

ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЯХ Se И КОМПЛЕКСА С ЕГО УЧАСТИЕМ В Ge

А.Ш.Махмудов, П.К.Хабибуллаев, З.М.Хакимов,
А.А.Левин¹⁾

Методом функций Грина рассчитаны энергетические уровни Se и его комплексов в Ge. Результаты сопоставлены с экспериментальными данными. Предложены конкретные модели примесных центров, соответствующих донорным уровням в Ge : Se.

Как обычно считали до сих пор, примесный атом Se в Ge является двухзарядным донором с уровнями, отстоящими на 0,14 и 0,28 эВ от дна зоны проводимости¹. Однако, проведенные в² эксперименты по легированию Ge путем облучения тепловыми нейтронами показывают, что получающиеся атомы Se являются однозарядными центрами, находятся в узлах решетки, и порождают один уровень в запрещенной зоне Ge с энергией ионизации 0,28 эВ. При этом уровень 0,14 эВ, возможно, соответствует либо комплексу с участием Se, либо атому Se в междоузлии².

В настоящей работе сделана попытка вычислить локальные уровни Se и комплексов с участием Se в Ge, найти теоретическое положение уровня одиночного замещающего Se и предложить возможную модель агрегатного центра с участием Se, ответственного за уровень 0,14 эВ. Расчет проведен на основе полуэмпирического варианта метода функций Грина, МФГ³.

Здесь рассмотрены случаи когда замещающий Se находится в узле решетки, в двух соседних узлах (Se + Se) и в комплексе с соседней вакансией (Se + V) в Ge. Аналогично³, локальные уровни находились путем решения основного уравнения МФГ:

$$\det \parallel \tilde{I} - \tilde{G}^0 \tilde{U} \parallel = 0, \quad (1)$$

где \tilde{G}^0 , \tilde{U} - соответственно, подматрица ФГ идеального кристалла и матрица оператора возмущения. Матрица G^0 строилась с помощью данных по зонной структуре Ge⁴, рассчитанной методом ЛКАО (в базисе эквивалентных орбиталей (ЭО)⁵) с учетом взаимодействия атомов вплоть до третьих соседей. Матрица потенциала возмущения представлялась как разность двух матриц: $\tilde{U} = \tilde{H} - \tilde{H}^0$, где H = гамильтониан кристалла с дефектом, H^0 = гамильтониан идеального кристалла. Одноцентровые матричные элементы \tilde{H} и \tilde{H}^0 (кулоновские интегралы) при расчете \tilde{G}^0 и \tilde{U} полагались равными атомным уровням (и находились из данных по атомным спектрам⁵). Двухцентровые матричные элементы для взаимодействий атомов кристалла-матрицы подгонялись по зонной структуре идеального кристалла Ge. Двухцентровые матричные элементы (резонансные интегралы) для взаимодействий Ge—Se принимались равными соответствующим матричным элементам для взаимодействий Ge—Ge (ввиду близкого характера атомных волновых функций Ge и Se). Таким образом, в использованной модели примеси Se в узле решетки Ge матричные элементы потенциала возмущения целиком определяются разностью кулоновских интегралов (атомных уровней) для атомов примеси и матрицы, а матрица возмущения будет иметь вид 8×8 - матрица типа (12) в³. Тогда решение уравнения (1) для Se в Ge дает в запрещенной зоне германия один уровень $E_c - 0,32$ эВ.

Комплексы "Se + Se" и "Se + V" в Ge рассматривались следующим образом. Для дефекта "Se + Se" матрица потенциала возмущения \tilde{U} строилась аналогично случаю одиночного дефекта Se, но для более широкой области, включающей вторую координационную сферу дефекта, в базисе 32 ЭО (32 × 32 матрица). В случае дефекта "Se + V", вакансия моделировалась "псевдопримесью", которая имеет нулевые значения кулоновских и резонан-

1) Институт общей и неорганической химии им. Н.С.Курнакова АН СССР.

сных интегралов. Для Se-узла кулоновские интегралы как и ранее выбирались в виде атомных уровней селена. Решение уравнения (1) для обоих случаев дает по одному уровню: $E_c = 0,22$ эВ для дефекта "Se + Se", и $E_c = 0,13$ эВ для дефекта "Se + V".

Таким образом, в согласии с ², результаты расчета свидетельствуют, что Se в узле решетки Ge дает один локальный уровень с энергией $\sim E_c = 0,3$ эВ, а комплексы "Se + Se" и "Se + V" по одному менее глубокому уровню, т. е. с переходом от точечного (узельного) дефекта к комплексам наблюдается сдвиг локального уровня к краю зоны проводимости. Проведенный расчет позволяет сопоставить уровень 0,14 эВ дефектному комплексу "Se + V".

Авторы выражают благодарность Ю.А.Осипьяну за интерес к работе и обсуждение.

Литература

1. Милнс А. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. М.: Мир, 1977, с. 562.
2. Осипьян Ю.А., Прокопенко В.М., Тальянский В.И. Письма в ЖЭТФ, 1984, 39, 126; ЖЭТФ, 1984, 87, 269.
3. Махмудов А.Ш., Хакимов З.М., Левин А.А., Юнусов М.С., Хабибуллаев П.К. ФТТ, 1984, 26, 2159.
4. Пулатова Д.С., Хакимов З.М., Махмудов А.Ш., Юнусов М.С. ЖСХ, 1984, №2, 17.
5. Левин А.А. Введение в квантовую химию твердого тела. М.: Химия, 1974, с. 256.

Институт ядерной физики
Академии наук Узбекской ССР

Поступила в редакцию
18 марта 1985г.