

ПОДВИЖНОСТЬ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ОЧЕНЬ ЧИСТЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ДИСЛОКАЦИЯМИ

К. О. КЕЧЕЧЯН, А. А. КИРАКОСЯН

Методом, развитым Фуджитой с соавторами при вычислении проводимости и учитывающим квазичастичные эффекты, выведено выражение для подвижности в очень чистом дислокационном полупроводнике. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

Вычисление кинетических коэффициентов методом кинетического уравнения Больцмана предполагает рассеяние носителей заряда на одном центре. Тем самым пренебрегается влиянием всех остальных центров рассеяния, т. е. конечностью времени жизни носителя в данном квантовом состоянии [1]. В очень чистых полупроводниках, когда концентрация носителей мала ($n \lesssim 10^{13} \text{ см}^{-3}$), а радиус экранировки соответственно не мал, учет квазичастичных эффектов становится принципиально необходимым.

Учет квазичастичных эффектов в очень чистых полупроводниках особенно важен при вычислении подвижности носителей, обусловленной рассеянием на дислокациях. Дело в том, что из-за сильно дальнедействующего характера поля дислокации электрон (дырка) движется в усредненном поле практически всех дислокаций. Проведенный Педером [1, 2] расчет в рамках обычной теории Больцмана дает для подвижности значение, завышенное по сравнению с экспериментальным почти в два раза. Более удовлетворительное совпадение с экспериментом можно получить с помощью теории, учитывающей конечность времени жизни носителей при вычислении кинетических коэффициентов. Такая теория последовательно развита Фуджитой с соавторами в работах [3—5] для электрон-примесных систем с помощью разложения по связным диаграммам формулы Кубо для проводимости.

В настоящей работе в рамках вышеупомянутого формализма вычислена подвижность носителей в полупроводниках с параллельными краевыми дислокациями. Такая ситуация реализуется при рождении дислокаций в результате пластического изгиба кристалла [1].

Рассмотрим рассеяние носителей заряда на краевой дислокации, потенциал которой в модели «болтающихся» связей имеет вид [6]

$$V(\rho) = V_0 K_0(\lambda \rho), \quad V_0 = \frac{2e^2 f}{\epsilon a}, \quad (1)$$

где ρ — двумерный радиус-вектор, $\lambda^{-1} = (\epsilon k_B T / 4 \pi n e^2)^{1/2}$ — дебаевский радиус экранирования, f — коэффициент заполнения связей, a — расстояние между «болтающимися» связями (порядка постоянной решетки), ϵ — статическая диэлектрическая проницаемость среды, K_0 — модифицированная

функция Бесселя нулевого порядка. Из (1) следует, что задача чисто двумерная.

Воспользуемся следующим уравнением для обратного времени релаксации по импульсу $\Gamma(\mathbf{p}) = [\tau(\mathbf{p})]^{-1}$ [5]:

$$\Gamma(\mathbf{p}) = 8\pi^2 N_D \hbar^{-1} \int d\mathbf{q} V^2(\mathbf{q}) D(\mathbf{p}, \mathbf{q}) (1 - \cos \chi), \quad (2)$$

$$D(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{\hbar \Gamma}{(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}})^2 + \hbar^2 \Gamma^2}, \quad (3)$$

где N_D — концентрация дислокаций, $V(\mathbf{q})$ — фурье-образ потенциала, χ — угол между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p} + \hbar\mathbf{q}$, $\varepsilon_{\mathbf{p}} = p^2/2m^*$ — кинетическая энергия электрона. Заметим, что при $\Gamma \rightarrow 0$ из (2) получается обычное больцмановское выражение

$$\Gamma(\mathbf{p}) = (2\pi)^2 N_D \hbar^{-1} \int d\mathbf{q} V^2(\mathbf{q}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}}) (1 - \cos \chi). \quad (4)$$

С целью упрощения расчета сделаем допущение, которое ниже будет обосновано, а именно, заменим в (2) $D(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ на $D(\mathbf{p}, 0) = 1/\hbar\Gamma$. Тогда вместо (2) получим

$$\Gamma^2(\mathbf{p}) = 8\pi^2 N_D \hbar^{-2} \int d\mathbf{q} V^2(\mathbf{q}) (1 - \cos \chi). \quad (5)$$

Подставляя в (5) фурье-образ потенциала (1)

$$V(\mathbf{q}) = (2\pi)^{-2} \int d\mathbf{p} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{p}} V(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-1} V_0 (q^2 + \lambda^2)^{-1} \quad (6)$$

и произведя интегрирование, для $\Gamma(\mathbf{p})$ получим следующее выражение:

$$\Gamma = (2\pi)^{1/2} N_D^{1/2} V_0 p^{-1} G(x)^{1/2}, \quad (7)$$

где

$$G(x) = x^2 - x(1+x^2)^{1/2} E\left[\frac{x}{(1+x^2)^{1/2}}\right] + x(1+x^2)^{-1/2} K\left[\frac{x}{(1+x^2)^{1/2}}\right],$$

$$x = \frac{p}{\hbar\lambda},$$

а $K(z)$ и $E(z)$ — полные эллиптические интегралы соответственно I и II рода. График функции $G(x)$ представлен на рис. 1.

