

# Модель зависимости термической энергии ионизации примесей от их концентрации и компенсации в полупроводниках

© Н.А. Поклонский, А.И. Сягло, Г. Бискупски\*

Белорусский государственный университет,  
220050 Минск, Республика Белоруссия  
\* Университет наук и технологий,  
59655 Лилль, Франция

(Получена 1 апреля 1998 г. Принята к печати 5 октября 1998 г.)

Развита электростатическая модель зависимости термической энергии ионизации водородоподобных примесей  $E_1$  от их концентрации  $N$  и степени компенсации  $K$  при учете экранирования ионов прыгающими по примесям электронами (дырками). Показано, что изменение  $E_1$  с ростом  $N$  и  $K$  связано с уширением примесной зоны и сдвигом ее к валентной ( $v$ ) зоне для акцепторов и зоне проводимости ( $c$ ) для доноров. Сдвиг примесной зоны объясняется уменьшением энергии сродства ионизированного акцептора к дырке (донора к электрону) из-за экранирования ионов. Плотность распределения ионов примеси по кристаллу считалась пуассоновской, а по энергии — нормальной. Плотности электронных состояний в  $v$ - и  $c$ -зонах для интервала температур определения  $E_1$  принимались как у нелегированного кристалла. Рассчитанные по предложенным формулам значения  $E_1(N, K)$  согласуются с известными экспериментальными данными для трансмутационно легированных кристаллов Ge. Дано описание зависимости от  $N$  и  $K$  термической энергии ионизации атомов Zn в  $p$ -Ge при переходе их из зарядового состояния  $(-1)$  в  $(-2)$ .

1. Для определенности будем рассматривать кристаллический полупроводник  $p$ -типа, содержащий в единице объема  $p = N_{-1} - KN$  дырок,  $N = N_0 + N_{-1}$  акцепторов в зарядовых состояниях  $(-1)$  и  $(0)$ , а также  $KN$  доноров. Здесь и далее  $N$  обозначает концентрацию основной легирующей примеси,  $K$  — степень ее компенсации.

Термическая энергия ионизации  $E_{1a}$  равна энергии, необходимой для отрыва дырки от водородоподобного акцептора за счет тепловых флуктуаций при данной температуре. Обычно величина  $E_{1a}$  определяется из анализа температурной зависимости холловской концентрации дырок  $p_H$  при забросе их в валентную ( $v$ ) зону с акцепторов. При этом полагают, что в сильном магнитном поле для трехмерного газа дырок справедливы соотношения пропорциональности [1]:

$$pT^{-3/2} \propto p_H T^{-3/2} \propto \exp\left(-\frac{E_{1a}}{k_B T}\right).$$

В этом случае термическая (холловская) энергия ионизации акцепторов

$$E_{1a} = -k_B d \ln(pT^{-3/2})/d(1/T) > k_B T, \quad (1)$$

где

$$p = 2 \left( \frac{2\pi m_{pd} k_B T}{(2\pi\hbar)^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F}{k_B T}\right) \ll K(1-K)N;$$

$k_B T$  — тепловая энергия,  $E_F > 0$  — отсчитанный от потолка  $v$ -зоны нелегированного кристалла уровень Ферми,  $m_{pd}$  — эффективная масса плотности состояний дырок,  $\hbar$  — постоянная Планка.

Здесь отметим, что для невырожденного полупроводника при низких температурах средняя тепловая длина волны дырки в  $v$ -зоне  $\pi\hbar/\sqrt{3m_{pd}k_B T}$  много больше среднего радиуса области, приходящейся на одну точечную

заряженную частицу  $(3/8\pi N_{-1})^{1/3}$ . Дырки фактически "не замечают" потенциальный рельеф "неподвижных" ионизированных примесей [2], так что хвостом плотности состояний  $v$ -зоны можно пренебречь, и выражение для  $p$  применимо.

Для описания зависимости  $E_{1a}$  от  $N$  и  $K$  развиты подходы [3–7], допускающие сравнение с экспериментальными данными [8], когда ширина примесной зоны много больше [3] или много меньше [4] тепловой энергии.

Цель работы — развить электростатическую модель зависимости термической энергии ионизации примесей от их концентрации и компенсации при произвольном соотношении между шириной примесной зоны и тепловой энергией в кристаллических полупроводниках.

