

## Электронные свойства дефектов с переменной валентностью в кристаллических полупроводниках

© А.Н. Крайчинский, Л.И. Шпинар, И.И. Ясковец

Институт физики Национальной академии наук Украины,  
252650 Киев, Украина

(Получена 17 марта 1999 г. Принята к печати 26 августа 1999 г.)

Исследованы электронные свойства дефектов, находящихся в различных пространственных конфигурациях со своим набором валентных связей. Исследование выполнено на основе анализа функционала энергии, в котором учтены упругая энергия в ангармоническом приближении, изменение электронного терма дефектной квазимолекулы, обусловленное локализацией электронов и энергия взаимодействия Хаббарда. Выделены два класса таких дефектов: дефекты с сильным и слабым электрон-атомным взаимодействием. В случае дефектов первого типа, характеризующихся положительной эффективной энергией корреляции, топология адиабатического потенциала не изменяется после электронной локализации. К этому классу дефектов относится пара атомов углерода ( $C_iC_s$ ) и донорно-акцепторные пары в кристаллическом кремнии. Для этого дефекта вычислен эффективный уровень заполнения как функция параметров адиабатического потенциала. Существенным в свойствах дефектов второго типа является модификация первоначального двухъямного потенциала в одноямный после локализации носителей. В этом случае эффективная корреляционная энергия может быть как положительной, так и отрицательной. Анализ известных экспериментальных результатов дает основания полагать, что к этому классу дефектов принадлежит межузельный атом бора в кремнии. Используя экспериментальные данные Воткинса, вычислен адиабатический потенциал, в котором движется межузельный атом бора, а также энергии активации переходов между различными зарядовыми состояниями этого дефекта и эффективный уровень заполнения.

Стабильные дефекты, образующиеся в полупроводниках при облучении, представляют собой сложные образования, включающие в свой состав как примесные атомы, так и атомы матричного вещества. Характер связей между атомами молекулы дефекта обычно отличается от присущего данному материалу, и поэтому дефектам радиационного происхождения в отличие от дефектов кулоновского типа [1] свойственны глубокие уровни в запрещенной зоне полупроводника. Захват (эмиссия) электронов на состояния радиационных дефектов (например, вакансионного типа [2]) обычно приводит к образованию (исчезновению) связей между атомами молекулы дефекта. По этой причине такие дефекты характеризуются достаточно сильным электрон-колебательным взаимодействием, так как при изменении зарядного состояния координаты атомов  $R_i$  в молекуле дефекта изменяются из-за изменения связей между ними.

Энергию  $E_j(x)$  молекул дефекта при локализации  $j$  электронов в одномодовом приближении можно представить в виде

$$E_j(x) = V(x) + j\delta E(x) + U_c(x)\delta_{ij}, \quad (1)$$

где  $x$  — обобщенная конфигурационная координата,  $V(x)$  — упругая энергия молекулы в отсчетном состоянии ( $j = 0$ ),  $\delta E(x) = E_q(x) - E_q$  — изменение терма  $q$  квазимолекулы, обусловленное заселением его электроном, а  $U_c(x)$  — энергия хаббардовского межэлектронного взаимодействия при локализации двух носителей заряда одинакового знака. В случае дефектов вакансионного типа в кристаллическом Si (например, вакансия, А-центр, а также дефекты, связываемые с наличием примесных

атомов Au, Pt, Ni) роль обобщенной координаты играет "дыхательная" мода и при нахождении  $E_j(x)$  обычно ограничиваются гармоническим приближением, предполагая смещение атомов ( $x$ ) малыми по сравнению с межатомными расстоянием  $a$  ( $x \ll a$ ).

Существует другой класс дефектов, которые могут находиться в разных пространственных конфигурациях  $n$  со своим набором ковалентных связей, каждая из которых реализуется с вероятностью  $P_j^n$ , при заданном числе  $j$  локализованных электронов. Примерами таких дефектов в Si является пара атомов углерода, один из которых находится в межузельном, а другой — в узельном положениях ( $C_iC_s$ ), дефект (В, V), где В — атом бора, а V — вакансия, а также ряд донорно-акцепторных пар. По-видимому, к таким дефектам относится и межузельный атом бора, образующийся в кремнии при облучении электронами и  $\gamma$ -квантами. Действительно, экспериментальные результаты [3,4] подтверждают имеющее место переключение химических связей при изменении зарядового состояния атома бора.

