Полученные на основании экспериментальных данных конфигурационные сдвиги  $\text{DX}$ -центра показывают, что реконструированный центр фосфора ( $\text{P}_\text{VSi}$ ) туннелирует при перезарядке в монокристалле  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  между позициями симметрии  $D_{2d}$  ( $D^+$ -состояние),  $C_{2v}$  ( $D^0$ -состояние) и  $C_{3v}$  ( $D^-$ -состояние).

Таким образом, по аналогии с моделью метастабильного глубокого центра, описанной в [22–24], атом фосфора сдвигается из узла решетки вдоль оси [111] в тетраэдрическое междуузлие ( $D^-$ -состояние,  $C_{3v}$ -симметрия) и соответственно вдоль осей [110] ( $D^0$ -состояние,  $C_{2v}$ -симметрия) и [100] ( $D^+$ -состояние,  $D_{2d}$ -симметрия). Кроме того, уровень коррелированного электрона ( $D^-$ -состояние) принадлежит  $L$ -долине, тогда как уровень фонового электрона ( $D^0$ -состояние) преимущественно формируется из волновых функций  $X$ -долины зоны проводимости. Подобная взаимосвязанность  $C_{2v}$ -симметрии нейтрального состояния  $\text{DX}$ -центра и принадлежности фонового электрона  $X$ -долине зоны проводимости была исследована с помощью фото-ЭПР в  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As} : \text{DX}$  при больших значениях  $x$  [25] и, по-видимому, является характерной для непрямозонных полупроводников. Использование фото-ЭПР для изучения глубоких доноров с симметрией ниже, чем  $T_d$ , является также наиболее оптимальным путем для корректной идентификации нейтрального парамагнитного состояния  $\text{DX}$ -центра в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , которое, по всей видимости, было впервые обнаружено в кремнии с малым процентным содержанием германия [26].

Аналогичное «пересечение» уровней фонового и коррелированного электронов амфотерного центра золота лежит в основе объяснения тушения фотопроводимости в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x : \text{Au}$ . Спектры фотопроводимости выявили присутствие в образцах глубокого донорного уровня  $E_\nu + 0.35$  эВ, позиция которого по отношению к валентной зоне не зависела от содержания германия в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  (рис. 9). Данный уровень, который преимущественно формируется из волновых функций валентной зоны, принадлежит нейтральному парамагнитному состоянию амфотерного центра золота (фоновый электрон), представляющему собой,

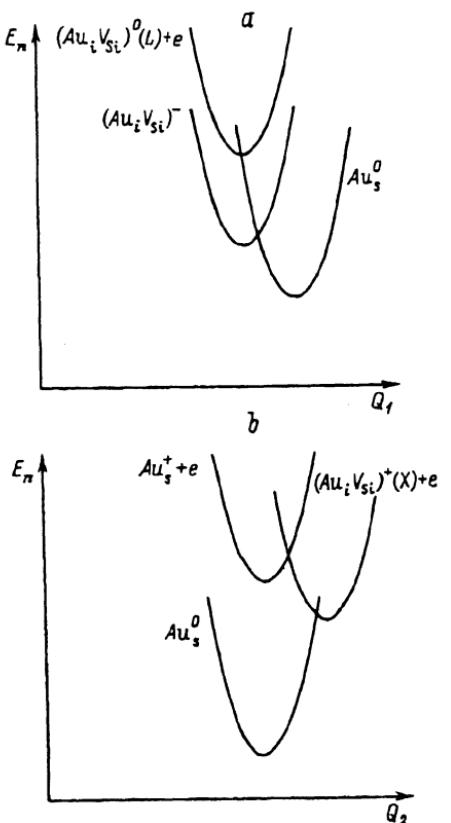


Рис. 10. Адиабатические потенциалы  $E_n$  различных зарядовых состояний амфотерного центра золота в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  (при незначительном содержании германия) в случае термо/фотовозбуждения коррелированного (a) и фонового (b) электронов.

