

## КИНЕТИКА СВОБОДНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛЕ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТЕНКИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

К. О. КЕЧЕЧЯН, А. А. КИРАКОСЯН

Методом, основанным на отождествлении энергетических потерь носителей заряда и выделившейся в системе джоулевой теплоты, получено выражение для подвижности носителей заряда, движущихся в поле дислокационной стенки из краевых дислокаций, зависящее от температуры и концентрации носителей заряда, междислокационного расстояния  $D$ , а также от направления скорости дрейфа. Отдельно рассмотрены случаи вырожденного и невырожденного полупроводника. В первом случае подвижность с увеличением  $D$  растет немонотонно, обнаруживая пики при значениях параметров, удовлетворяющих условию брэгговской дифракции носителей заряда на периодическом потенциале дислокационной стенки.

1. Структуры типа дислокационной стенки (ДС) представляют значительный интерес по многим причинам. Так, например, вблизи ДС возникает высокопроводящий тонкий слой со значительной концентрацией носителей заряда (НЗ) [1], который наряду с МОП-структурой [2] и системами локализованных над диэлектриком электронов [3] является удобным объектом исследований физики двумерных систем. Далее, ввиду того, что дислокации в стенке расположены строго периодически, можно ожидать проявления свойств, в определенной мере аналогичных наблюдаемым в сверхрешетках. ДС встречаются в поликристаллических образцах в виде межзеренных границ. Их можно получить и искусственным путем (плоскость спайности бикристаллов [1, 4]), причем, что весьма важно, с заданным периодом дислокационной сверхрешетки. Наконец, заслуживает внимания также возможность создания различных приборов на основе таких структур [4].

В настоящей работе методом, предложенным Калкином и Николсоном [5] и обобщенным Фарваком и Герлахом [6] для произвольного рассеивающего потенциала, вычислена подвижность НЗ в полупроводниковом образце, содержащем ДС из краевых дислокаций. Суть метода заключается в приравнивании рассчитанных на основе диэлектрического формализма энергетических потерь газа НЗ, движущихся в поле произвольного рассеивающего потенциала, джоулевой теплоте, выделяющейся в кристалле:

$$-\frac{1}{V} \frac{dW}{dt} = \frac{j^2}{\sigma} = \frac{n_0 e v^2}{\mu}, \quad (1)$$

где  $v$  — дрейфовая скорость,  $n_0$  — концентрация НЗ,  $V$  — объем области, где действует данный механизм рассеяния. Энергетические потери при  $v \ll v_T$ ,  $v_F$  ( $v_T$  и  $v_F$  — соответственно тепловая и фермиевская скорости) вычисляются по формуле [6]

$$-\frac{dW}{dt} = \frac{1}{4\pi} \int (\mathbf{k}\mathbf{v})^2 k^2 |V(\mathbf{k})|^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} [\text{Im} \varepsilon^{-1}(\mathbf{k}, \omega)] \right\}_{\omega=0} d\mathbf{k}, \quad (2)$$

где  $V(\mathbf{k})$  — фурье-образ рассеивающего потенциала,  $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$  — функция диэлектрической проницаемости.

2. Потенциал ДС из краевых дислокаций состоит из двух частей: потенциала деформации  $V_d(\mathbf{r})$ , порожденного полем внутренних деформаций вблизи стенки, и электростатического потенциала  $V_e(\mathbf{r})$ . Воспользовавшись выражением для поля смещений  $\mathbf{u}$  [7], в случае расположения

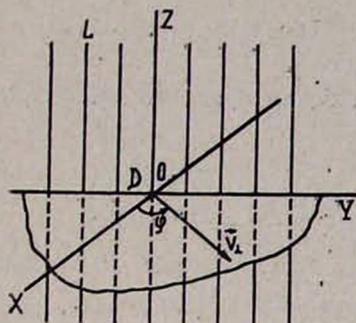


Рис. 1. Дислокационные линии  $L$  параллельны оси  $z$ ,  $v_{\perp}$  — проекция вектора дрейфовой скорости  $\mathbf{v}$  на плоскость  $xy$ .

дислокаций, изображенного на рис. 1, для потенциала деформации получаем

$$V_d(\mathbf{r}) = E_d \text{div } \mathbf{u} = -\frac{E_d(1-2\nu)b}{2(1-\nu)D} \frac{\sin \frac{2\pi}{D} y}{\text{ch} \frac{2\pi}{D} x - \cos \frac{2\pi}{D} y}, \quad (3)$$

где  $E_d$  — постоянная деформационного потенциала,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $b$  — модуль вектора Бюргера.