Электронные свойства мультистабильных дефектов изучались как экспериментально, так и теоретически [5,6]. Здесь рассматривается простая модель, позволяющая описывать их электронные свойства и вероятности электронных переходов между различными зарядовыми состояниями бистабильных дефектов. В случае дефектов с переменной конфигурацией адиабатические потенциалы существенно ангармоничны, и для описания их электронных свойств необходимо использовать подход, отличный от обычного "поляронного" [7], используемого при описании дефектов вакансионного типа.

При описании электрических и оптических свойств дефектов в деформируемой решетке задача сводится к определению адиабатических потенциалов  $E(j, x)$ . Последние можно описать, исходя из известных микроскопических моделей дефектов, построенных на основе экспериментальных данных. Простейшее аналитическое выражение, обеспечивающее наличие бистабильности в одномодовом приближении, имеет вид

$$E_j(x) = A(\eta x^2 + tx^3 + x^4) + jE_0 + jQx + U_c \delta_{j2}, \quad (2)$$

которое получается из (1) при разложении  $E_q(x)$  в ряд по степеням  $x$  (зависимость коэффициентов при  $x^n$  от  $j$  не существенна при  $n \geq 2$  [8,9]). Потенциал вида (1)–(2) использовался при анализе электронных состояний в щели по данным о подвижности халькогенидных стеклообразных полупроводников (ХСП) [10,11]. В этом контексте кристаллические полупроводники отличаются от ХСП тем, что в них концентрация перестраиваемых дефектов существенно меньше, а распределение  $F(\eta, t)$  параметров  $\eta$  и  $t$ , характеризующих молекулу дефекта, является  $\delta$ -образным. В соотношении (2)  $A = (1/2)k_0 a_0^2 \approx 10\text{--}30$  эВ, где  $a_0$  — величина порядка атомного радиуса, а  $A$  и  $k_0$  — обычные масштабы энергии и упругих констант в ковалентных полупроводниках. Величины  $\eta$  ( $|\eta| \ll 1$ ) и  $t$  ( $t^2 \ll 1$ ) определяются конкретной микроструктурой квазимолекулы дефекта и имеют смысл параметров, характеризующих "мягкость" дефекта и асимметрию потенциала. При  $j$ -кратном ( $j = 0, 1, 2$ ) заселении термина  $E_q$  электрон-атомное взаимодействие (пропорциональное постоянной  $Q$ ) может вызвать деформацию среды и сильное понижение термина  $\delta E_q(x) = E_q(x) - E_q \leq Q$ . При этом возникает, вообще говоря, новая дополнительная связь, что и приводит к изменению пространственной конфигурации квазимолекулы дефекта — переходу из одного минимума потенциала в другой. Полный анализ потенциала (2) достаточно громоздкий, однако можно выделить следующие его свойства. Потенциал (2) имеет один минимум независимо от числа электронного заполнения  $j$ , если  $p = 1 - 8\eta/3t^2 < 0$ . При  $p > 0$  — случай, представляющий интерес — топология потенциала определяется величиной

$$D = \left(\frac{\eta}{3} + \frac{t^2}{8}\right)^3 - \frac{1}{8} \left(\frac{\eta t}{2} + \frac{t^2}{8} + \frac{jQ}{A}\right)^2. \quad (3)$$

При этом выделяются два класса дефектов с потенциалом типа (2): дефекты с сильным ( $D < 0$ ) и слабым ( $D > 0$ ) электрон-атомным взаимодействием. Функция  $D$  делит фазовое пространство параметров ( $q = Q/A, t, \eta$ ) молекулы дефекта поверхностями

$$q_{1,2} = -\frac{\eta^* t}{2} - \frac{t^2}{8} \pm \sqrt{\frac{1}{64} \left(t^2 + \frac{8\eta}{3}\right)^3} \quad (4)$$

на три области. Область значений  $Q_1 > Q > Q_2$  соответствует двухъямным потенциалам, а в областях  $Q > Q_1$  и  $Q < Q_2$  существуют молекулы дефекта с одноямным

потенциалом. Критическим потенциалам, определяющим свойства электронных состояний в области щели по подвижности для халькогенидных стеклообразных полупроводников, исследованным в работе [10,11] соответствует область  $\eta \ll 1$  ( $\eta > 0$ ).