согласно исследованиям ЭПР, центр  $T_d$  симметрии в узле решетки кремния [27]. В ходе длительного оптического возбуждения фонового электрона в зону проводимости происходит описанная выше фотодиссоциация одноэлектронного состояния центра золота в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  [см. (1)], которая стимулирует резкое снижение времени жизни неравновесных носителей и соответствующее тушение фотопроводимости (рис. 5, a). Максимум зарегистрированного тушения достигается при накачке светом с энергией  $\hbar\nu = I_1$ , где  $I_1$  — энергия ионизации фонового электрона (рис. 10). Регенерация  $D^0$ -состояния центра золота осуществлялась при последующей накачке светом с энергией  $\hbar\nu = E_g - I_1$  (рис. 5, b), индуцирующей переходы типа валентная зона — уровень фонового электрона, а также, как будет показано далее, фотоионизацию  $D^-$ -состояния в условиях фотовозбуждения коррелированного электрона в  $L$ -долину зоны проводимости.

Следует отметить, что впервые оптическое тушение и регенерация парамагнитного  $\text{Au}^0$ -центра были продемонстрированы с помощью методики оптической поляризации ядерных моментов в решетке кремния [14].

Энергетические характеристики коррелированного электрона амфотерного центра золота в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  исследовались с помощью методики отрицательной замороженной фотопроводимости, впервые обнаруженной в кремнии, легированном золотом [13], и зарегистрированной в дальнейшем в  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ :  $\text{DX}$  [20]. Возникновение подобного фотоиндукционного снижения проводимости, которое сохраняется при низких температурах после выключения монохроматической подсветки, показывает, что уровень коррелированного электрона амфотерного центра локализован в зоне проводимости. Поэтому в ходе долговременной накачки светом, индуцирующим переходы со дна зоны проводимости на уровень коррелированного электрона, происходит уменьшение концентрации электронов проводимости (рис. 6, 10). Наличие минимума в спектре снижения проводимости позволяет идентифицировать позицию уровня коррелированного электрона относительно дна зоны проводимости. Было обнаружено, что с увеличением процентного содержания германия в монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ : Au спектр отрицательной замороженной фотопроводимости сдвигается в область меньших значений энергии монохроматической накачки (рис. 6, a). Это свидетельствует о сближении уровня коррелированного электрона амфотерного центра золота и дна зоны проводимости (рис. 9). В свою очередь форма спектра оптической регенерации проводимости монокристалла  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ : Au не зависит от значения  $x$  (рис. 6, b), а ее максимум соответствует энергии оптического перехода коррелированного электрона в  $L$ -долину зоны

проводимости. Следует отметить, что впервые оптическое тушение и регенерация парамагнитного  $\text{Au}^0$ -центра были продемонстрированы с помощью методики оптической поляризации ядерных моментов в решетке кремния [14].

Энергетические характеристики коррелированного электрона амфотерного центра золота в  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  исследовались с помощью методики отрицательной замороженной фотопроводимости, впервые обнаруженной в кремнии, легированном золотом [13], и зарегистрированной в дальнейшем в  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ :  $\text{DX}$  [20]. Возникновение подобного фотоиндукционного снижения проводимости, которое сохраняется при низких температурах после выключения монохроматической подсветки, показывает, что уровень коррелированного электрона амфотерного центра локализован в зоне проводимости. Поэтому в ходе долговременной накачки светом, индуцирующим переходы со дна зоны проводимости на уровень коррелированного электрона, происходит уменьшение концентрации электронов проводимости (рис. 6, 10). Наличие минимума в спектре снижения проводимости позволяет идентифицировать позицию уровня коррелированного электрона относительно дна зоны проводимости. Было обнаружено, что с увеличением процентного содержания германия в монокристаллах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ : Au спектр отрицательной замороженной фотопроводимости сдвигается в область меньших значений энергии монохроматической накачки (рис. 6, a). Это свидетельствует о сближении уровня коррелированного электрона амфотерного центра золота и дна зоны проводимости (рис. 9). В свою очередь форма спектра оптической регенерации проводимости монокристалла  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ : Au не зависит от значения  $x$  (рис. 6, b), а ее максимум соответствует энергии оптического перехода коррелированного электрона в  $L$ -долину зоны

проводимости (рис. 9, 10). Величины конфигурационных сдвигов, определенные из спектральных зависимостей отрицательной замороженной фотопроводимости, а также из зависимостей тушения и регенерации фотопроводимости, позволяют предложить модель амфотерного центра золота, туннелирующего при перезарядке между позициями симметрии  $C_{3V}$  [ $(Au, V_{Si})^- = D^-$ ],  $T_d$  [ $(Au_s^0 = D^0)$ ] и  $D_{2d}$  [ $(Au, V_{Si})^+ = D^+$ ], что находится в хорошем согласии с данными [14].