Обоснуем теперь сделанное допущение. Для этого представим (3) и (6) в виде

$$V^2(\mathbf{q}) = \left(\frac{V_0}{2\pi}\right)^2 (\hbar p \lambda)^{-2} \Phi(y), \quad (8)$$

$$D(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{\Gamma} \Delta(\cos \varphi, y),$$

где введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned}\Phi(y) &= (1 + y^2)^{-2}, \\ \Delta(\cos \varphi, y) &= [(2 C_0 y \cos \varphi + C_1 y^2)^2 + 1]^{-1}, \\ y &= \frac{q}{\lambda}, \quad C_0 = \frac{\lambda p}{2m^* \Gamma}, \quad C_1 = \frac{\hbar \lambda^2}{2m^* \Gamma},\end{aligned}\quad (9)$$

φ — угол между p и q .

Подставив в (9) Γ из (7), сравним крутизну Φ и Δ в точке максимума $y = 0$. Для значений параметров $n = 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $N_D = 10^4 \text{ см}^{-2}$, $T = 1 \text{ K}$, $\epsilon = 16$, $m^* = 0,1 m_0$, $f = 0,1$ графики функций Φ и Δ приведены на рис. 2. Как видно из рисунка, в области, дающей основной

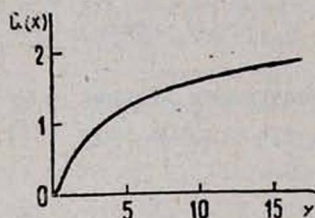


Рис. 1. График функции $G(x)$.

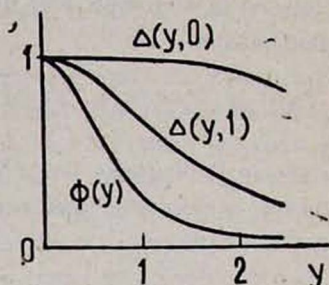


Рис. 2. Графики функций $\Phi(y)$ и $\Delta(\cos \varphi, y)$ для значений параметров: $n = 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $N_D = 10^4 \text{ см}^{-2}$, $T = 1 \text{ K}$, $\epsilon = 16$, $m^* = 0,1 m_0$, $f = 0,1$.

вклад в интеграл, функция $\Phi(y)$ меняется значительно быстрее функции $\Delta(\cos \varphi, y)$, следовательно, последнюю величину можно вынести из-под знака интеграла, т. е. замена $D(p, q) \rightarrow D(p, 0)$ оправдана. При выбранных типичных значениях ϵ , m^* и f можно показать, что условием применимости формулы (7) является следующее численное соотношение между n , N_D и T :

$$\lg \left(\frac{n T^2 \text{ см}}{N_D \text{ град}^2} \right) \lesssim 8.$$

Для выяснения условия применимости бoльцмановских выражений для Γ и подвижности μ нужно использовать в оценках выражение для Γ , полученное из (2) Педером:

$$\Gamma^0(p) = \frac{4 \pi^2 N_D m^* V_0^2}{\lambda (\hbar^2 \lambda^2 + 4 p^2)^{3/2}}. \quad (10)$$

Сравнение функций $\Phi(y)$ и $\Delta(\cos \varphi, y)$ показывает, что при

$$\lg \left(\frac{n}{N_D} \text{ см} \right) \geq 10,7$$

функция $\Delta(\cos \varphi, y)$ меняется значительно быстрее функции $\Phi(y)$, следовательно, $D(p, q)$ можно заменить на $p \delta(\epsilon_p + \hbar q - \epsilon_p)$. Таким образом,

при малых концентрациях носителей, когда экранировка слаба, и при больших концентрациях дислокаций верна формула (7). В обратном случае сильной экранировки взаимодействия с дислокациями и малой концентрации последних следует пользоваться бальцмановским выражением (10).

Вычислим проводимость σ по формуле

$$\sigma = - (2 \pi \hbar)^{-2} e^2 m^{*-2} \int d p p_x^2 \Gamma^{-1}(\mathbf{p}) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_p}, \quad (11)$$

где

$$f = n (2 \pi \hbar)^2 (2 \pi m^* k_B T)^{-1} \exp \left(- \frac{\varepsilon}{k_B T} \right)$$

есть функция распределения Больцмана.

