

# Электростатические модели фазовых переходов металл–изолятор в кристаллах Ge и Si с водородоподобными примесями

Н. А. Поклонский

Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

В лекции излагаются результаты расчета параметров концентрационных фазовых переходов изолятор–металл и металл–изолятор в пределе нулевой температуры ( $T \rightarrow 0$ ).

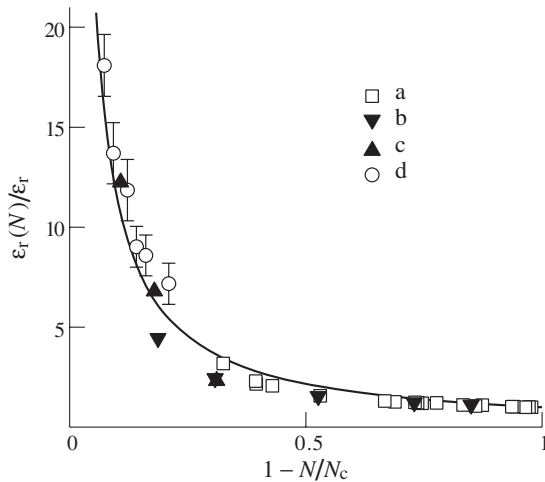
1. На изоляторной стороне перехода изолятор–металл при увеличении концентрации  $N$  легирующей примеси вплоть до критической концентрации  $N_c$  происходит неограниченное возрастание статической относительной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_r(N)$  кристаллического образца [1–3]. Для определенности рассмотрим кристаллический полупроводник  $n$ -типа с концентрацией доноров  $N = N_0 + N_{+1}$  в зарядовых состояниях (0) и (+1) и акцепторов в зарядовом состоянии (–1) с концентрацией  $N_{-1} = KN$ , где  $K$  — степень компенсации доноров. Условие электронейтральности:  $N_{+1} = KN$ .

По модели [4, 5] с учетом поляризуемости как атомов кристаллической матрицы, так и электрически нейтральных доноров, критическая концентрация  $N_c$  для перехода изолятор–металл и зависимость  $\varepsilon_r(N)$  от концентрации доноров  $N$  на изоляторной стороне имеют вид:

$$N_c^{1/3} a_H = \frac{0.542}{[(1 - K)(\varepsilon_r + 2)]^{1/3}}, \quad \varepsilon_r(N) = \frac{\varepsilon_r + 2N/N_c}{1 - N/N_c}, \quad (1)$$

где  $a_H = e^2/8\pi\varepsilon_r\varepsilon_0 I_{d(a)}$  — радиус орбиты электрона (дырки) одиночного водородоподобного донора (акцептора) с энергией ионизации  $I_{d(a)}$  в кристаллической решетке с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_r\varepsilon_0$ ;  $e$  — заряд электрона;  $K \ll 1$ ;  $\varepsilon_r(N \rightarrow 0) = \varepsilon_r$ .

Расчет зависимости  $\varepsilon_r(N)$  по формуле 1 для кристаллов кремния показан в сравнении с экспериментальными данными на рис. 1. При обработке экспериментальных данных [1, 3, 6, 7] использовались средние значения критических концентраций примесей для  $K \rightarrow 0$  (см. табл. 1):  $N_c(\text{Si:As}) = 7.8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_c(\text{Si:P}) = 3.8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_c(\text{Si:B}) = 4.1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

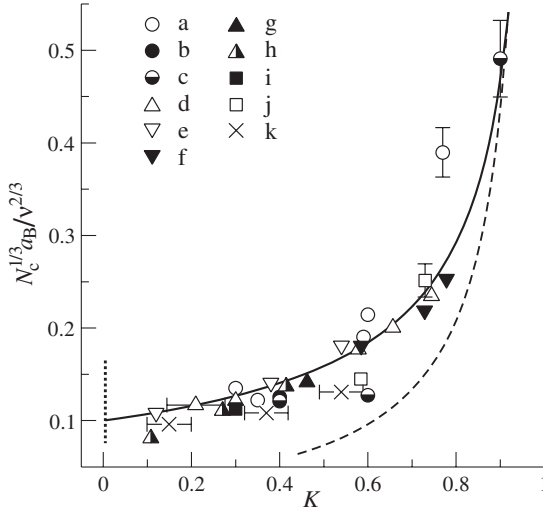


**Рис. 1.** Зависимость макроскопической относительной диэлектрической проницаемости  $\epsilon_r(N)$  слабо компенсированного кремния от концентрации  $N$  основных легирующих примесей. Точки — экспериментальные данные: *a* — *n*-Si:As [1], *b* — *n*-Si:P [6], *c* — *n*-Si:P [7], *d* — *p*-Si:B [3]. Кривая — расчет  $\epsilon_r(N)$  по 1 при  $K = 0$  и  $\epsilon_r = 11.5$