Фурье-образ  $V_d(\mathbf{r})$  дается выражением

$$V_d(\mathbf{k}) = \frac{i(2\pi)^{3/2} E_d(1-2\nu)b}{(1-\nu)D^2} \frac{\delta(k_z)}{k^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \delta\left(k_y + \frac{2\pi}{D} n\right). \quad (4)$$

Для вычисления электростатического потенциала краевых дислокаций мы, в соответствии со схемой Шюкли «болтающихся связей» [4], принимаем модель равномерно заряженных нитей, т. е. находим потенциал из следующего уравнения Пуассона:

$$\Delta V_e(\mathbf{r}) = -4\pi q_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x) \delta(y - nD), \quad (5)$$

где  $q_0 = e^2 f/a$ ,  $a$  — постоянная решетки,  $f$  — коэффициент заполнения свободных связей.

Решение (5) можно записать в виде

$$V_e(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi q_0}{D} |x| + 2q_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \exp\left(-\frac{2\pi n|x|}{D}\right) \cos\left(\frac{2\pi ny}{D}\right). \quad (6)$$

Первый член в (6) соответствует потенциалу заряженной плоскости, а периодический в направлении  $y$  второй член учитывает дискретность распределения заряженных нитей, составляющих ДС. Фурье-образ (6) есть [8]

$$V_e(\mathbf{k}) = \frac{2(2\pi)^{3/2}}{D} q_0 \frac{\delta(k_x)}{k^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(k_y + \frac{2\pi}{D} n\right). \quad (7)$$

Заметим, что (5) записано для «затравочного» потенциала, поскольку динамическое экранирование уже учтено в (2).

3. Перейдем к вычислению подвижности. Рассмотрим отдельно случаи невырожденного и вырожденного полупроводника.

В первом случае воспользуемся больцмановским пределом диэлектрической функции Линдхарда [9]:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Im } \varepsilon^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = - \frac{\pi^{1/2} n_0 e^2 m^{1/2} k \omega}{2^{1/2} (k_B T)^{3/2} \varepsilon_L^2 (k^2 + k_{DH}^2)^2} \exp\left(-\frac{\hbar^2 k^2}{8 m k_B T}\right), \quad (8)$$

где  $k_{DH}^2 = 4\pi n_0 e^2 / \varepsilon_L k_B T$ ,  $\varepsilon_L$  — статическая диэлектрическая проницаемость,  $m$  — эффективная масса НЗ,  $k_B$  — постоянная Больцмана.

Из двумерности  $V(\mathbf{r}) = V_d(\mathbf{r}) + V_e(\mathbf{r})$  и (2) следует, что энергетические потери не зависят от компоненты дрейфовой скорости  $v_z$ . Следовательно, отличными от нуля компонентами тензора подвижности, вычисленными из (1), будут  $\mu_{xx}^{-1} = \mu_{yy}^{-1} \equiv \mu_{\perp}^{-1}$ .

Подставляя  $V(\mathbf{k}) = V_d(\mathbf{k}) + V_e(\mathbf{k})$  из (4) и (7) и  $\varepsilon^{-1}$  из (8) в (2), после несложных вычислений получаем

$$\mu_{\perp}^{-1} = \mu_B^{-1} [f_1(R, q, p) \cos^2 \varphi + f_2(R, q, p) \sin^2 \varphi], \quad (9)$$

$$f_1 = \frac{2}{\pi^{1/2}} \left\{ (p^2 - q^2) e^{q^2} \text{Ei}(-q^2) + \frac{1}{q^2} (p^2 - q^2) + 2\pi^2 (p^2 - q^2)^{1/2} \times \right. \\ \left. \times [1 + R^2(p^2 - q^2)] \left[ \left( \frac{1}{p} + 2p \right) \text{Erfc}(p) - e^{-p^2} \right] \right\}, \quad (9')$$

$$f_2 = \frac{4}{p^2} (p^2 - q^2)^{3/2} [1 + R^2(p^2 - q^2)] \left[ \left( \frac{1}{p} - 2p \right) \text{Erfc}(p) - e^{-p^2} \right], \quad (9'')$$

где введены обозначения

$$\mu_B = \frac{\varepsilon_L^2 e (k_B T)^{3/2}}{m^{1/2} q_0} L_x, \quad R^2 = \frac{E_d^2 (1 - 2\nu)^2 b^2 m k_B T}{2\pi q_0^2 (1 - \nu)^2 \hbar^2}, \quad (10)$$

$$q^2 = \frac{\hbar^2 k_{DH}^2}{8 m k_B T}, \quad p^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m k_B T D^2} + q^2,$$

$\text{Erfc}(x)$  — функция ошибок,  $\text{Ei}(x)$  — интегральный логарифм [10].