Существенным в свойствах дефектов с сильным электрон-атомным взаимодействием является возможное изменение первоначально двухъямного характера потенциала (при заселении  $j = 0$ ) после захвата носителей ( $j = 1, 2$ ) на одноямный. Для иллюстрации этих общих свойств потенциала (2) рассмотрим роль локализующихся носителей заряда в формировании адиабатического потенциала при небольших значениях его "затравочной" асимметрии ( $t^2 \ll 1, \eta = -\sigma < 0$ ). В этом случае потенциал будет двухъямным при выполнении условия  $(1/8)(jQ/A)^2 < |\eta|^3/27$  и одноямным при выполнении обратного неравенства. В случае выполнения первого неравенства положения минимумов и соответствующие значения потенциала в этих минимумах определяются выражениями

$$x_{2,1} = -\left(\frac{3}{8}t + j\frac{Q}{4A\sigma}\right) \pm \left(\sqrt{\frac{\sigma}{2}} - \frac{t}{8}\sqrt{\frac{18}{\sigma}}\frac{jQ}{4A\sigma}\right), \quad (5)$$

$$E_j(x_{2,1}) = \left(-\frac{A}{4}\sigma + U_c \delta_{j2} + jE_0 - \frac{3}{8}jQt\right) \pm \left(\frac{1}{4}A\sigma\sqrt{2\sigma} + jQ\sqrt{\frac{\sigma}{2}}\right). \quad (6)$$

Таким образом, для разности потенциалов в минимумах ( $\delta E_{12} \equiv E_j(x_{2\min}) - E_j(x_{1\min})$ ) имеем

$$\delta E_{12} = A\sigma t \sqrt{\frac{\sigma}{2}} + jQ\sqrt{2\sigma}. \quad (7)$$

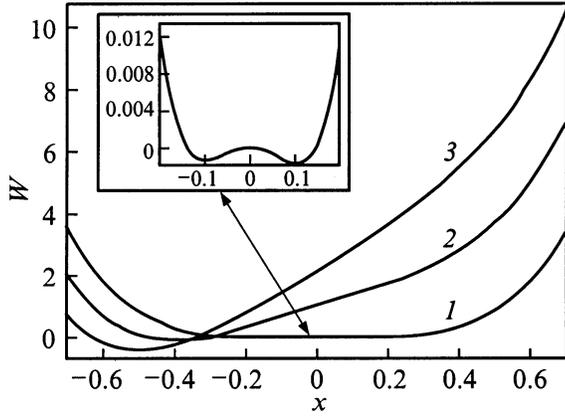
Эта разность может быть как положительной, так и отрицательной в зависимости от соотношения между значениями и знаками параметров  $Q$  и  $t$ . В случае сильного электрон-атомного взаимодействия ( $D < 0, j \neq 0$ ) адиабатический потенциал имеет один минимум в точке

$$x_{\min} \approx -\frac{1}{2} \left[ \left(j\frac{2Q}{A}\right)^{1/3} + \frac{1}{3} \left(\frac{4A}{jQ}\right)^{1/3} + \frac{t}{2} \right], \quad (8)$$

в которой значение потенциала определяется выражением

$$E_j(x_{\min}) \approx -\frac{1}{4} \left[ A\sigma \left(\frac{jQ}{A}\right)^{1/3} + jQ \right] t - \frac{3}{8} jQ \left(\frac{j2Q}{A}\right)^{1/3} - \frac{1}{4} A\sigma \left(j\frac{2Q}{A}\right)^{2/3} - \frac{1}{6} A\sigma^2 + jE_0 + U_c \delta_{j2}. \quad (9)$$

Таким образом, дефекты с переменной конфигурацией подразделяются на два класса с сильным и слабым



Потенциал дефекта в зависимости от обобщенной координаты  $x$  при числе локализованных электронов  $j$ : 1 — 0, 2 — 1, 3 — 2.