**Таблица 1.** Экспериментальные значения критической концентрации  $N_c$  примеси в кристаллах Si при разных степенях компенсации  $K$

Параметры кристалла, электронов (n) и дырок (p) [8, 9]	Легируемый полупроводник	$I_{d(a)}$ , мЭВ [8, 9]	$N_c$ , см <sup>-3</sup>	$K$	Источник
1	2	3	4	5	6
<b>Si</b> $\epsilon_r = 11.5$ $m_n = 0.322m_0$ $\nu_n = 6$ $m_p = 0.591m_0$ $\nu_p = 1$	<i>n</i> -Si:As	53.8	$7.8 \cdot 10^{18}$	$< 0.01$	[10]
	<i>n</i> -Si:P	45.6	$3.48 \cdot 10^{18}$	$< 0.01$	[11]
			$3.7 \cdot 10^{18}$	$< 0.01$	[12]
			$(4.15 \pm 0.2) \cdot 10^{18}$	$< 0.01$	[13]
			$(4.74 \pm 0.5) \cdot 10^{18}$	$0.15 \pm 0.05$	
			$(6.77 \pm 0.8) \cdot 10^{18}$	$0.37 \pm 0.05$	
	$(1.2 \pm 0.2) \cdot 10^{19}$	$0.54 \pm 0.05$			
<i>n</i> -Si:Sb	42.7	$2.9 \cdot 10^{18}$	$< 0.01$	[14]	
<i>p</i> -Si:B	44.4	$4.1 \cdot 10^{18}$	$< 0.01$	[15]	

**2.** С металлической стороны переход металл–диэлектрик экспериментально наблюдается как неограниченный рост электрического сопротивления на постоянном токе при уменьшении концентрации  $N$  примеси вплоть до  $N_c$  или при увеличении ее степени компенсации.



**Рис. 2.** Зависимость критической концентрации  $N_c$  доноров (акцепторов) в Ge и Si от степени их компенсации  $K$ . Точки — экспериментальные данные:  $a$  —  $p$ -Ge:Ga [27–29],  $b$  —  $p$ -Ge:Ga [21],  $c$  —  $p$ -Ge:Ga [30],  $d$  —  $n$ -Ge:As [23, 27, 31],  $e$  —  $n$ -Ge:As [22],  $f$  —  $n$ -Ge:As [24],  $g$  —  $n$ -Ge:Sb [24],  $h$  —  $n$ -Ge:Sb [23],  $i$  —  $n$ -Ge:Sb [32],  $j$  —  $n$ -Ge:P [23, 27],  $k$  —  $n$ -Si:P [13]. Сплошная линия — расчет по 3; штриховая линия — расчет по модели [17]. (Пунктиром при  $K = 0.01$  показан диапазон экспериментальных данных по  $N_c$  из работ [10–15, 18–26], представленных в табл. 1 и 2, со средним значением  $N_c^{1/3} a_B / \nu^{2/3} = 0.1$ )

Предполагается, что флуктуации электростатической энергии, создаваемые в кристалле ионами примесей и электронами проводимости, имеют гауссово (нормальное) распределение с дисперсией  $W^2$ . Из условия равенства уровня протекания (порога подвижности)  $E_\mu$  уровню Ферми  $E_F$ , зависимость критической для перехода металл–изолятор концентрации  $N_c$  примеси от степени ее компенсации  $K$  при температуре  $T \rightarrow 0$  можно получить [4, 5, 16] в виде (ср. [17]):

$$N_c^{1/3} a_B = 0.238 \left( \frac{W}{E_B} \right)^{1/2} \left[ \frac{\nu}{1-K} \int_{-\infty}^{E_\mu/W} \left( \frac{E_\mu}{W} - x \right)^{3/2} \exp \left( \frac{-x^2}{2} \right) dx \right]^{1/3}, \quad (2)$$

где  $a_B = 4\pi\epsilon_r\epsilon_0\hbar^2/me^2$ ,  $E_B = e^2/8\pi\epsilon_r\epsilon_0a_B$  — боровские радиус<sup>1</sup> и энергия;  $\nu$  — число долин в разрешенной для основных носителей заряда энергетиче-

<sup>1</sup>Для кристаллов Ge и Si как  $n$ -, так и  $p$ -типа  $a_H \neq a_B$ . Ясно, что для атома водорода в вакууме  $\epsilon_r = 1$ ,  $m = m_0$  и  $a_H = a_B$ .

