

ПОДВИЖНОСТЬ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ОЧЕНЬ ЧИСТЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ВИНТОВЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ

К. О. КЕЧЕЧЯН

1. Введение

Экспериментальные исследования времени релаксации, обусловленной рассеянием на дислокациях в полупроводниках, выгодно проводить в образцах с малой концентрацией примесей ($n_i \lesssim 10^{13} \text{ см}^{-3}$) и большой концентрацией дислокаций, что облегчает разделение дислокационного и примесного механизмов рассеяния. Однако в таких чистых полупроводниках длина экранирования дислокационного потенциала велика, и носители заряда движутся в усредненном дальнедействующем поле многих дислокаций. В этих условиях необходимо учитывать конечность времени жизни носителя в данном квантовом состоянии, что противоречит критерию применимости кинетического уравнения Больцмана. Теория, последовательно учитывающая квазичастичные эффекты при вычислении кинетических коэффициентов, развита Фудзитой с соавторами [1—3] на основе разложения по связным диаграммам формулы Кубо для проводимости. В работе [4] в рамках вышеуказанного формализма вычислена подвижность носителей в очень чистых полупроводниках с краевыми дислокациями. Цель настоящей работы — аналогичное вычисление для полупроводников с параллельными прямолинейными винтовыми дислокациями. Как будет показано ниже, область применимости метода кинетического уравнения Больцмана ограничивается достаточно большими концентрациями носителей и малыми концентрациями дислокаций.

2. Экранированный потенциал винтовой дислокации

В работе [5] предложен потенциал деформации для винтовой дислокации следующего вида:

$$v_0(\rho) = \frac{\alpha}{\rho}, \quad (1)$$

где ρ — расстояние от оси дислокации, α — феноменологическая константа связи. Экранированный потенциал в дебаевском приближении находим из следующего уравнения [6]:

$$\Delta v - \lambda^2 v = \Delta v_0, \quad (2)$$

где $\lambda = (4\pi e^2 / \epsilon k_B T)^{1/2}$ — параметр экранирования Дебая, $n = n_i$ — концентрация носителей заряда (все примеси считаются ионизированными).

Решим уравнение (2) методом преобразования Фурье. Принимая во внимание, что

$$v_0(q) = (2\pi)^{-2} \int d^2 p e^{-iqp} v_0(p) = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{1}{q}, \quad (3)$$

для фурье-образа искомого потенциала из (2) получим

$$v(q) = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{q}{q^2 + \lambda^2}. \quad (4)$$

Обратным преобразованием Фурье выражения (4) приходим к следующему решению уравнения (2):

$$v(\rho) = \frac{\alpha}{\rho} - \alpha\lambda \frac{\pi}{2} [I_0(\lambda\rho) - L_0(\lambda\rho)], \quad (5)$$

где I_0 и L_0 — соответственно модифицированные функции нулевого порядка Бесселя и Струве [7]. Решение (5) удовлетворяет естественным требованиям, налагаемым на поведение экранированного потенциала при больших и малых ρ , а именно: $v \rightarrow 0$ при $\rho \rightarrow \infty$ и $v \approx v_0$ при значениях ρ много меньше радиуса экранирования $r_D = \lambda^{-1}$. График функции $v(\rho)$ приведен на рис. 1. Как видно из рисунка, экранирование потенциала (1) имеет интересную особенность. При значении $\lambda\rho \approx 2,2$ меняется характер взаимодействия: притяжение сменяется отталкиванием или наоборот (в зависимости от знака α).

Потенциал (1) получен в рамках линейной теории упругости, т. е. в предположении малости тензора деформации. Вдали от ядра дислокации это условие выполняется вполне удовлетворительно. В области же ядра, т. е. на расстояниях от оси дислокации порядка межатомных, деформации слишком велики и, следовательно, формула (1) неприменима. Это дает нам основание произвольным образом выбирать вид функции $v_0(\rho)$ в области ядра. Из соображений упрощения последующих вычислений затронутого потенциала выберем в виде

$$v_0^c(\rho) = \frac{\alpha}{\rho} (1 - e^{-x\rho}), \quad (6)$$

где $x^{-1} = r_0$ — длина порядка постоянной решетки. Выражение (6) представляет собой двумерный кулоновский потенциал (1) с плавно обрезанной сингулярностью в области ядра дислокации. Как показывают вычисления, результат очень слабо зависит от r_0 , что оправдывает наш расчет. Подставляя (6) в уравнение (2) и решая его, получаем

$$v^c(q) = \frac{\alpha}{2\pi} \left[\frac{q}{q^2 + \lambda^2} - \frac{q^2}{(q^2 + \lambda^2)(q^2 + x^2)^{1/2}} \right], \quad (7)$$

$$v^c(\rho) = \frac{\alpha}{\rho} (1 - e^{-x\rho}) - \alpha\lambda \frac{\pi}{2} [I_0(\lambda\rho) - L_0(\lambda\rho)] + \quad (8)$$

$$+ \alpha\lambda^2 \left[K_0(\lambda\rho) \int_0^\rho e^{-x\rho'} I_0(\lambda\rho') d\rho' + I_0(\lambda\rho) \int_\rho^\infty e^{-x\rho'} K_0(\lambda\rho') d\rho' \right],$$