2. Необходимые для расчета энергии ионизации  $E_{1a}$  по (1) уровень Ферми  $E_F$ , а также  $dE_F/dT$  находятся из уравнения электронейтральности (возбужденными состояниями нейтральных и ионизированных акцепторов пренебрегаем):

$$N_{-1} = N \int_{-\infty}^{+\infty} g_a f_{-1} d(E_a - \bar{E}_a) = p + KN, \quad (2)$$

где  $g_a = (\sqrt{2\pi}W_a)^{-1} \exp(-(E_a - \bar{E}_a)^2/2W_a^2)$  — нормальная плотность распределения уровней энергии акцепторов;  $f_{-1} = 1 - f_0 = (1 + \beta \exp((E_a - E_F)/k_B T))^{-1}$  — вероятность того, что акцептор с энергетическим уровнем  $E_a > 0$  относительно потолка  $v$ -зоны ионизован;  $\beta$  — фактор вырождения ( $\beta = 4$  для атомов Ga в Ge);  $W_a$  — эффективная ширина акцепторной зоны;  $\bar{E}_a > 0$  — средняя по кристаллу разность энергий акцептора в зарядовых состояниях  $(-1)$  и  $(0)$ .

Рассчитаем зависимость параметров акцепторной зоны  $W_a$  и  $\bar{E}_a$  от концентрации легирующих примесей и степени их компенсации.

Среднеквадратичная флуктуация  $W_z$  потенциальной энергии иона с зарядом  $ze$  при учете чисто кулоновского взаимодействия только с ближайшим точечным зарядом  $z'e$  есть [9,10]

$$W_z^2 = \sum_{z'} \int_0^{\infty} P_{z'} u_{zz'}^2 dr, \quad (3)$$

где

$$P_{z'} dr = 4\pi r^2 C_{z'} \exp \left[ -(4\pi/3)r^2 \sum_{z' \neq 0} C_{z'} \right] dr$$

— пуассоновская вероятность того, что ближайшим к иону с зарядом  $ze$  является точечный заряд  $z'e$ , расположенный на расстоянии от  $r$  до  $r + dr$ ;  $\sum_{z' \neq 0} C_{z'}$  — концентрация всех заряженных частиц,  $u_{zz'}(r) = zz'e^2/4\pi\epsilon r$  — кулоновская энергия взаимодействия двух ближайших зарядов,  $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость кристаллической решетки. Средняя по кристаллу потенциальная энергия иона с зарядом  $ze$  есть

$$\bar{U}_z = \sum_{z'} \int_0^{\infty} P_{z'} u_{zz'} dr = 0.$$

Из (3) следует среднеквадратичная флуктуация уровня энергии акцептора:

$$W_a = \sqrt{W_0^2 + W_{-1}^2} = W_{-1} \approx 1.64 \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \left( \frac{8\pi}{3} N_{-1} \right)^{1/3}. \quad (4)$$

В рамках линейной теории экранирования [11–14] считаем, что сдвиг середины акцепторной зоны  $\bar{E}_a$  к  $\nu$ -зоне обусловлен корреляционным взаимодействием подвижных отрицательно заряженных состояний неподвижных акцепторов, т.е. мигрирующих прыжковым образом по акцепторам дырок, положительно заряженных доноров и дырок  $\nu$ -зоны.

Каждый отрицательно заряженный акцептор окружен в среднем сферически-симметричным облаком экранирующих его зарядов, так что суммарный электрический потенциал  $\varphi_s(r) = -[e/4\pi\epsilon r(1 + l/\lambda)] \exp[-(r - l)/\lambda]$ , где при  $p \ll K(1 - K)N$  величина  $l \approx 0.554(N(1 + K))^{-1/3}$  определяет минимальное сближение между ионизированными примесями (с учетом прыжков дырок по акцепторам);  $\lambda$  — длина (радиус) экранирования [14]:

$$\lambda^{-2} = \frac{e^2}{\epsilon} \left( \frac{\partial N_{-1}}{\partial E_F} - \frac{\partial p}{\partial E_F} \right) \approx \frac{e^2}{\epsilon} \frac{\partial N_{-1}}{\partial E_F}. \quad (5)$$

Энергия взаимодействия акцептора в зарядовом состоянии  $(-1)$  с экранирующим его облаком равна  $-e^2/4\pi\epsilon(\lambda + l)$ ; энергия взаимодействия зарядов облака (с объемной плотностью  $-e\varphi_s(r)/\lambda^2$  и суммарным зарядом  $+e$ ) между собой есть  $e^2/16\pi\epsilon(\lambda + l)$ . Полная электростатическая энергия системы (ион и экранирующее облако) [13] суть  $3e^2/16\pi\epsilon(\lambda + l)$ . По