**Таблица 2.** Критическая концентрация  $N_c$  примеси в кристаллах Ge при разных степенях компенсации  $K$  (номера в названиях столбцов соответствуют табл. 1)

1	2	3	4	5	6
<b>Ge</b> $\epsilon_f = 15.4$ $m_n = 0.22m_0$ $\nu_n = 4$ $m_p = 0.38m_0$ $\nu_p = 1$	<i>n</i> -Ge:As	14.2 мЭВ	$3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$	$K < 0.01$	[18]
			$3.5 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[19, 20]
			$(3.5 \pm 0.18) \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[22]
			$(4 \pm 0.2) \cdot 10^{17}$	$K = 0.12$	
			$(8.8 \pm 0.2) \cdot 10^{17}$	0.38	
			$(1.87 \pm 0.9) \cdot 10^{18}$	0.54	
			$3.83 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[23]
			$(5 \pm 1) \cdot 10^{17}$	$0.21 \pm 0.07$	[27]
			$5.64 \cdot 10^{17}$	0.3	[31]
			$1.86 \cdot 10^{18}$	0.58	[24]
	$3.3 \cdot 10^{18}$	0.73			
	$5.1 \cdot 10^{18}$	0.78			
	<i>n</i> -Ge:P	12.88	$2.5 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[19, 20]
			$2.56 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[23]
			$(5 \pm 1) \cdot 10^{18}$	0.73	[27]
	<i>n</i> -Ge:Sb	10.45	$1.5 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[18]
			$1.53 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[23]
			$1.68 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[25]
			$2 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[24]
			$8.9 \cdot 10^{17}$	0.46	
	<i>p</i> -Ge:Ga	11.32	$4.5 \cdot 10^{17}$	0.3	[32]
			$10^{17}$	$< 0.01$	[21]
			$2 \cdot 10^{17}$	0.4	
			$1.13 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[23]
			$1.86 \cdot 10^{17}$	$< 0.01$	[26]
			$2.5 \cdot 10^{17}$	0.3	[28]
			$1.85 \cdot 10^{17}$	0.35	[29]
			$(1.8 \pm 0.3) \cdot 10^{17}$	0.4	[30]
$(2.1 \pm 0.3) \cdot 10^{17}$			0.6		
$(1.2 \pm 0.3) \cdot 10^{19}$	0.9				
$(7 \pm 1) \cdot 10^{17}$	$0.59 \pm 0.02$	[27]			
$(1 \pm 0.2) \cdot 10^{18}$	$0.6 \pm 0.02$				
$(6 \pm 1) \cdot 10^{18}$	$0.77 \pm 0.02$				

ской зоне ( $\nu_n = 4$  для *n*-Ge,  $\nu_n = 6$  для *n*-Si;  $\nu_p = 1$  для *p*-Ge и *p*-Si);  $m$  — эффективная масса электрона (дырки) в одной долине.

В модели [4, 16] величина  $W = W_{nn} \approx 1.64(e^2/4\pi\epsilon_r\epsilon_0)(8\pi N_c/3)^{1/3}$  обусловлена кулоновским взаимодействием только ближайших зарядов (ионов примесей с концентрацией  $(1 + K)N_c$  и электронов проводимости с концен-

трацией  $n_c = (1 - K)N_c$ . Значение  $E_\mu/W_{nn} = -1.15$  находится согласованно с экспериментальными данными [10–15, 18–26] для некомпенсированных кристаллов:  $[N_c(K \rightarrow 0)]^{1/3} a_B/\nu^{2/3} = 0.1$  (см. табл. 1, 2). Если принять, что отношение  $E_\mu/W_{nn}$  равно  $-1.15$  для  $0 < K < 1$ , то из 2 следует зависимость  $N_c(K)$  для перехода металл–изолятор в виде (сплошная линия на рис. 2):

$$\frac{N_c^{1/3} a_B}{\nu^{2/3}} = \frac{0.1}{(1 - K)^{2/3}}. \quad (3)$$

В модели [17] величина  $W = W_s = (e^2/4\sqrt{2}\pi\epsilon_r\epsilon_0)(1+K)^{2/3}[N_c/(1-K)]^{1/3}$  обусловлена экранированием электронами (или дырками) флуктуаций концентрации ионов примесей. Полагая, что критическая доля объема полупроводника, содержащая электроны и соответствующая уровню их протекания, равна 0.17, имеем  $E_\mu/W_s = -0.675\sqrt{2}$ . Расчет  $N_c(K)$  по модели [17] с учетом формулы 2 при  $W = W_s$  показан на рис. 2 штриховой линией.