Расчет проведен в приближении  $p^2 - q^2/2 > 1$ , которое при комнатных температурах ограничивает междислокационное расстояние  $D$  сверху значениями  $D_0 \lesssim 7 \div 8$  нм. При  $D > D_0$  можно считать, что отдельные

дислокации рассеивают независимо. Ширину слоя  $L_x$ , в котором эффективен потенциал стенки, можно положить равной дебаевской длине экранирования  $k_{DH}^{-1}$ . Первые два члена в выражении (9') вычислены без приближений и соответствуют модели заряженной плоскости в соответствии со сказанным выше о потенциале  $V_e(r)$ .

В случае вырождения воспользуемся выражением для  $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$  в приближении Томаса—Ферми [5]:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Im} \varepsilon^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{\pi k_{FT} \omega k}{2 \varepsilon_L v_F (k^2 + k_{FT}^2)^2}, \quad (11)$$

где  $k_{FT} = (12 \pi n_0 e^2 / m v_F^2 \varepsilon_L)^{1/2}$  — параметр экранирования,  $v_F$  — фермиевская скорость. В этом пределе вычисления, проведенные до конца без приближений, дают следующий результат:

$$\mu_{\perp}^{-1}|_{T=0} = \mu_F^{-1} [F_1(Q, r, s) \cos^2 \varphi + F_2(Q, r, s) \sin^2 \varphi], \quad (12)$$

$$F_1 = \frac{r^2}{\pi s^2} \left\{ \frac{1}{1+r^2} + \frac{2}{s^3} \sum_{n=1}^{[s]} (s^2 + Q^2 n^2) \left[ \frac{(s^2 - n^2)^{1/2}}{1+r^2} - \frac{n^2}{(s^2 + n^2 r^2)^{1/2}} \text{Arth} \frac{(s^2 - n^2)^{1/2}}{(s^2 + n^2 r^2)^{1/2}} \right] \right\}, \quad (12')$$

$$F_2 = \frac{2r^2}{\pi s^2} \sum_{n=1}^{[s]} (s^2 + Q^2 n^2) \left[ \frac{n^2 (2s^2 + n^2 r^2)}{(s^2 + n^2 r^2)^{3/2}} \text{Arth} \frac{(s^2 - n^2)^{1/2}}{(s^2 + n^2 r^2)^{1/2}} - \frac{n^2 r^2 (s^2 - n^2)^{1/2}}{(1+r^2)(s^2 + n^2 r^2)} \right], \quad (12'')$$

где введены обозначения

$$\mu_F = \frac{n_0 e^3 \varepsilon_L \hbar}{m k_F q_0^2} L_x, \quad Q = \frac{E_d (1-2\nu) b k_F}{2 \pi q_0 (1-\nu)}, \quad (13)$$

$$s = \frac{D k_F}{\pi}, \quad r = 2 \frac{k_F}{k_{FT}}.$$

В качестве ширины слоя  $L_x$  следует взять  $k_{FT}^{-1}$ . Модели равномерно заряженной плоскости соответствует первый член в (12').

Вулом и Заварицкой измерена подвижность дырок в тонком слое, окружающем ДС (плоскость спайности бикристалла) в германии [1]. В полученной ими экспериментальной кривой зависимости  $\mu_{\perp}$  от  $D$  виден резкий спад при  $D \approx 3$  нм. График зависимости  $\mu_{\perp}/\mu_F$  от  $s$ , построенный согласно формуле (12), для значений параметров из [1] приведен на рис. 2. Резонансный вид кривых 2 и 3 обусловлен тем, что с ростом  $s$  (т. е. концентрации  $n_0$  или периода  $D$ ) границы первой и следующих зон Бриллюэна пересекают сферу Ферми; при этом имеет место брэгговская дифракция НЗ на ДС, что и приводит к уменьшению подвижности. Точка

$s = 1$  как раз соответствует значению  $D \approx 3$  нм (при  $n_0 = 0,33 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$  [1]). Экспериментальной кривой соответствует на нашем рисунке кривая 3, которая неограниченно растет при  $s \rightarrow 1 + 0$ . Это обстоятельство, а также большие расчетные значения подвижности (в точке минимума  $\mu_{\perp} \approx 600 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ ) по сравнению с экспериментальными обусловлены, по-видимому, наличием других механизмов рассеяния (например, на ядрах дислокаций).