данным [9,10], разность средней энергии ионизованного акцептора (с экранирующим его облаком зарядов)  $\bar{E}_{-1} = I_{-1} - 3e^2/16\pi\epsilon(\lambda + l)$  и энергии нейтрального акцептора  $\bar{E}_0 \approx I_0$  определяет положение центра акцепторной зоны относительно потолка  $\nu$ -зоны:

$$\bar{E}_a = \bar{E}_{-1} - \bar{E}_0 = I_a - \frac{3e^3}{16\pi\epsilon(\lambda + l)}, \quad (6)$$

где  $I_a = I_{-1} - I_0 > 0$  — уровень энергии изолированного акцептора.

При расчете сдвига центра акцепторной зоны  $\bar{E}_a$  к  $\nu$ -зоне по (6) полагалось, что изменение энергии заряженного акцептора из-за взаимодействия с окружением много больше изменения энергии нейтрального акцептора. Действительно, по оценкам [15,16], поляризационный сдвиг уровня энергии основного состояния нейтрального акцептора при экранировании его вырожденным газом дырок  $\nu$ -зоны (когда  $l \ll \lambda$ ) составляет  $I_0 - \bar{E}_0 \approx 1.2(a_H/\lambda)^4 I_a$ , где  $a_H = e^2/8\pi\epsilon I_a$  — боровский радиус локализации дырки на изолированном акцепторе. Так как для невырожденного полупроводника  $\lambda \gg a_H$ , то  $I_0 - \bar{E}_0 \ll I_{-1} - \bar{E}_{-1}$ .

Здесь отметим, что по формуле (6) величина  $I_a - \bar{E}_a$  есть уменьшение энергии сродства дырки  $\nu$ -зоны к отрицательно заряженному акцептору из-за его экранирования другими зарядами. В термодинамическом равновесии энергия сродства дырки к отрицательно заряженному акцептору в среднем по кристаллу равна энергии ионизации нейтрального акцептора.

Покажем на примере невырожденного Ge:Ga, что в области температур определения  $E_{1a}$  отрицательно заряженный атом Ga успеваает до акта захвата дырки из  $\nu$ -зоны собрать вокруг себя экранирующее облако зарядов.

Из экспериментальных данных для Ge:Ga [17,18] можно определить температуру  $T_h$ , при которой электропроводность дырками  $\nu$ -зоны  $\sigma_p$  равна прыжковой  $\sigma_h$  по атомам Ga. Для  $2 \cdot 10^{14} < N < 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  при  $K \approx 0.35$  справедлива аппроксимация:  $T_h = 5.3 \cdot 10^{-4} N^{0.27}$ , где  $T_h$  выражена в К,  $N$  — в  $\text{см}^{-3}$ , ширина акцепторной зоны  $W_a \geq 4k_B T_h$ . В образце с  $N = 2.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  для  $K = 0.35$  при температуре  $T_h = 7.45 \text{ К}$ , когда электропроводность  $\sigma_p + \sigma_h = 2\sigma_p \approx 2 \cdot 10^{-6} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$  [17], максвелловское время релаксации  $\tau_s = \epsilon/(\sigma_p + \sigma_h) \approx 7 \cdot 10^{-7} \text{ с}$  ( $\epsilon_r = 15.4$  для нелегированного Ge [19]). Время жизни акцептора в отрицательном зарядовом состоянии  $\tau_{-1} = 1/pSv$  определяется концентрацией дырок  $p$  в  $\nu$ -зоне, сечением их захвата  $S$  и средней тепловой скоростью  $v = (8k_B T/\pi m_{pc})^{1/2}$ , где  $m_{pc} = 0.29m_0$  — эффективная масса электропроводности. При  $T_h = 7.45 \text{ К}$  сечение захвата дырки из  $\nu$ -зоны на отрицательно заряженный атом Ga в германии  $S \approx 7 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2$  [20]. Для  $N = 2.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  экспериментальное значение постоянной Холла  $(R_v \sigma_p^2 + R_a \sigma_h^2)/(\sigma_p + \sigma_h)^2 \approx R_v/4 \approx 7 \cdot 10^8 \text{ см}^3/\text{Кл}$ , где при  $\sigma_p = \sigma_h$  постоянная Холла прыгающих по акцепторам дырок:  $R_a \ll R_v$ . При  $T = T_h$  концентрация

дырок в  $\nu$ -зоне  $p(T_h) = 1/eR_\nu \approx 2.2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ . Тогда  $\tau_{-1} \approx 2 \cdot 10^{-4} \text{ с}$ , что существенно больше времени установления экранирования  $\tau_s$ . Ясно, что отношение  $\tau_{-1} \gg \tau_s$  сохраняется и для других  $N$  при  $K = \text{const}$ , так как  $\tau_s \propto \tau_{-1} \propto 1/p$ .