## Литература

- [1] T. G. Castner. *Phil. Mag.* В **42** (6) 873–893 (1980).
- [2] T. G. Castner, N. K. Lee, H. S. Tan, L. Moberly, O. Symko. *J. Low Temp. Phys.* **38** (3-4) 447–473 (1980).
- [3] M. Lee, J. G. Massey, V. L. Nguyen, B. I. Shklovskii. *Phys. Rev. B* **60** (3) 1582–1591 (1999).
- [4] Н. А. Поклонский, А. И. Сягло. *ФТТ* **40** (1) 147–151 (1998).
- [5] Н. А. Поклонский, С. А. Вырко, А. Г. Забродский. *ФТТ* **46** (6) (2004).
- [6] M. Capizzi, G. A. Thomas, F. DeRosa, R. N. Bhatt, T. M. Rice. *Phys. Rev. Lett.* **44** (15) 1019–1022 (1980).
- [7] H. F. Hess, K. DeConde, T. F. Rosenbaum, G. A. Thomas. *Phys. Rev. B* **25** (8) 5578–5580 (1982).
- [8] *Semiconductors — Basic data*, ed. by O. Madelung (Berlin, Springer, 1996).
- [9] *Handbook series on semiconductor parameters*, ed. by M. Levinstein, S. Rumyantsev, M. Shur (Singapore, World Scientific, 1996) v. 1; (Singapore, World Scientific, 1999) v. 2.
- [10] P. F. Newman, D. F. Holcomb. *Phys. Rev. B* **28** (2) 638–640 (1983).
- [11] P. Dai, Y. Zhang, M. P. Sarachik. *Phys. Rev. B* **49** (19) 14039–14042 (1994).
- [12] G. A. Thomas, M. Paalanen, T. F. Rosenbaum. *Phys. Rev. B* **27** (6) 3897–3900 (1983).
- [13] U. Thomanschefsky, D. F. Holcomb. *Phys. Rev. B* **45** (23) 13356–13362 (1992).
- [14] A. P. Long, H. V. Myron, M. Pepper. *J. Phys. C* **17** (17) L425–L432 (1984).
- [15] P. Dai, S. Bogdanovich, Y. Zhang, M. P. Sarachik. *Phys. Rev. B* **52** (16) 12439–12440 (1995).
- [16] Н. А. Поклонский, С. А. Вырко. *Журн. прикл. спектр.* **69** (3) 375–382 (2002).

- [17] B. I. Shklovskii, A. L. Efros. *Electronic properties of doped semiconductors* (Berlin, Springer, 1984).
- [18] А. Т. Лончаков, Г. А. Матвеев, И. М. Цидильковский. ФТП **22** (8) 1396–1400 (1988).
- [19] P. P. Edwards, M. J. Sienko. Phys. Rev. B **17** (6) 2575–2581 (1978).
- [20] M. N. Alexander, D. F. Holcomb. Rev. Mod. Phys. **40** (4) 815–829 (1968).
- [21] H. Fritzsche. Phil. Mag. B **42** (6) 835–844 (1980).
- [22] R. Rentzsch, M. Müller, Ch. Reich, B. Sandow, A. N. Ionov, P. Fozooni, M. J. Lea, V. Ginodman, I. Shlimak. Phys. Stat. Sol. (b) **218** (1) 233–236 (2000).
- [23] А. Г. Забродский, М. В. Алексеенко, А. Г. Андреев, М. П. Тимофеев. Тез. докл. 25-го Всесоюзн. совеща. по физике низких температур (Ленинград, 1988) ч. 3, с. 60–61.
- [24] W. Sasaki, C. Yamanouchi. Journal of Non-Crystalline Solids **4** 183–191 (1970).
- [25] S. B. Field, T. F. Rosenbaum. Phys. Rev. Lett. **55** (5) 522–524 (1985).
- [26] K. M. Itoh. Phys. Stat. Sol. (b) **218** (1) 211–216 (2000).
- [27] А. Г. Забродский. ФТП **14** (8) 1492–1498 (1980).
- [28] A. G. Zabrodskii, A. G. Andreev. Int. J. Mod. Phys. B **8** (7) 883–889 (1994).
- [29] A. G. Zabrodskii, A. G. Andreev, S. V. Egorov. Phys. Stat. Sol. (b) **205** (1) 61–68 (1998).
- [30] R. Rentzsch, O. Chiatti, M. Müller, A. N. Ionov. Phys. Stat. Sol. (b) **230** (1) 237–241 (2002).
- [31] А. Г. Забродский, К. Н. Зиновьева. ЖЭТФ **86** (2) 727–742 (1984).
- [32] F. R. Allen, R. H. Wallis, C. J. Adkins. Proc. 5th Int. Conf. Amorphous and liquid semiconductors (Garmisch-Partenkirchen, 1973), ed. by J. Stuke, W. Brening (London, Taylor & Francis, 1974) v. 2, p. 895–900.