где K_0 — модифицированная функция Бесселя второго рода нулевого порядка. Как нетрудно убедиться, два последних члена в (8) малы по срав-

нению с остальными, и основное отличие (8) от (5) заключается в замене первого члена v_0 в (5) на v_0^c . Таким образом, вышеуказанная особенность в экранировании двумерного кулоновского потенциала не связана с сингулярностью последнего в начале координат.

3. Подвижность

Исходным в нашем расчете является полученное Фудзитой и Чэном следующее уравнение для перенормированной частоты столкновений [1]:

$$\tau^{-1} = \Gamma(p) = 2(2\pi)^2 N_D \hbar^{-1} \int d^2 q (v^c(q))^2 D(q, p) [1 - \cos \chi], \quad (9)$$

где

$$D(q, p) = \frac{\hbar \Gamma}{(\varepsilon_p + \hbar q - \varepsilon_p)^2 + \hbar^2 \Gamma^2} = \frac{1}{\hbar \Gamma} \Delta(\cos \varphi, Q) = \frac{1}{\hbar \Gamma} [(C_0 Q \cos \varphi + C_1 Q^2)^2 + 1]^{-1}, \quad (10)$$

$$v^c(q) = \frac{\sigma}{2\pi\lambda} \Phi(Q) = \frac{\alpha}{2\pi\lambda} \frac{Q}{Q^2 + 1} \left[1 - \frac{Q}{(Q^2 + v^2)^{1/2}} \right], \quad (11)$$

$$Q = q/\lambda, \quad v = v/\lambda, \quad C_0 = \lambda p/m^* \Gamma, \quad C_1 = \hbar^2/2 m^* \Gamma, \quad (12)$$

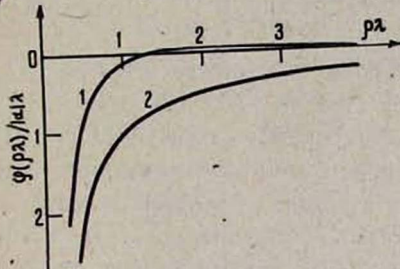


Рис. 1.

Рис. 1. 1 — экранированный двумерный кулоновский потенциал $\varphi(p)$; 2 — двумерный кулоновский потенциал α/p ($\alpha < 0$).

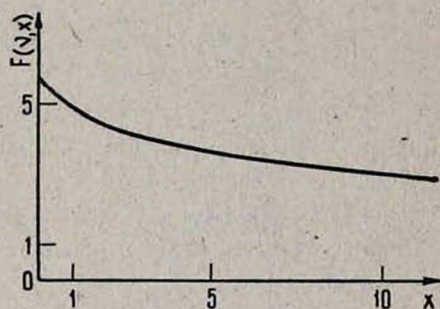


Рис. 2.

Рис. 2. График функции $F(\nu, x)$, $\nu = 552$.

N_D — концентрация дислокаций, $\varepsilon_p = p^2/2m^*$ — кинетическая энергия носителя, χ — угол между p и $p + \hbar q$, φ — угол между p и $\hbar q$. В пределе $\Gamma \rightarrow 0$ (9) переходит в обычное больцмановское выражение

$$\Gamma(p) = (2\pi)^2 N_D \hbar^{-1} \int d^2 q (v^c(q))^2 \delta(\varepsilon_p + \hbar q - \varepsilon_p) [1 - \cos \chi]. \quad (13)$$

С целью упрощения расчета сделаем предположение, подтверждающееся результатом, а именно, заменим в (9) $D(q, p)$ на $D(0, p) = 1/\hbar \Gamma$. Тогда вместо (9) получим

$$[\Gamma(p)]^2 = 2(2\pi)^2 N_D \hbar^{-2} \int d^2 q (v^c(q))^2 [1 - \cos \chi]. \quad (14)$$