Из (1) с учетом (2) и (6) получаем термическую энергию ионизации акцептора (без учета флуктуаций и сдвига потолка  $\nu$ -зоны) в виде

$$E_{1a} = -k_B \frac{d \ln(pT^{-3/2})}{d(1/T)} = \bar{E}_a + \Gamma_a = I_a - \frac{3e^2}{16\pi\epsilon(\lambda + l)} + \Gamma_a, \quad (7)$$

где

$$\Gamma_a = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (E_a - \bar{E}_a) g_a f_{-1} f_0 d(E_a - \bar{E}_a)}{\int_{-\infty}^{+\infty} g_a f_{-1} f_0 d(E_a - \bar{E}_a)};$$

$$W_a = 1.64 \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \left( \frac{8\pi}{3} KN \right)^{1/3};$$

$$\lambda^{-2} = \frac{e^2}{\epsilon k_B T} N \int_{-\infty}^{+\infty} g_a f_{-1} f_0 d(E_a - \bar{E}_a);$$

$$l = 0.554[(1 + K)N]^{-1/3}.$$

Для низких температур ( $W_a \gg k_B T$ ) из (7) следует

$$E_{1a} = \bar{E}_a + \Gamma_a = E_F - k_B T \ln \beta, \quad (8)$$

где длина экранирования и уровень Ферми определяются из соотношений

$$\lambda^{-2} = \frac{e^2}{\epsilon} \frac{N}{\sqrt{2\pi} W_a} \exp\left(-\frac{(E_F - \bar{E}_a - k_B T \ln \beta)^2}{2W_a^2}\right);$$

$$2K = 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{E_F - \bar{E}_a - k_B T \ln \beta}{\sqrt{2} W_a}\right) = 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\Gamma_a}{\sqrt{2} W_a}\right).$$

Отметим, что  $\Gamma_a = E_F - \bar{E}_a$  при  $T \rightarrow 0 \text{ К}$ .

Из (8) с учетом  $W_a \propto (KN)^{1/3}$  имеем

$$I_a - E_{1a} = \frac{e^2 N^{1/3}}{4\pi\epsilon} F_0(K), \quad (9)$$

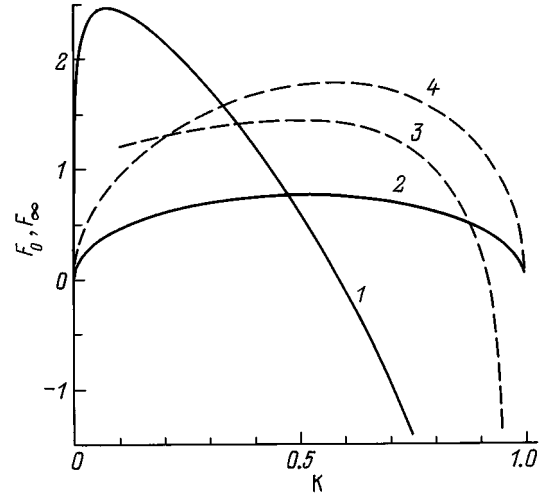
где  $F_0(K) \rightarrow 0$  при  $K \rightarrow 0$ . В модели [3]  $F_0(K)$  представлена в виде таблицы и определяется разностью энергии порога протекания (подвижности) для дырок  $\nu$ -зоны и уровня Ферми  $E_F$ .

