

ДИФфуЗИОННО-ДРЕЙФОВОЕ СООТНОШЕНИЕ ДЛЯ ПРЫГАЮЩИХ ПО ТРЕХЗАРЯДНЫМ ТОЧЕЧНЫМ ДЕФЕКТАМ ЭЛЕКТРОНОВ В РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Н.А. Поклонский, И.И. Аникеев, С.А. Вырко

Белорусский государственный университет, пр. Независимости 4, Минск 220030,
Беларусь, poklonski@bsu.by, ilyaanikeev35@mail.ru, vyrkosergey@tut.by

Выведено соотношение Нернста–Таунсенда–Эйнштейна–Смолуховского для аналитического расчета отношения коэффициента прыжковой диффузии к дрейфовой прыжковой подвижности. Учитывается прыжковая миграция как одиночных электронов, так и пар электронов (биполяронов) между собственными точечными трехзарядными (-1 , 0 и $+1$ в единицах элементарного заряда) дефектами одного сорта в однородно разупорядоченных полупроводниках. Увеличение числа электронов, квазилокализованных на трехзарядном дефекте, увеличивает его энергию для дефекта с положительной энергией корреляции («жесткого» дефекта, или t -дефекта) и уменьшает его энергию для дефекта с отрицательной энергией корреляции («мягкого» дефекта, или s -дефекта). Считается, что трехзарядные дефекты случайно (пуассоновски) распределены по кристаллу и прыжки одиночных электронов происходят только между дефектами в зарядовых состояниях (-1), (0) и (0) , $(+1)$, а биполяронов между дефектами в зарядовых состояниях (-1) и $(+1)$. Учтены величины разброса уровней энергии трехзарядных дефектов вследствие флуктуаций электростатической потенциальной энергии, порождаемой ионами как трехзарядных дефектов, так и ионами водородоподобных доноров. Рассчитаны зависимости отношений величины коэффициента прыжковой диффузии к прыжковой дрейфовой подвижности от абсолютной температуры в однородно разупорядоченных кристаллах кремния для концентрации трехзарядных дефектов $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Считалось, что трехзарядные дефекты компенсированы водородоподобными донорами со степенью компенсации 0.5 .

Ключевые слова: однородно разупорядоченные полупроводники; трехзарядные точечные дефекты; коэффициенты прыжковой диффузии и дрейфовой подвижности.

DIFFUSION–DRIFT RELATIONSHIP FOR ELECTRONS HOPPING VIA THREE-CHARGE-STATE POINT DEFECTS IN DISORDERED SEMICONDUCTORS

N.A. Poklonski, I.I. Anikeev, S.A. Vyrko

Belarusian State University, 4 Nezavisimosti Ave., 220030 Minsk, Belarus

The Nernst–Townsend–Einstein–Smoluchowski relation is derived for the analytical calculation of the ratio of the hopping diffusion coefficient to the drift hopping mobility. The model accounts for hopping migration of both single electrons and electron pairs (bipolarons) via intrinsic point three-charge-state (-1 , 0 , and $+1$ in units of elementary charge) defects of the same type in homogeneously disordered semiconductors. Increasing the number of electrons quasi-localized on a three-charge-state defect increases its energy for a defect with a positive correlation energy (“hard” defect, or t -defect) and decreases its energy for a defect with a negative correlation energy (“soft” defect, or s -defect). It is assumed that the three-charge-state defects are randomly (Poissonian) distributed over the crystal and that single electrons hop only via defects in the charge states (-1) , (0) and (0) , $(+1)$, and bipolarons hop via defects in the charge states (-1) and $(+1)$. The values of the spread of energy levels of three-charge-state defects due to fluctuations of electrostatic potential energy generated by ions of both three-charge-state defects and hydrogen-like donors are taken into account. The dependences of the ratios of the hopping diffusion coefficient to the hopping drift mobility on the absolute temperature in homogeneously disordered silicon crystals are calculated for concentration of three-charge-state defects of $5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. It was assumed that three-charge-state state defects are compensated by hydrogen-like donors with compensation ratio 0.5 .