электрон-атомным взаимодействием. Локализация носителей приводит к асимметрии двухъямного потенциала  $W(x)$ . Эта асимметрия усиливается при одинаковом знаке  $t$  и  $Q$  или ослабляется (изменяет знак) при противоположных знаках, и в случае больших значений  $|Q|$  изменяется топологический характер потенциала (см. рисунок).

По-видимому, к классу со слабым электрон-атомным взаимодействием относятся донорно-акцепторные пары, а также дефекты  $C_iC_s$  и  $VV$  в облученном кристаллическом кремнии. Действительно, как показывают исследования ЭПР, в случае дефекта  $C_iC_s$  не наблюдается заметного электрон-колебательного взаимодействия, и при изменении зарядового числа адиабатические потенциалы остаются двухъямными. В случае дефектов со слабым взаимодействием эффективная корреляционная энергия  $U_{\text{eff}} = E_2(x_{\text{min}}) + E_0(x_{\text{min}}) - 2E_1(x_{\text{min}})$  положительна, в то время как при наличии сильного электрон-атомного взаимодействия

$$U_{\text{eff}} \approx U_c - 0.19Q \left( \frac{2Q}{A} \right)^{1/3} + \frac{1}{2}A\sigma \left[ 0.26 \left( \frac{2Q}{A} \right)^{2/3} + 0.37 \left( \frac{Q}{A} \right)^{1/3} t \right] \quad (10)$$

может быть как положительной, так и отрицательной.

При статистическом описании дефектов с изменяющейся конфигурацией будем исходить из канонического распределения, согласно которому вероятность нахождения дефекта в состоянии, характеризуемом полной энергией  $E_{\text{tot}}(x, j) = E_j(x) - jF$ , где  $F$  — уровень Ферми, имеет вид

$$P(x, j) = A(j) \exp \left( -\frac{E(x, j)}{kT} \right),$$

$$A(j) = \left[ \sum_{j=0}^2 \iint \exp \left( -\frac{E(x, j)}{kT} \right) dx dp \right]^{-1}. \quad (11)$$

Тогда вероятность нахождения дефекта в  $j$ -м ( $j = 0, 1, 2$ ) зарядовом состоянии равна

$$P(j) = \left[ \sum_{j=0}^2 \iint \exp \left( -\frac{E(x, j)}{kT} \right) dx dp \right]^{-1} \times \iint \exp \left( -\frac{E(x, j)}{kT} \right) dx. \quad (12)$$

Как видно из этого выражения, основной вклад в интегралы дают окрестности минимумов  $x_k$  потенциала  $E_j(x)$ , вблизи которых  $E_j(x) \approx E_j(x_k) + \frac{1}{2}B_{jk}(x - x_k)^2$  и

$$\int_0^{\infty} \exp \left( -\frac{E_i(x)}{kT} \right) dx \approx \sum_{k=1}^n \left( \frac{2\pi}{B_{ik}} \right)^2 \exp \left( -\frac{E_i(x_k) - iF}{kT} \right), \quad (13)$$

где  $B_{jk}$  — величины, характеризующие деформационную восприимчивость дефекта в данной конфигурации, а суммирование ведется по всем  $k$ -минимумам, число которых не обязательно совпадает с числом зарядовых состояний дефекта ( $j$ ). Очевидно, что наибольший вклад дает наиболее глубокий минимум. В случае одинаковых минимумов результат суммирования сводится к умножению на число минимумов. Это обстоятельство можно отобразить путем введения фактора вырождения  $g_n(j)$ , где  $n$  — число одинаковых минимумов, которое может быть разным для разных  $j$ . Фактор электронного вырождения обозначим посредством  $g_e(j)$ . Так что общий фактор вырождения  $g_k(j) = g_e(j)g_n(j)/\sqrt{B_{jk}}$ . Итак, выражение для вероятности нахождения дефекта в  $j$ -м зарядовом состоянии, вблизи  $k$ -го минимума, имеет вид

$$P_k(j) = \frac{g_k(j) \exp \left( -\frac{E_j(x_k) - jF}{kT} \right)}{\sum_{j=0}^2 \sum_{k=1}^n g_k(j) \exp \left( -\frac{E_j(x_k) - jF}{kT} \right)}. \quad (14)$$