Для высоких температур ( $k_B T \gg W_a$ ) из (7) имеем  $\Gamma_a \ll k_B T$  и термическая энергия ионизации акцептора  $E_{1a}$  совпадает со средним уровнем энергии акцептора  $\bar{E}_a$  (энергетическим расстоянием между потолком  $\nu$ -зоны и центром акцепторной зоны):

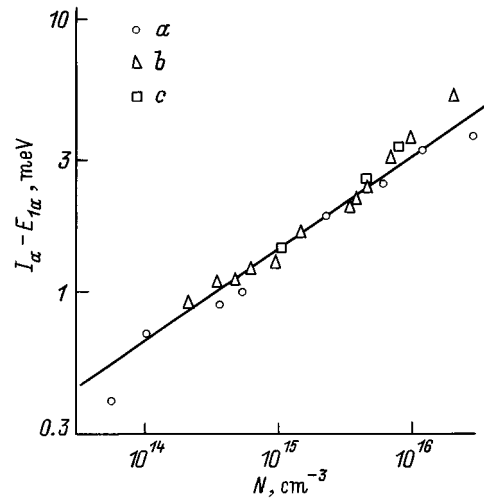
$$E_{1a} = \bar{E}_a = I_a - \frac{3e^2}{16\pi\epsilon(\lambda + l)}, \quad (10)$$

где

$$\lambda^{-2} = \frac{e^2 K(1 - K)N}{\epsilon k_B T}.$$



**Рис. 1.** Зависимость безразмерных функций  $F_0$  и  $F_\infty$  от степени компенсации основной легирующей примеси; 1 и 2 — расчет  $F_0$  и  $F_\infty$  по формулам (9) и (11); 3 —  $F_0$  по модели [3], 4 —  $F_\infty$  [4].



**Рис. 2.** Расчет по (8) изменения термической энергии ионизации  $I_a - E_{1a}$  атомов Ga в Ge от их концентрации  $N$  при степени компенсации  $K = 0.35$  для  $W_a \gg k_B T$ . Экспериментальные данные:  $a - K = 0.31, 0.35$  [17];  $b - K \approx 0.4$  [18];  $c - K \approx 0.27, 0.36, 0.43$  [21]. Уровень энергии изолированного атома галлия  $I_a = 11.32 \text{ мэВ}$  [22,23].

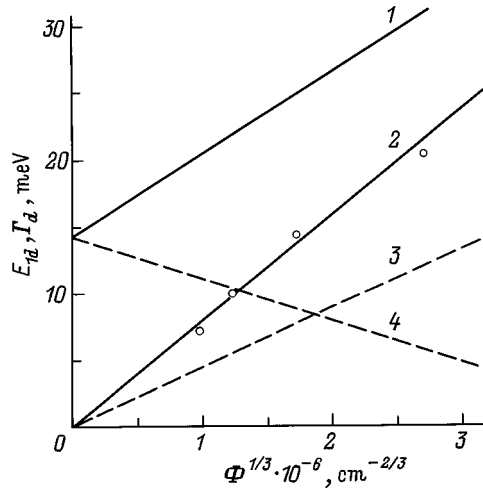
При  $\lambda \gg l$  из (10) имеем

$$I_a - E_{1a} = \frac{e^3 N^{1/2}}{8\pi\epsilon^{3/2} (k_B T)^{1/2}} F_\infty(K), \quad (11)$$

где  $F_\infty(K) = 1.5\sqrt{K(1-K)}$ . Модель [4] дает  $F_\infty(K) = (K + 3)\sqrt{K(1-K)}$ .

3. На рис. 1 представлены зависимости  $F_0$  и  $F_\infty$  от степени компенсации, рассчитанные по (7)–(11), в сравнении с электростатическими моделями [3,4].

На рис. 2 представлено изменение термической энергии ионизации ( $I_a - E_{1a}$ ) атомов Ga с ростом их кон-



**Рис. 3.** Экспериментальная [24] зависимость термической энергии ионизации  $E_{1d}$  атомов As от дозы тепловых нейтронов для образцов  $n$ -Ge с измененным изотопным составом и степенью компенсации  $K = 0.79$  1, 2 — расчет  $E_{1d}$  и  $\Gamma_d$  по предлагаемой модели; 3, 4 — расчет  $E_{1d}$  и  $|E_F + \bar{E}_d|$  по модели [3]. Уровень энергии изолированного атома As в германии  $I_d = 14.18$  мэВ [22,23].

центрации  $N$  при нейтронном трансмутационном легировании кристаллов Ga с природным составом изотопов. Экспериментальные значения степени компенсации были:  $K = 0.31, 0.35$  [17];  $K \approx 0.4$  [18];  $K \approx 0.27, 0.36, 0.43$  [21]. Так как  $W_a \geq 4k_B T_h$  (см. выше), расчет  $I_a - E_{1a}$  проводился по (8); полагалось  $I_a = 11.32$  мэВ [22,23] и  $K = 0.35$ . При  $W_a \gg k_B T$  для  $K = 0.35$  из (8) имеем  $I_a - E_{1a} \approx 1.47e^2 N^{1/3} / 4\pi\epsilon$ , что близко к расчету по модели [3].