Произведя в (11) замену переменной интегрирования и подставив Γ из (7), для μ из соотношения $\mu = \sigma / e n$ получим выражение

$$\mu = \frac{e}{(\pi m^* N_D)^{1/2} V_0 (k_B T)^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{G(\varepsilon)^{1/2}} \exp \left(- \frac{\varepsilon}{k_B T} \right) d\varepsilon. \quad (12)$$

Числитель подынтегрального выражения имеет максимум при $\varepsilon = \frac{3}{2} k_B T$. Для приведенных выше значений параметров

$$x_0 = x \Big|_{\varepsilon = \frac{3}{2} k_B T} = 5,36.$$

Как видно из рис. 1, функция $G(x)$ в окрестности x_0 меняется медленно и ее можно вынести за знак интеграла. Элементарное интегрирование дает для μ следующее окончательное выражение:

$$\mu = \frac{3}{8} \frac{a \varepsilon (k_B T)^{1/2}}{e f [m^* N_D G(x_0)]^{1/2}}. \quad (13)$$

Сравним (13) с бальцмановским выражением для μ , полученным с помощью (10):

$$\mu_0 = \frac{e \lambda^{7/2} \hbar^{5/2} (k_B T)^{1/4}}{2^{5/4} \pi^2 N_D m^{*7/4} V_0^2} \exp \left(\frac{\hbar^2 \lambda^2}{16 m^* k_B T} \right) W_{\frac{1}{4}, \frac{7}{4}} \left(\frac{\hbar^2 \lambda^2}{8 m^* k_B T} \right). \quad (14)$$

Используя при не очень высоких концентрациях носителей асимптотику функции Уиттекера $W_{\frac{1}{4}, \frac{7}{4}}(z)$, приходим к выражению для подвижности, полученному в [2]:

$$\mu_0 = \frac{15 \pi^{1/2} \varepsilon^{3/2} a^2 n^{1/2} k_B T}{2^{3/2} e^2 m^{*1/2} f^2 N_D}. \quad (15)$$

Зависимость подвижности μ от температуры и концентрации дислокаций (в пренебрежении медленно меняющейся функцией $G(x_0)^{1/2}$ в (13) существенно отличается от температурной и концентрационной зависимостей μ в (15), а именно: $\mu \sim T^{1/2}$ вместо $\mu \sim T$ и $\mu \sim N_D^{-1/2}$ вместо $\mu \sim N_D$.

Для сравнения с экспериментальными данными [1, 2] мы подставили в (13) значения параметров для *n-Ge*, приведенные в [1], и учли подвижность, обусловленную рассеянием на акустических фононах. Несовпадение теоретической кривой, вычисленной на основе формулы (13), с экспериментом не превышает нескольких процентов (например, при 100 К теоретическое значение равно $6,82 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, а экспериментальное — $6,79 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$). Таким образом, самосогласованный учет квазичастичных эффектов значительно улучшает согласие теории с экспериментом.

Ереванский государственный
университет

Поступила 16. V. 1981

ЛИТЕРАТУРА

1. К. Зеегер. Физика полупроводников, Изд. Мир, М., 1977.
2. B. Pöddor. Acta Physica Acad. Sci. Hung., 23, 393 (1967).
3. S. Fujita, Ch. C. Chen. Int. J. Theor. Phys., 2, 59 (1969).
4. S. Fujita, C. L. Ko, I. Y. Chl. J. Phys. Chem. Sol., 37, 227 (1976).
5. B. Fell et al. J. Phys. Chem. Sol., 39, 221 (1978).
6. В. А. Бонч-Бруевич, В. Б. Гласко. ФТТ, 3, 36 (1961).
7. Справочник по специальным функциям. Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган, Изд. Наука, М., 1979.
8. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, М., 1963.

ԼԻՅՑԻԱԿԻՆԵՐԻ ՇԱՐԺՈՒՆԱԿՈՒԹՅՈՒՆԸ ԴԻՍԼՈԿԱՑԻԱՆԵՐ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ՇԱՏ ՄԱՔՈՒՐ ԿԻՍԼՆԱԳՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ

Կ. Հ. ՔԵՉԵՉԻԱՆ, Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍԻԱՆ

Քվադրիմասնիկային էֆեկտները հաշվի առնող մեթոդով, որը զարգացվել է հաղորդականության հաշվարկման համար Ֆուչիտայի և Շեն Շենի կողմից, արտածված է շարժունակության համար արտահայտություն դիսլոկացիաներ պարունակող շատ մաքուր կիսահաղորդիչում: Ստացված է լավ համաձայնություն բերված փորձնական տվյալների հետ:

MOBILITY OF CHARGE CARRIERS IN VERY PURE SEMICONDUCTORS CONTAINING DISLOCATIONS

K. O. KECHECHIAN, A. A. KIRAKOSIAN

An expression for the mobility of charge carriers in very pure semiconductor, containing dislocations was derived using the theory developed by Fujita and Chen for the calculations of conductivity. A dependence of μ on the temperature and the concentration of dislocations different from the one based on the method of Boltzman kinetic equation was obtained. The comparison of calculated values of μ with experimental data taken by Pöddor group shows good agreement with experiment.