Keywords: homogeneously disordered semiconductors; three-charge-state point defects; hopping diffusion and drift mobility coefficients.

Введение

Соотношение Нернста–Таунсенда–Эйнштейна–Смолуховского (НТЭС), задающее

связь между дрейфовой прыжковой подвижностью и коэффициентом прыжковой диффузии электронов по двухзарядным

водородоподобным примесям в полупроводниковых кристаллах получено в [1, 2]. Однако все еще не конкретизировано соотношение НТЭС для материалов с прыжковой миграцией электронов и/или биполяронов по трехзарядным точечным дефектам одного сорта [3].

Цель работы — вывести аналитическую формулу для отношения коэффициента прыжковой диффузии к дрейфовой прыжковой подвижности в полупроводниках с превалирующей концентрацией неподвижных трехзарядных точечных дефектов, локализирующих уровень Ферми.

Рассмотрим однородно разупорядоченный трехмерный полупроводник, содержащий точечные двухуровневые дефекты в трех зарядовых состояниях $(-1, 0, +1)$ в единицах элементарного заряда e с концентрацией, достаточной для стабилизации уровня Ферми E_F в запрещенной энергетической зоне (щели), а также для реализации прыжковой проводимости по этим дефектам. Зарядовые состояния трехзарядных дефектов обозначим $|t, -1\rangle$, $|t, 0\rangle$ и $|t, +1\rangle$. Трехзарядные дефекты $|t, -1\rangle$ и $|t, 0\rangle$ формируют $|1\rangle$ -зону, а дефекты $|t, 0\rangle$ и $|t, +1\rangle$ формируют $|2\rangle$ -зону в запрещенной зоне, которая для дефектов t -типа расположена ближе к v -зоне, чем $|1\rangle$ -зона, а для дефектов s -типа $|2\rangle$ -зона расположена ближе к c -зоне, чем $|1\rangle$ -зона.

Считаем, что полупроводник содержит точечные трехзарядные дефекты с объемной концентрацией $N_t = N_{t,-1} + N_{t,0} + N_{t,+1} \equiv N_{-1} + N_0 + N_{+1}$ в зарядовых состояниях (-1) , (0) и $(+1)$. Предполагается, что водородоподобные доноры $|d\rangle$ и акцепторы $|a\rangle$ полностью ионизованы, и их концентрации в зарядовых состояниях $(+1)$ и (-1) составляют $N_d < N_t$ и $N_a < N_t$ соответственно. Прыжки одиночных электронов происходят с дефектов $|t, -1\rangle$ на дефекты $|t, 0\rangle$ и с дефектов $|t, 0\rangle$ на дефекты $|t, +1\rangle$. Биполяроны (пары электронов по [4]) прыгают с дефектов $|t, -1\rangle$ на дефекты $|t, +1\rangle$. Условие электрической нейтральности имеет вид:

$$N_{+1} + K_d N_t = N_{-1} + K_a N_t,$$

где используются степени компенсации трехзарядных дефектов водородоподобными донорами $0 \leq K_d (=N_d/N_t) < 1$ и акцепторами $0 \leq K_a (=N_a/N_t) < 1$.

Вероятность того, что трехзарядный дефект находится в одном из трех зарядовых состояний $Z = -1, 0, +1$ (см. [3, 5]):

$$f_Z = \frac{\exp[-(ZE_F + E_Z)/k_B T]}{\sum_Z \exp[-(ZE_F + E_Z)/k_B T]}, \quad (1)$$

где E_Z — свободная энергия трехзарядного дефекта (Гельмгольца для t -дефектов и Гиббса для s -дефектов); k_B — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура.