На рис. 3 представлена зависимость термической энергии ионизации атомов As от дозы облучения тепловыми нейтронами  $\Phi$  кристаллов  $n$ -Ge, обогащенных изотопом  $^{74}\text{Ge}$  [24]. Уравнение электронейтральности имеет вид  $n + KN = N_{+1}$ , где  $N = N_0 + N_{+1}$ ;  $K \approx 0.8$ . Следуя [25], считаем, что при дозе  $\Phi \approx 10^{18} \text{ см}^{-2}$  концентрация электронов в  $c$ -зоне  $n = (1 - K)N \approx 8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  для  $T = 300$  К. Уровень энергии изолированного атома As в германии  $I_d = 14.18$  мэВ [22,23]. Рассчитанная по (7) термическая энергия ионизации доноров  $E_{1d} = -k_B d \ln(nT^{-3/2}) / d(1/T) = \bar{E}_d + \Gamma_d$  при  $n \ll K(1 - K)N$  и  $W_d = W_{+1} \gg k_B T$  больше экспериментальных значений [24] (кривая 1).

Представляется, что при высокой степени компенсации измеряемая электропроводность  $(\sigma_n + \sigma_h)$  и постоянная Холла  $(R_c \sigma_n^2 + R_d \sigma_h^2) / (\sigma_n + \sigma_h)^2$  при  $W_d \gg k_B T$  определяются [26] как термически возбужденными в центр донорной зоны электронами  $(\sigma_h, R_d)$ , так и электронами  $c$ -зоны  $(\sigma_n, R_c)$ . В этом случае при  $n \ll K(1 - K)N$  и  $W_d \gg k_B T$  термическая (холловская) энергия ионизации As соответствует  $\Gamma_d$  (разности энергии центра донорной зоны и уровня Ферми при  $T \rightarrow 0$  К) (рис. 3, кривая 2). По (8) величина  $\Gamma_d = -(\bar{E}_d + E_F + k_B T \ln 2)$  определяется из уравнения

электронейтральности  $2K = 1 + \text{erf}(\Gamma_d / \sqrt{2}W_d)$ , где  $\bar{E}_d > 0$  и  $E_F < 0$  отсчитаны от дна  $c$ -зоны;

$$\bar{E}_d = I_d - \frac{3e^2}{16\pi\epsilon(\lambda + l)};$$

$$\lambda^{-2} \approx -\frac{e^2}{\epsilon} \frac{\partial N_{+1}}{\partial E_F} = -\frac{e^2 N}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial E_F} \times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g_d d(E_d - \bar{E}_d)}{1 + 2 \exp[(E_d + E_F) / k_B T]}.$$

Для сравнения на рис. 3 приведены рассчитанные по модели [3] при  $K = 0.79$  значения термической энергии ионизации  $E_{1d}$  (разность энергии порога протекания и  $E_F$ ; кривая 3) и  $|E_F + \bar{E}_d|$  (кривая 4).

**4.** Рассмотрим зависимость энергии термической ионизации атомов Zn в  $p$ -Ge, когда концентрация дырок в  $v$ -зоне  $p$  определяется переходами Zn из зарядового состояния  $(-1)$  в зарядовое состояние  $(-2)$  при захвате электрона из  $v$ -зоны [27]. Пусть концентрация атомов Zn равна  $N = N_{-1} + N_{-2}$ ; концентрация однократно положительно заряженных доноров есть  $KN$ , где  $1 < K < 2$ . Тогда уравнение электронейтральности  $p^+$   $KN = N_{-1} + 2N_{-2} = N + N_{-2}$  имеет вид

$$N_{-2} = N \int_{-\infty}^{+\infty} g_t f_{-2} d(E_t - \bar{E}_t) = p + (K - 1)N, \quad (12)$$

где  $g_t = (\sqrt{2\pi}W_t)^{-1} \exp(-(E_t - \bar{E}_t)^2 / 2W_t^2)$ ; вероятность, что атом Zn находится в зарядовом состоянии  $(-2)$ , есть  $f_{-2} = 1 - f_{-1} = [1 + 4 \exp((E_t - E_F) / k_B T)]^{-1}$ ; уровни энергии цинка  $E_t > 0$  и  $E_F > 0$  отсчитываются от потолка  $v$ -зоны.