При анализе процессов перехода дефектов из зарядового состояния  $j$ , характеризуемого обобщенной координатой  $x$ , в состояние с параметрами  $y$  и  $k = j + 1$  подразумевается существование в системе некоторого другого состояния  $\psi_R(r)$  с энергией  $\varepsilon_R$ , которое снабжено лишним электроном, и вероятность его заполнения определяется распределением Ферми  $f_0(\varepsilon_R)$ . Одноэлектронные переходы осуществляются в соответствии с законом сохранения энергии:  $E_{\text{tot}}(x, j) = E_{\text{tot}}(y, k)$ , где  $E_{\text{tot}}(x, j) = E_j(x) + \varepsilon_R$ , а  $E_{\text{tot}}(y, k) = E_k(y)$ . Общая скорость перехода  $R_R(j, k)$  переходов  $j \rightarrow k$  через состояния  $R$  получается умножением начальной вероятности  $f_0(\varepsilon_R)P_j(x)$  на скорость  $R_R(j, k)$  и на дельта-функцию от энергии и последующего интегрирования по фазовым пространствам  $x$  и  $y$  ( $k = j + 1$ ). Используя приближение Борна–Оппенгеймера, можно показать, что выражение, определяющее энергию активации  $E_{ij}^a$  процессов перехо-

да из зарядового состояния  $i$  в состояние  $j$ , имеет вид [7]

$$R_R(i, j)/P(i) = \int_0^\infty f_0(\varepsilon_R) P_i(x_{ij}) \Phi_R \sqrt{\varepsilon_R} d\varepsilon_R \sim \exp(-E_{ij}^a/kT), \quad (15)$$

где  $\varepsilon_R^{1/2} d\varepsilon_R$  — плотность электронных состояний вблизи дна зоны проводимости. Используя приведенные выше соотношения для потенциала для случая сильного электрон-атомного взаимодействия, а также координат точек минимума и пересечения кривых адиабатического потенциала при разных значениях числа электронного заполнения, можно найти выражения для энергии активации  $E_{ij}^a$  переходов дефектов из зарядового состояния  $i$  в зарядовое состояние  $j$ :

$$E_{01}^a \approx A \left( l_1^4 + t l_1^3 - \eta l_1^2 + \frac{\eta^2}{4} + \frac{\sqrt{2}}{4} \eta^{3/2} t \right), \quad (16)$$

$$E_{12}^a \approx A \left( l_2^4 - t l_2^3 - \eta l_2^2 + \frac{\eta^2}{6} + \frac{2^{1/3}}{4} t \eta^2 q_A^{1/3} \right) + \frac{1}{4} t Q - (E_0 + U_c) + 3 \frac{2^{1/3}}{8} Q q_A^{1/3} + \frac{2^{2/3}}{4} A q_A^{2/3} \eta, \quad (17)$$

$$E_{10}^a \approx A \left( l_1^4 - t l_1^3 - \eta l_1^2 + \frac{\eta^2}{6} + \frac{2^{1/3}}{4} \eta^2 t q_A^{1/3} - \frac{2^{2/3}}{4} \eta q_A^{2/3} \right) + 2^{1/3} \frac{3}{8} Q q_A^{1/3} + \frac{1}{4} t Q - E_0, \quad (18)$$

$$E_{21}^a \approx A \left( l_2^4 - t l_2^3 - \eta l_2^2 + \frac{\eta^2}{6} + \frac{2^{1/3}}{4} \eta^2 t q_A^{1/3} - \frac{1}{2^{1/3}} \eta q_A^{2/3} \right) + 2^{2/3} \frac{3}{4} Q q_A^{1/3} - 2(E_0 + U_c), \quad (19)$$