Таким образом, исследования DLTS, температурных зависимостей фотохолловских измерений, спектральных зависимостей тушения и регенерации фотопроводимости, фотоемкости и negative persistent conductivity показывают, что уровень коррелированного электрона ( $D^-$ -состояние) глубоких амфотерных центров золота и  $DX$ -центров в монокристаллах  $Si_{1-x}Ge_x$  принадлежит  $L$ -долине зоны проводимости, в то время как нейтральное состояние этих центров преимущественно формируется из волновых функций либо валентной зоны ( $Au^0$ -центр), либо  $X$ -долины зоны проводимости [ $(P, V_{Si})^0$ -центр]. В процессе оптической или термической перезарядки центры золота и  $DX$ -центры туннелируют в решетке  $Si_{1-x}Ge_x$  между позициями различной симметрии ( $C_{3V} - T_d - D_{2d} \rightarrow$  центр золота;  $C_{3V} - C_{2V} - D_{2d} \rightarrow DX$ -центр), разделенными энергетическими барьерами, величина которых определяет метастабильность свойств глубоких дефектов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] V. Narayananur. Proc. XVIII Int. Conf. Phys. Semicond: (ed. by O. Engstrom), 3. World Scientific (1986).
- [2] D. V. Lang. Mater. Sci. Forum, 38—41, 13 (1989).
- [3] M. C. Saidov, A. Yusupov, R. S. Umerov. Письма ЖТФ, 4, 939 (1978).
- [4] M. S. Saidov, A. Yusupov, R. S. Umerov. J. Cryst. Growth, 52, 514 (1981).
- [5] D. V. Lang. In: Deep Centers in Semiconductors (ed. by S. T. Pantelides). Gordon & Breach, N. Y. (1986).
- [6] P. M. Mooney. Semicond. Sci. Techn., 6, B1 (1991).
- [7] L. Dobaczewski. Mater. Sci. Forum, 38—41, 113 (1989).
- [8] N. T. Bagraev. J. Phys. I (France), 1, 1511 (1991).
- [9] N. T. Bagraev. J. Phys. I (France), 2, 1907 (1992).
- [10] E. Calleja, E. Munoz. Sol. St. Phenomena, 10, 73 (1989).
- [11] E. Calleja, E. Munoz. Sol. St. Phenomena, 10, 99 (1989).
- [12] J. C. Bourgois, S. L. Feng, H. J. von Bardeleben. Phys. Rev. B, 40, 7663 (1989).
- [13] N. T. Bagraev, V. A. Mashkov, D. S. Poloskin. Sol. St. Commun., 55, 791 (1985).
- [14] N. T. Bagraev, I. S. Polovtsev. Mater. Sci. Forum, 83—87, 1135 (1992).
- [15] N. T. Bagraev, V. A. Mashkov. Mater. Sci. Forum, 10—12, 435 (1986).
- [16] N. T. Bagraev, V. A. Mashkov. Sol. St. Commun., 65, 1111 (1988).
- [17] M. Mizuta. Sol. St. Phenomena, 10, 65 (1989).
- [18] J. M. Langer, J. E. Dmochowski, L. Dobaczewski, W. Jantsch, G. Brunthaler. Sol. St. Phenomena, 10, 233 (1989).
- [19] T. Fujisawa, J. Yoshino, H. Kukimoto. J. Cryst. Growth, 98, 243 (1989).
- [20] N. T. Bagraev. Def. a. Diffusion Forum, 103—105, 65 (1993).
- [21] M. Kleverman, H. G. Grimmeiss, A. Litwin, E. Janzen. Phys. Rev. B, 24, 3659 (1985).
- [22] T. N. Morgan. Phys. Rev. B, 34, 2664 (1986).
- [23] J. Dabrowski, M. Scheffler. Phys. Rev. Lett., 60, 2183 (1988).
- [24] D. J. Chadi, K. J. Chang. Phys. Rev. Lett., 60, 2187 (1988).
- [25] P. M. Mooney, W. Wilkening, U. Kaufmann, T. F. Kuech. Phys. Rev. B, 39, 5554 (1989).
- [26] A. A. Бугай, Е. Н. Калабухова, В. М. Максименко, Е. И. Неймарк, Б. Д. Шанина, В. И. Шаховцов. ФТТ, 24, 1233 (1982).
- [27] N. T. Son, T. Gregorkiewicz, C. A. J. Ammerlaan. Phys. Rev. Lett., 69, 3885 (1992).

Редактор Г. А. Полянская