Согласно (3), среднеквадратичная флуктуация уровня энергии атома Zn при переходе его из зарядового состояния  $(-1)$  в  $(-2)$  для  $p \ll KN$  равна

$$W_t = \sqrt{W_{-2}^2 + W_{-1}^2} = \sqrt{5}W_{-1} \approx 3.67 \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \left( \frac{4\pi}{3} N(1 + K) \right)^{1/3} \left( \frac{4K - 2}{1 + K} \right)^{1/2}. \quad (13)$$

Среднее значение уровня энергии, т.е. разность между энергиями атомов Zn в зарядовом состоянии  $(-1)$  и  $(-2)$ , есть (ср. формулу (6))

$$\bar{E}_t = \bar{E}_{-2} - \bar{E}_{-1} = I_t - \frac{9e^2}{16\pi\epsilon(\lambda + l)}, \quad (14)$$

где  $\bar{E}_{-2} = I_{-2} - 12e^2 / 16\pi\epsilon(\lambda + l)$ ,  $\bar{E}_{-1} = I_{-1} - 3e^2 / 16\pi\epsilon(\lambda + l)$ ,  $I_t = I_{-2} - I_{-1} \approx 86.5$  мэВ — уровень энергии одиночного атома Zn в зарядовом состоянии  $(-1)$  в  $p$ -Ge [23],  $l = 0.554[N(1 + K)]^{-1/3}$ , длина экранирования [11]

$$\lambda^{-2} \approx \frac{e^2}{\epsilon} \frac{\partial N_{-2}}{\partial E_F} = \frac{e^2 N}{\epsilon k_B T} \int_{-\infty}^{+\infty} g_t f_{-2} f_{-1} d(E_t - \bar{E}_t). \quad (15)$$

Заметим, что  $I_{-2} - \bar{E}_{-2}$  есть уменьшение энергии сродства дырки к атому Zn в зарядовом состоянии  $(-2)$  из-за его экранирования распределенным зарядом  $(+2e)$ .

Определяя  $E_F$  и  $dE_F/dT$ , из (12) по (1) при  $p \ll (2 - K)(K - 1)N$  находим термическую энергию ионизации отрицательно заряженных ионов Zn в p-Ge:

$$E_{1t} = -k_B \frac{d \ln(pT^{-3/2})}{d(1/T)} = \bar{E}_t + \Gamma_t. \quad (16)$$

где

$$\Gamma_t = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (E_t - \bar{E}_t) g_t f_{-1} f_{-2} d(E_t - \bar{E}_t)}{\int_{-\infty}^{+\infty} g_t f_{-1} f_{-2} d(E_t - \bar{E}_t)}.$$

Расчет по (16) с учетом (12)–(15) для  $5 \cdot 10^{14} < N < 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  при  $K \approx 1.3$  и  $T \approx 100 \text{ К}$  дает  $E_{1t} < I_t$ , что согласуется с экспериментом [27]. Например, для  $N = 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  термическая энергия ионизации  $E_{1t} \approx 65 \text{ мэВ}$ . При  $K \approx 1.5$  и  $T \approx 150 \text{ К}$  измеряемая величина  $E_{1t} \approx I_t$  практически не зависит от концентрации атомов Zn. Это и понятно, по (16) при  $K \approx 1.5$  уменьшение (сдвиг к  $\nu$ -зоне)  $\bar{E}_t$  с ростом  $N$  компенсируется увеличением  $\Gamma_t$  (из-за сдвига  $E_F$  в глубь запрещенной зоны).

Здесь отметим, что измерения  $E_{1t}$  в работе [27] проводились в интервале температур, когда  $W_t \approx k_B T$ , и полученные в [3,4] предельные выражения  $F_0$  и  $E_\infty$  не применимы.

5. Итак, в работе развита модель зависимости термической энергии ионизации примесей  $E_1$  от их концентрации  $N$  и степени компенсации  $K$ . Дан расчет ширины примесной зоны  $W$  при учете кулоновского взаимодействия только ближайших зарядов. Учтено экранирование ионов прыгающими по примесям дырками (электронами) в температурной области определения  $E_1$ . Хвостами плотности состояний  $\nu$ - и  $c$ -зон пренебрегалось. В пределе низких ( $W \gg k_B T$ ) и высоких ( $W \ll k_B T$ ) температур получены аналитические выражения (9) и (11) для термической энергии ионизации, которые сопоставлены с другими теоретическими моделями. На примере кристаллического германия, легированного водородоподобными примесями Ga и As, а также многозарядным акцептором Zn, показано, что рассчитанные значения  $E_1$  согласуются с экспериментальными данными для разных степеней компенсации и температур.