Для нахождения связи дрейфовых прыжковых подвижностей с коэффициентами прыжковой диффузии приравняем к нулю плотности прыжковых токов $J_{-1,0}$ и $J_{0,+1}$ одиночных электронов, а также биполяронов $J_{-1,+1}$ из работы [6] и получим:

$$\frac{D_{Z,Y}}{M_{Z,Y}} = \xi_{Z,Y} \frac{k_B T}{|Z - Y|e}, \quad (2)$$

где $Z, Y = -1, 0, +1$; $Z \neq Y$; $D_{Z,Y}$ и $M_{Z,Y}$ — коэффициенты прыжковой диффузии и дрейфовые прыжковые подвижности одиночных электронов и биполяронов; $\xi_{Z,Y}$ — безразмерные параметры, характеризующие степень влияния на величины $D_{Z,Y}$ и $M_{Z,Y}$ среднеквадратичных флуктуаций

$$W_t \approx 2.64e^2 N_{ch}^{1/3} / 4\pi\epsilon_r \epsilon_0$$

электростатической потенциальной энергии в кристалле [7]; $N_{ch} = N_{-1} + N_{+1} + K_d N_t + K_a N_t$ — суммарная концентрация заряженных трехзарядных дефектов и ионов примесей; $N_{ch} \approx N_t$ для $K_d = 0.5$ и $K_a = 0$; $\epsilon_r \epsilon_0$ — низкочастотная диэлектрическая проницаемость; $\epsilon_r = 11.5$ для кремния.

Из формулы (2) для $\xi_{Z,Y} \geq 1$ имеем [6, 7]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi_{-1,0}} &= \frac{1}{\langle f_{-1} \rangle \langle f_0 \rangle} (\langle f_{-1} \rangle + \langle f_0 \rangle) \langle f_{-1} f_0 \rangle + \\ &\quad + 2 \langle f_0 \rangle \langle f_{-1} f_{+1} \rangle - \langle f_{-1} \rangle \langle f_0 f_{+1} \rangle; \\ \frac{1}{\xi_{0,+1}} &= \frac{1}{\langle f_0 \rangle \langle f_{+1} \rangle} (\langle f_0 \rangle + \langle f_{+1} \rangle) \langle f_0 f_{+1} \rangle + \\ &\quad + 2 \langle f_0 \rangle \langle f_{-1} f_{+1} \rangle - \langle f_{+1} \rangle \langle f_{-1} f_0 \rangle; \end{aligned}$$

$$1/\xi_{-1,+1} = (\xi_{-1,0} + \xi_{0,+1})/2\xi_{-1,0}\xi_{0,+1}, \quad (3)$$

где $\langle f_Z \rangle$ — среднее значение функции f_Z по $|1\rangle$ - и $|2\rangle$ -зонам, каждая шириной W_t .

Результаты расчетов и их обсуждение

Оценим и сопоставим величины $\xi_{-1,0}$, $\xi_{0,+1}$ и $\xi_{-1,+1}$ для однородно разупорядоченного кристалла кремния *hd-Si*. Для радиационных трехзарядных дефектов в кристаллическом кремнии примем [8, 9]: $E_1 = 400$ мэВ и $E_2 = 700$ мэВ.

На рис. 1 показаны результаты вычислений по формулам (3) параметров $\xi_{-1,0}$, $\xi_{0,+1}$, $\xi_{-1,+1}$ (сплошные линии) и $\xi_{-1,0} = \xi_{0,+1} = \xi_{-1,+1} = 1$ (штриховая линия) для узких зон ($W_t \ll k_B T$) трехзарядных дефектов как функций температуры T при концентрации $N_t = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ для $K_d = 0.5$ и $K_a = 0$. Видно, что с увеличением температуры значения безразмерных параметров $\xi_{-1,0} > \xi_{-1,+1} > \xi_{0,+1}$ уменьшаются при учете флуктуаций электростатической потенциальной энергии. Отметим, что формулы (2), (3) применимы и при степенях компенсации $K_d = 0$ и $K_a = 0.5$, и в этом случае выполняется соотношение $\xi_{0,+1} > \xi_{-1,+1} > \xi_{-1,0}$.