После приближенного вычисления интеграла в (14) приходим к следующему выражению для Γ :

$$\Gamma = 2\pi^{1/2} a \hbar^{-1} N_D [F(v, x)]^{1/2}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} F(v, x) &= R_0(v, x) + R_1(x) \ln \left(1 + \frac{v}{x} \right) + R_2(x) \ln (1 + v^2) + \\ &\quad + R_3(x) \operatorname{arctg} v, \\ R_0 &= \frac{2(1+x^4) xv^2 + (1+x^2)v + (2x^4 - x^2 + 1)x}{2(1+v^2)(1+x^2)(x+v)} - \\ &\quad - \frac{2x^4 - x^2 + 1}{2(1+x^2)^2}, \quad R_1 = \frac{x^6 + 5x^4}{(1+x^2)^3}, \\ R_2 &= \frac{1+3x^2-2x^4}{2(1+x^2)^3}, \quad R_3 = -\frac{x+5x^3}{(1+x^2)^3}, \quad x = p/\hbar\lambda. \end{aligned} \quad (16)$$

При $v \gg 1$, что обычно имеет место в полупроводниках, $F(v, x)$ есть медленно убывающая функция x . На рис. 2 приведен ее график при $v = 552$, что соответствует следующим значениям параметров: $n = 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $T = 1 \text{ К}$, $m^* = 0,1 m_0$, $\epsilon = 16$, $\kappa = 0,2 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$.

Вычисление по формуле (13) дает больцмановское выражение

$$\Gamma^0(p) = \frac{2\pi^2 x^2 m^* N_D}{\hbar p^2} \left[1 - \frac{1+6x^2}{(1+4x^2)^{3/2}} \right]. \quad (17)$$

Определим область применимости каждой из формул (15) и (17). Принимая во внимание быстрое убывание функции $[\Phi(Q)]^2$ при $Q > v$ ($\sim Q^{-6}$), на основе (15), (12) и (10) можно прийти к выводу, что при больших концентрациях дислокаций и малых концентрациях носителей величины C_0 и C_1 малы и, следовательно, в области, дающей основной вклад в интеграл в (9), $\Delta(\cos \varphi, Q)$ мало отличается от единицы. Таким образом, в этих условиях замена Δ на 1 является оправданной и формула (15) верна. В обратном случае больших концентраций носителей и малых концентраций дислокаций из (17), (12) и (10) следует, что $\Delta(\cos \varphi, Q)$ имеет резкий пик в точке $Q = 0$ и быстро стремится к нулю при удалении от нее. Следовательно, в (9) правомерна замена $D(q, p)$ на $\pi \delta(\epsilon_p + \hbar q - \epsilon_p)$ под интегралом, т. е. формула (17) верна. В промежуточной области концентраций носителей и дислокаций требуется более точный численный расчет.

Подвижность μ вычислим из известного выражения для проводимости по формуле

$$\mu = \frac{\sigma}{en} = - \frac{e}{n(2\pi\hbar)^2 m^{*2}} \int d^2p p_x^2 [\Gamma(p)]^{-1} \frac{\partial f}{\partial \epsilon_p}. \quad (18)$$

В рассматриваемом нами случае невырожденного полупроводника f есть функция распределения Больцмана:

$$f = n(2\pi\hbar)^2 (2\pi m^* k_B T)^{-1} e^{-\epsilon_p / k_B T}.$$

Подставив Γ из (15) в (18), после простых преобразований получим

$$\mu = \frac{e\hbar}{2\pi^{1/2} m^* N_D^{1/2} a (k_B T)^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon e^{-\varepsilon/k_B T}}{[F(\nu, x)]^{1/2}} d\varepsilon. \quad (19)$$

Числитель подынтегрального выражения имеет максимум при $\varepsilon = k_B T$. Для приведенных выше типичных значений параметров $x_0 = x|_{\varepsilon=k_B T} = 4.6$. Как видно из рис. 2, функция $[F(\nu, x)]^{1/2}$ медленно меняется в окрестности x_0 и ее можно вынести за знак интеграла. В результате для μ получаем следующее окончательное выражение:

$$\mu = \frac{e\hbar}{2\pi^{1/2} m^* N_D^{1/2} a [F(\nu, x_0)]^{1/2}}. \quad (20)$$

Расчет по формуле (18) с использованием (17) для Γ^0 приводит к больцмановскому выражению для подвижности:

$$\mu^0 = \frac{2e\hbar k_B T}{\pi^2 m^* N_D a^2} \left[1 + \frac{\hbar^2 k^2}{4m^* k_B T} + \frac{\hbar^4 k^4}{48m^{*2} (k_B T)^2} \right]. \quad (21)$$

Второй и третий члены в (21) характеризуют поправку к подвижности, обусловленную экранированием дислокационного потенциала. Сравнение (20) и (21) показывает, что зависимость подвижности μ от температуры и концентрации дислокаций существенно отличается от температурной и концентрационной зависимости μ^0 . В частности, μ не зависит от температуры (в пренебрежении медленно меняющимся фактором $[F(\nu, x_0)]^{-1/2}$).