Авторы сердечно благодарят А.Г. Забродского за полезные обсуждения работы.

Работа поддерживалась грантом INTAS (94-4435).

## Список литературы

- [1] А.Я. Шик. ФТП, **17**, 2220 (1983).  
 [2] Дж. Займан. *Модели беспорядка* (М., Мир, 1982) гл. 13, с. 574. [Пер. с англ.: J.M. Ziman. *Models of Disorder* (London–N.Y.–Melbourne, Cambridge University Press, 1979)].

- [3] Н.В. Лиен, Б.И. Шкловский. ФТП, **13**, 1763 (1979).  
 [4] А.А. Узаков, А.Л. Эфрос. ФТП, **21**, 922 (1987).  
 [5] J. Monecke, W. Siegel, E. Ziegler, G. Kuhnel. Phys. St. Sol. (b), **103**, 269 (1981).  
 [6] В.Л. Бонч-Бруевич. Изв. вузов. Физика, **28**, 98 (1985).  
 [7] D. Schechter. J. Appl. Phys., **61**, 591 (1987).  
 [8] А.Г. Забродский, М.П. Тимофеев. ФТП, **21**, 2217 (1987).  
 [9] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло. ЖПС, **64**, 367 (1997).  
 [10] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло, Ф.Н. Боровик. ФТП, **30**, 1767 (1996).  
 [11] N.A. Poklonski, V.F. Stelmakh, V.D. Tkachev, S.V. Voitikov. Phys. St. Sol. (b), **88**, K165 (1978).  
 [12] С.А. Майоров, А.Н. Ткачев, С.И. Яковленко. Изв. вузов. Физика, **35**, 10 (1992).  
 [13] Д. тер Хаар. В сб.: *Задачи по термодинамике и статистической физике* (М., Мир, 1974) с. 380. [Пер с англ.: D. ter Haar. *Problems in thermodynamics and statistical physics*, ed. by P.T. Landsberg (London, Pion, 1971)].  
 [14] Н.А. Поклонский. Изв. вузов. Физика, **27**, 41 (1984).  
 [15] М.И. Чибисов. ЖЭТФ, **93**, 1671 (1987).  
 [16] В.С. Марченко. ЖЭТФ, **94**, 46 (1988).  
 [17] А.Г. Андреев, В.В. Воронков, Г.И. Воронкова, А.Г. Забродский, Е.А. Петрова. ФТП, **29**, 2218 (1995).  
 [18] Л.В. Говор, В.П. Доброго, Н.А. Поклонский. ФТП, **18**, 2075 (1984).  
 [19] T.G. Castner, N.K. Lee, H.S. Tan, L. Moberly, O. Symko. J. Low Temp. Phys. **38**, 447 (1980).  
 [20] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Яснеевич. ФТП, **12**, 3 (1978).  
 [21] А.Г. Беда, Ф.М. Воробкало, В.В. Вайнберг, Л.И. Зарубин, И.М. Либезник, В.В. Овчаров. ФТП, **22**, 2065 (1988).  
 [22] Т.М. Лифшиц. ПТЭ, вып. 1, 10 (1993).  
 [23] *Semiconductors: group IV elements and III–V Compounds*, ed. by O. Madelung (Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 1991).  
 [24] А.Н. Ионов, М.Н. Матвеев, И.С. Шлимак, Ф.М. Воробкало, Л.И. Зарубин, И.Ю. Немиш. ФТП, **25**, 413 (1991).  
 [25] А.Н. Ионов, М.Н. Матвеев, Д.В. Шмикк. ЖТФ, **59**, 169 (1989).  
 [26] Е.М. Гершензон, Л.Б. Литвак-Горская, Г.Я. Луговая. ФТП, **15**, 1284 (1981).  
 [27] Т.М. Бурбаев, В.А. Курбатов, Н.А. Пенин. ФТП, **15**, 1486 (1981).

Редактор В.В. Чалдышев

## A model for dependence of thermal ionization energy of impurities on their concentration and compensation in semiconductors

N.A. Poklonskii, A.U. Syaglo, G. Biskupski\*

Belorussia State University,  
 220050 Minsk, Belorussia

\* University of Science and Technology,  
 59655 Lill, France