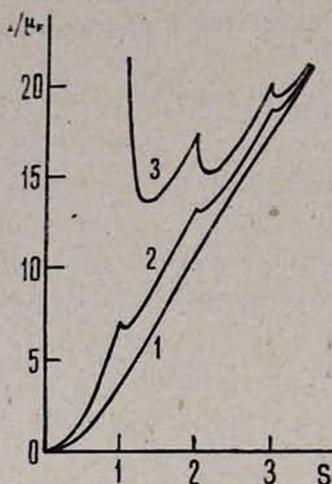


Рис. 2. Зависимость  $\mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  от  $s$  для трех значений угла  $\varphi$ :  $\varphi=0^\circ$  (1),  $\varphi=45^\circ$  (2),  $\varphi=90^\circ$  (3).

В заключение заметим, что формулы (9) и (12) дают возможность вычислить изотропную подвижность НЗ в поликристаллических образцах, обусловленную рассеянием на межзеренных границах. Усредняя энергетические потери  $dW/dt$  по углам и по образцу, из формул (1) и (12) в случае вырождения получаем

$$\mu_{\text{полукр.}}^{-1} \Big|_{T=0} = \frac{mk_F q_0^2}{4 n_0 e^3 \varepsilon_L \hbar \bar{L}} [F_1(Q, r, \bar{s}) + F_2(Q, r, \bar{s})], \quad (14)$$

где  $\bar{L}$  — средний размер зерен,  $\bar{s}$  соответствует среднему междислокационному расстоянию в стенках  $\bar{D}$ . Аналогичное выражение получается из (9) и для невырожденного полупроводника.

Ереванский государственный университет

Поступила 10. IX. 1980

## ЛИТЕРАТУРА

1. Б. М. Вул, Э. И. Заварицкая. ЖЭТФ, 76, 1089 (1979).
2. Т. Ando. Surface Sci., 73, 1 (1978).
3. В. С. Эдельман. УФН, 130, 675 (1980).
4. Г. Матаре. Электроника дефектов в полупроводниках, Изд. Мир, М., 1974.
5. M. G. Calkin, P. J. Nicolson. Rev. Mod. Phys., 39, 361 (1967).
6. J. L. Farvacque, E. Gerlach. Phys. Stat. Sol. (b), 77, 651 (1976).
7. Дж. Хирт, И. Логг. Теория дислокаций, Атомиздат, М., 1972.
8. Ю. А. Брычков, А. П. Прудников. Интегральные преобразования обобщенных функций, Изд. Наука, М., 1977.
9. E. Gerlach. Phys. Stat. Sol. (b), 61, K 97 (1974).
10. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, М., 1963.

ԱԶԱՏ ԼԻՑԲԱԿԻՐՆԵՐԻ ԿԻՆԵՏԻԿԱՆ ԴԻՍԼՈԿԱՑԻՈՆ  
ՊԱՏԻ ԴԱՇՏՈՒՄ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ

Կ. Ն. ՔԵՉԵՉՅԱՆ, Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Լիցքակիրների էներգետիկ կորուստների և համակարգում անշատված ջոուլյան շերտության նույնականացման վրա հիմնված մեթոդի օգնությամբ ստացված է եզրային դիսլոկացիաներից կաղմված պատի դաշտում շարժվող լիցքակիրների շարժունակության համար արտահայտություն, կախված շերտաստիճանից, լիցքակիրների խտությունից, դիսլոկացիաների միջև եղած  $D$  հեռավորությունից, ինչպես նաև դրեյֆի արագության ուղղությունից: Քննարկված են ալլասերված և ոչ ալլասերված կիսահաղորդչի դեպքերը: Առաջին դեպքում  $D$ -ի մեծացման հետ շարժունակությունն աճում է ոչ մոնոտոն, հասնելով մաքսիմումների պարամետրերի այն արժեքների դեպքում, որոնք բավարարում են լիցքակիրների՝ դիսլոկացիոն պատի պարբերական պոտենցիալի վրա բրեզյան դիֆրակցիայի պայմանին:

KINETICS OF FREE CARRIERS IN THE FIELD  
OF DISLOCATION WALL IN SEMICONDUCTORS

K. O. KECHECHIAN, A. A. KIRAKOSIAN

An expression for the mobility of charge carriers in the field of dislocation wall of the edge dislocation is obtained using the method based on the identification of carriers energy losses and the evolved Joule heat. It depends on the temperature, concentration, interdislocation distance  $D$  and the direction of drift velocity. The cases of degenerate and nondegenerate semiconductors are considered separately. In the first case the mobility increases non-monotonously with  $D$ , displaying the peaks for the values of parametres, satisfying the condition of Bragg diffraction for charge carriers on the periodic potential of dislocation wall.