В заключение в связи со сказанным выше заметим, что μ очень слабо зависит от параметра теории κ и некоторый произвол в выборе его величины практически не влияет на конечный результат.

Автор глубоко благодарен А. А. Киракосяну за постоянное внимание к работе и обсуждение результатов.

Ереванский государственный
университет

Поступила 15. V. 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. Fujita S., Chen Ch. Int. J. Theor. Phys., 2, 59 (1969).
2. Fujita S., Ko C. L., Chi J. Y. J. Phys. Chem. Sol., 37, 227 (1976).
3. Fell B. et al. J. Phys. Chem. Sol., 39, 221 (1978).
4. Кечечян К. О., Киракосян А. А. Изв. АН АрмССР, Физика, 16, 356 (1981).
5. Бонч-Бруевич В. А. ФТТ, 3, 47 (1961).
6. Корнюшин Ю. В. Явления переноса в реальных кристаллах во внешних полях, Изд. Наукова думка, Киев, 1981.
7. Справочник по специальным функциям. Под. ред. М. Абрамовица и И. Стиган, Изд. Наука, М., 1979.
8. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений М., 1963.

ԼԻՅՔԱԿԻՐՆԵՐԻ ՇԱՐԺՈՒՆԱԿՈՒԹՅՈՒՆԸ ՊՏՈՒՏԱԿԱՅԻՆ
ԴԻՍԼՈԿԱՅԻՆԵՐ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ՇԱՏ ՄԱՔՈՒՐ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ

Կ. Հ. ՔԵՉԵՉՅԱՆ

Քվադրմասնիկային էֆեկտները հաշվի առնող հավասարման հիման վրա հաշվարկված է պոտտակային դիսլոկացիաների վրա ջրումով պայմանավորված լիցքակիրների շարժման-

կութիւնը շատ մաքուր կիրառադորդելներում: Ստացված է նաև սովորական բուցման շրտահայտութիւնը շարժունակութեան համար՝ հաշվի առնելով դիսլոկացիոն պոտենցիալի էկրանավորումը: Քննարկված են նրա կիրառելիութեան պայմանները:

THE MOBILITY OF CHARGE CARRIERS IN VERY PURE SEMICONDUCTORS WITH SCREW DISLOCATIONS

K. O. KECHECHYAN

The mobility of charge carriers due to the scattering on screw dislocations in very pure semiconductors is calculated based on the equation allowing for the quasiparticle effects. The expressions for mobility in the case of large concentration of carriers and small concentration of dislocations were obtained by means of kinetic equation method. The conditions for the applicability of both the expressions are discussed.

Изв. АН Армянской ССР, Физика, 17, 260—265 (1982)

ПОЛЯ НАПРЯЖЕНИЙ ДИСЛОКАЦИОННЫХ КОНФИГУРАЦИЙ В ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ПЛАСТИНЕ

А. А. ХЗАРДЖЯН, С. М. ХЗАРДЖЯН, А. А. ПРЕДВОДИТЕЛЕВ

В работах [1, 2] был предложен метод, позволяющий определять поля напряжений различных дислокационных образований с произвольными векторами Бюргерса, лежащих в любой плоскости, параллельной поверхности изотропной пластины. В настоящей работе дано развитие этого метода для случая анизотропной пластины с гексагональной симметрией.

Пусть дана пластина, вырезанная по базисной плоскости гексагонального кристалла и занимающая область $\{-\infty < x_1, x_2 < +\infty, -h_2 \leq x_3 \leq +h_1\}$. Внутри пластины в плоскости $x_3 = 0$, параллельной поверхности пластины, лежит дислокационная петля; боковые границы пластины свободны. Необходимо найти напряженно-деформированное состояние пластины.

Для решения задачи удобно построить, как и в [1, 2], три вспомогательные краевые задачи, причем первые две краевые задачи соответствуют случаю плоской деформации, а третья — антиплоской.

1. Пусть $U_2 = 0, \partial/\partial x_2 = 0$,

$$\begin{aligned} \sigma_{13}(x_1, +0) &= \sigma_{13}(x_1, -0), \quad \sigma_{33}(x_1, +0) = \sigma_{33}(x_1, -0), \\ \sigma_{13}(x_1, x_3) &= \sigma_{33}(x_1, x_3) = 0 \quad \text{при} \quad x_3 = -h_2; +h_1, \\ U_7(x_1, +0) &= t \cos mx_1, \quad U_7(x_1, -0) = (t-1) \cos mx_1, \\ U_\lambda(x_1, +0) &= U_\lambda(x_1, -0), \end{aligned} \quad (1)$$

причем для первой вспомогательной краевой задачи $\gamma = 3, \lambda = 1$, а для второй $\gamma = 1, \lambda = 3$.