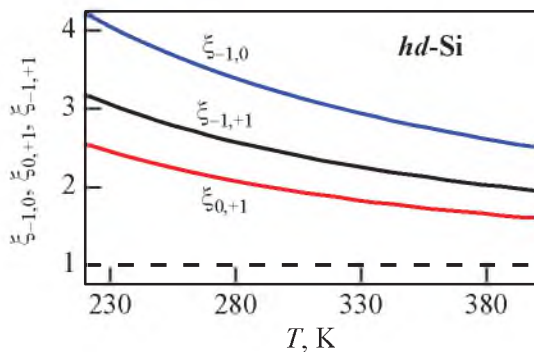


Рис. 1. Зависимости параметров $\xi_{-1,0}$, $\xi_{0,+1}$ и $\xi_{-1,+1}$ (сплошные линии) от абсолютной температуры T при $N_t = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ в *hd-Si*, рассчитанные по формулам (3) для $K_d = 0.5$ и $K_a = 0$; штриховая линия $\xi_{-1,0} = \xi_{0,+1} = \xi_{-1,+1} = 1$ для $W_t \ll k_B T$

Заключение

Получено аналитическое соотношение для отношений коэффициентов прыжковой диффузии к дрейфовым прыжковым подвижностям по трехзарядным $(-1, 0, +1)$ точечным дефектам одного сорта в однородно разупорядоченных полупроводниках. Проведены расчеты зависимостей отношения коэффициента диффузии к дрейфовой подвижности от температуры при концентрации трехзарядных дефектов $N_t = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и их компенсации водородопо-

добными донорами и акцепторами со степенями компенсации $K_d = 0.5$ и $K_a = 0$ в однородно разупорядоченных кристаллах кремния. Предложенные формулы (2) и (3) могут быть использованы для расчета соотношений между дрейфовыми прыжковыми подвижностями электронов и коэффициентами их прыжковой диффузии по трехзарядным точечным дефектам в элементах полупроводниковых приборных структур.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГПНИ Республики Беларусь «Материаловедение, новые материалы и технологии» (задание 1.8.2).

Библиографические ссылки

1. Poklonski N.A., Stelmakh V.F. Screening of electrostatic fields in crystalline semiconductors by electrons hopping over defects. *Physica Status Solidi B* 1983; 117(1): 93-99.
2. Poklonski N.A., Vyrko S.A., Zabrodski A.G. Quasi-classical description of the nearest-neighbor hopping dc conduction via hydrogen-like donors in intermediately compensated GaAs crystals. *Semiconductor Science and Technology* 2010; 25(8): 085006 (1-6).
3. Поклонский Н.А., Вyrко С.А., Забродский А.Г. Расчет электрической емкости самокомпенсированных полупроводников с междоузельными прыжками одного и двух электронов (на примере кремния с радиационными дефектами). *Физика и техника полупроводников* 2008; 42(12): 1420-1425.
4. Поклонский Н.А., Вyrко С.А., Ковалев А.И. Стационарная прыжковая миграция биполяронов по «мягким» точечным дефектам в частично разупорядоченных полупроводниках. *Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия физико-математических наук* 2014; (3): 91-96.
5. Blakemore J.S. *Semiconductor Statistics*. Dover; 2002. 381 p.
6. Поклонский Н.А., Деревяго А.Н., Вyrко С.А., Ковалев А.И. Миграция электронов по трехзарядным дефектам кристаллической матрицы. *Журнал БГУ. Физика* 2020; (1): 41-53.
7. Poklonski N.A., Anikeev I.I., Vyrko S.A. DC hopping photoconductivity via three-charge-state point defects in partially disordered semiconductors. *Physica Scripta* 2023; 98(1): 015823 (1-11).
8. Козлов В.А., Козловский В.В. Легирование полупроводников радиационными дефектами при облучении протонами и α -частицами. *Физика и техника полупроводников* 2001; 35(7): 769-795.
9. Брудный В.Н. Зарядовая нейтральность в полупроводниках: дефекты, границы раздела, поверхность. *Известия высших учебных заведений. Физика* 2013; 56(7): 27-29.