где  $l_1 = Q/A$ ,  $l_2 = (E_0 + U_c)/A$ ,  $q_A = Q/A$ . Переходы  $2 \rightarrow 1$  и  $1 \rightarrow 0$  связаны с выбросом электронов в зону проводимости и при малых значениях  $E_{21}^a$  и  $E_{10}^a$  будут определяться положением уровня Ферми. Полученные выражения для энергий активации процессов перехода между различными зарядовыми состояниями позволяют в принципе по экспериментальным данным определить параметры дефектов с сильным электрон-атомным взаимодействием. Обычно такими экспериментальными данными являются энергии активации, определяемые с помощью неравновесных экспериментов по ЭПР и DLTS (спектроскопия глубоких уровней). В случае же экспериментов, использующих равновесные электронные свойства дефектов, имеют значения уровни заполнения  $E_{th}(j \rightarrow j+1) = E[j, x_{\min}(j)] - E[j+1, x_{\min}(j+1)]$ , связываемые с тепловыми переходами, которые соответствуют изменению чисел заполнения  $j+1 \rightarrow j$ , где  $x_{\min}(j)$  — значение координаты, минимизирующее  $E_j(x)$  при заданном числе заполнения  $j$ . В случае дефектов с

сильным электрон-атомным взаимодействием имеем

$$E_{th}(1 \rightarrow 2) = 0.72 Q q_A^{1/3} - (E_0 + U_c) + \frac{1}{4} t Q + 0.233 \eta A q_A^{2/3} + 0.082 \eta t A q_A^{1/3}, \quad (20)$$

$$E_{th}(0 \rightarrow 1) = 0.47 Q q_A^{1/3} - E_0 + \frac{t Q}{4} - 0.35 A \eta^{3/2} t - 0.4 \eta A q_A^{2/3} + 0.31 \eta t A q_A^{1/3} - \frac{1}{12} A \eta^2. \quad (21)$$

Рассмотрим особенности равновесных электронных свойств бистабильных дефектов в случае слабого электрон-атомного взаимодействия, т. е. когда в процессе изменения числа заполнения топологический характер потенциала не изменяется. Полученные выражения (14) для вероятности заполнения позволяют получить соотношения между вероятностями заселения каждой из потенциальных ям, в результате чего можно найти выражение для концентрации, например, однократно отрицательно заряженных бистабильных центров:

$$N_B^- = \frac{n N_B}{n + Q_{B(2)} f},$$

где  $N_B$  — полная концентрация бистабильных дефектов,  $n$  — концентрация свободных электронов в зоне проводимости,  $Q_{B(2)} = N_c \exp(-\varepsilon_2/kT)$ ,  $N_c$  — плотность состояний на дне зоны проводимости,  $\varepsilon_2$  — уровень заполнения бистабильного дефекта во второй яме. Функция  $f$  описывает вклад другого метастабильного состояния и имеет вид

$$f = \left[ 1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon_{12}^0}{kT}\right) \right] / \left[ 1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon_{12}^-}{kT}\right) \right].$$

Здесь  $\varepsilon_{12}^0 = E_1^0 - E_2^0$  и  $\varepsilon_{12}^- = E_1^- - E_2^-$  — разности в положениях минимумов двухъямного потенциала в нейтральном и однократно отрицательно заряженном состоянии. Таким образом, можно ввести эффективный уровень заполнения бистабильного дефекта

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_2 - kT \ln f, \quad (22)$$

включающий в себя параметры двухъямного потенциала и зависящий, вообще говоря, от температуры.

В заключение остановимся на радиационном дефекте в кремнии: атом бора  $B_i$  в межузельном положении в решетке кремния. Как известно [3], атом бора в межузельном положении может находиться в трех зарядовых состояниях:  $B^+$ ,  $B^0$  и  $B^-$ . Переход из зарядового состояния  $B^0$  в  $B^-$  характеризуется большой энергией релаксации решетки, что приводит к инверсии донорного и акцепторного уровней, т. е. этот дефект является центром с отрицательной корреляционной энергией. Наблюдаемый характер сигнала ЭПР состояния  $B^0$  и изменения в конфигурации связей указывают на большую энергию решеточной релаксации, а микроскопические модели [3] подтверждают, что эта система должна

рассматриваться в тесной связи с феноменологической моделью дефектов, рассмотренной в предыдущих разделах. Согласно экспериментальным данным [3] имеем  $E_{10}^a = (0.13 \pm 0.01)$  эВ и  $E_{21}^a = (0.45 \pm 0.08)$  эВ. Этих данных недостаточно для однозначного определения всех параметров, фигурирующих в (16)–(21). Для этой цели требуется проведение специального эксперимента, как это было сделано, например, в работе [12], по определению уровней заполнения вакансии в  $p$ -Si. Тем не менее можно сделать оценки параметров и выяснить характер адиабатического потенциала. Фигурирующие здесь параметры имеют следующий порядок величин:  $Q \approx 1 \div 3$  эВ,  $A \approx 10 \div 30$  эВ. Величина  $E_0$  имеет смысл затравочного энергетического уровня, на который переходят электроны в процессе изменения электронного числа заполнения. Эта энергия отсчитывается от потолка валентной зоны и, следовательно, имеет величину, по порядку равную ширине  $E_g$  запрещенной зоны полупроводника:  $E_0 \leq E_g < Q$ . Согласно имеющимся оценкам [7,13]  $U_c \approx 0.2 \div 0.3$  эВ. Испытание различных численных значений параметров задачи показывает, что наилучшее соответствие известным экспериментальным значениям энергий активации получается при  $t = -0.01$ ,  $\sigma = 0.12$ ,  $Q = 3.5$ ,  $E_0 = 1.0$ ,  $A = 15$  и  $U_c = 0.2$ . При этом находим, что  $E_{21}^a = 0.42$  эВ,  $E_{10}^a \approx 0.14$  эВ,  $E_{01}^a \approx 0.08$  эВ и  $E_{21}^a \approx 0.03$  эВ. Для эффективной корреляционной энергии получаем  $U_{(\text{eff})} \approx -0.31$  эВ. Найденные таким образом значения энергий активации  $E_{21}^a$ ,  $E_{10}^a$  и  $E_{01}^a$  близки к экспериментальным [5,6], а эффективный уровень заполнения  $E_{\text{осс}} \approx 0.22$  эВ. На рисунке представлены вычисленные при найденных параметрах адиабатические потенциалы межузельного атома бора в различных зарядовых состояниях. Характерными для найденных адиабатических потенциалов являются выплощенность потенциала в состоянии  $V^+$ , присущая мягким конфигурациям в халькогенидных стеклообразных полупроводниках [8], и малая энергия ( $\approx 0.03$  эВ) активации перехода  $V^0 \rightarrow V^-$ . Эти особенности потенциалов могут обуславливать особенности миграции межузельного атома бора, стимулированной рекомбинацией неосновных носителей заряда.

## Список литературы

- [1] J.A. Van Vechten, C.D. Thurmond. Phys. Rev. B, **14**(8), 3551 (1976).
- [2] G.D. Watkins. Physica B, **117–118**, 9 (1983).
- [3] G.d. Watkins, J.R. Troxell. Phys. Rev. Lett., **44**(9), 593 (1980).
- [4] R.D. Harris, J.L. Newton, G.D. Watkins. Phys. Rev. B, **26**(2), 1094 (1987).
- [5] K. Chantre, L.C. Kimerling. Proc. XIV Int. Conf of Defects in Semiconductors (Budapesht, 1988). [Mater. Sci. Forum, **38–41**, 391 (1989)].
- [6] V.M. Siratskii, V.I. Shakhovtsov, V.L. Shindich, L.I. Shpinar, I.I. Yaskovets, **24**(10), 1117 (1990).
- [7] C.A. Baraff, E.O. Kane, M. Shluter. Phys. Rev. B, **21**(8), 3563 (1980).

- [8] М.И. Клиндер. УФН, **145**(1), 105 (1985).
- [9] M.I. Klinger. Phys. Report, **165**(5–6), 275 (1988).
- [10] М.И. Клиндер, В.Г. Карпов. ЖЭТФ, **82**(5), 1687 (1982).
- [11] М.И. Клиндер, Л.И. Шпинар, И.И. Ясковец. ФТТ, **28**(2), 470 (1986).
- [12] В.В. Емцев, Т.В. Машовец, М.А. Маргарян. ФТП, **18**(8), 1516 (1984).
- [13] Л.И. Шпинар, И.И. Ясковец, М.И. Клиндер. ФТП, **24**(7), 1153 (1990).

Редактор Т.А. Полянская

## Electronic properties of defects with alternate valency in crystalline semiconductors

A.N. Kraichinskii, L.I. Shpinar, I.I. Yaskovets

Institute for Physics,  
252650 Kiev, the Ukraine