

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Заряженные дислокации в полупроводниковых кристаллах

В.Б.Шикин, Ю.В.Шикина

Обсуждается состояние проблемы заряженных дислокаций в полупроводниковых кристаллах германия и кремния. Для описания равновесных свойств пластически деформированных германия и кремния использована феноменологическая модель электронного спектра на заряженных дислокациях в этих кристаллах, развивающая представления Шонли–Рида. Модель содержит два акцепторных уровня E_1 и E_2 , а также один донорный ϵ_1 . Кроме того, оказывается необходимым введение конечной емкости C_1 для акцепторного уровня E_1 . В рамках принятой модели удастся самосогласованно описать основные электрические свойства пластически деформированных германия и кремния. Речь идет о проводимости этих кристаллов в n и p состояниях, деталях инверсии типа проводимости дислокационного происхождения, особенностях ВАХ для кристаллов с ориентированным набором дислокаций, простейших релаксационных явлениях и т.д. При этом для германия уровень E_1 оказывается расположенным в окрестности $E_1 \simeq 0,1$ эВ над потолком валентной зоны, а емкость $C_1 \lesssim 0,1$. В случае кремния $E_1 \simeq 0,4$ эВ, $C_1 \lesssim 0,1$. Обращает на себя внимание малость емкости C_1 , что оправдывает введение этих дополнительных параметров в характеристики электронного спектра на дислокациях.

PACS numbers: 61.72.Bb, 61.72.Lk, 61.72.Nh, 72.20.–i

Содержание

1. Введение (887).
 2. Равновесные свойства заряженной дислокации в полупроводниках n -типа (890).
 - 2.1. Длина экранировки. 2.2. О спектре электронов на заряженной дислокации. 2.3. Определение коэффициента заполнения
 3. Заряженные дислокации в полупроводниках p -типа (897).
 - 3.1. Нейтральная модель акцепторно-донорного действия дислокаций. 3.2. Кулоновская коррекция модели. 3.3. Происхождение акцепторно-донорного уровня. 3.4. Инверсия типа проводимости в пластически деформированных полупроводниках p -типа.
 4. Вольт-амперная характеристика образца с заряженными дислокациями (906).
 - 4.1. ВАХ для барьера с седловыми точками. 4.2. Параметры седловых точек. 4.3. Влияние случайных флуктуаций формы барьера. 4.4. Эксперименты с дислокационными барьерами. 4.5. ВАХ отдельной заряженной дислокации в полупроводниках.
 5. Релаксационные явления (913).
 - 5.1. Экспоненциальный режим. 5.2. Логарифмический режим.
- Заклочение (916).
Список литературы (916).

В.Б.Шикин. Институт физики твердого тела РАН,
142432 Черноголовка, Московской обл., Россия
Факс (096) 517-19-49
E-mail: shikin@issp.sherna.msk.su

Ю.В.Шикина. Институт проблем технологии микроэлектроники и
особочистых материалов РАН,
142432 Черноголовка, Московской обл., Россия

Статья поступила 16 ноября 1994 г.,
после доработки 27 февраля 1995 г.

1. Введение

Основные идеи, определяющие возможную роль дислокаций в формировании электрических свойств полупроводниковых кристаллов, возникли в начале 50-х годов — в период замечательного прогресса в физике полупроводников. Первые экспериментальные результаты, явно свидетельствующие о наличии существенного влияния дислокаций на электрические свойства полупроводников, были получены Галлахером [1], который показал, что пластическая деформация германия и кремния увеличивает их сопротивление и уменьшает время жизни неосновных носителей заряда.

На базе экспериментальных данных [1] и на основе простой атомной модели дислокационного ядра в ковалентных кристаллах Шокли [2] высказал плодотворную идею о существовании вдоль дислокации так называемых оборванных связей, которые могут проявлять акцепторные либо донорные свойства. Количественная разработка этих идей была осуществлена Ридом [3, 4]. В его работах были сформулированы основные положения феноменологической теории заряженных дислокаций: введены понятия дислокационных электронных уровней E_i , дислокационного коэффициента заполнения f , ридовского цилиндра R , окружающего каждую заряженную дислокацию и экранирующего линейный заряд, локализованный на дислокации, и т.д. В работах Рида ясно проявилась основная специфика задачи о заполнении электронных дислокационных уровней свободными электронами. Эта задача, в отличие от проблемы заполнения точечных центров, должна решаться с учетом кулоновского взаимодействия электронов, оседающих на дислокацию, и самосогласованного влияния этого взаимодействия на величину f .

Работы [2–4], а также последовавшие затем эксперименты [5, 6], содержавшие, в частности, утверждение об анизотропии образцов с набором ориентированных дислокаций, определили "язык" и основные физические параметры данной проблемы. И хотя к настоящему времени общая картина явления значительно усложнена по сравнению с первоначальным вариантом задачи, обсуждавшимся в работах Рида [3, 4], тем не менее актуальность этих работ продолжает сохраняться.

Обширная деятельность, экспериментальная и теоретическая, по изучению различных деталей поведения заряженных дислокаций в полупроводниках, возникшая в развитие работ [1–4], неоднократно систематизировалась в ряде интересных обзоров. Среди последних из них имеет смысл отметить обзор Лабуша и Шретера [7] в книге "Дислокации в твердых телах", изданной в 1980 г. под редакцией Набарро, обзор Осипьяна [8], опубликованный несколько позднее, в 1982 г., а также обзор Матаре [9]. Цель настоящего обзора — обсуждение состояния проблемы заряженных дислокаций на феноменологическом уровне к концу 80-х годов. Учитывая быстро возрастающий объем информации, в обзоре практически не будут обсуждаться свойства заряженных дислокаций в полупроводниках типа $A^{IV}B^{VI}$ (что прекрасно сделано в [10]), а также спин-зависящие эффекты, достаточно полно представленные в [8].

При построении феноменологической картины свойств заряженных дислокаций в полупроводниках ковалентного типа, сложившейся к настоящему времени, необходимо иметь в виду следующие многократно проверенные факты.

1. Введение дислокаций в полупроводники n -типа приводит к снижению средней плотности свободных носителей, причем уменьшение растет с понижением температуры. Другими словами, **дислокации в полупроводниках n -типа играют роль акцепторов**. Типичный пример подобного воздействия дислокаций на полупроводник n -типа приведен на рис. 1.

2. Проводимость образцов с ориентированным набором дислокаций анизотропна (рис. 2) — факт, свидетельствующий о линейности дефектов.

3. **Увеличение плотности дислокаций в области, выше некой критической, приводит к инверсии типа проводимости образца**. Характерно при этом, что инверсия имеет вид достаточно резкого перехода, хорошо видного на рис. 3, иллюстрирующем поведение уровня Ферми в функции от относительной пластической деформации образца, т.е. от плотности дислокаций. Наличие скачка означает, что дислокация имеет, по крайней мере, два акцепторных уровня, нижний из которых расположен вблизи потолка валентной зоны. Существенно далее, что инверсия возникает не в условиях $n_d \cong n_D$, где n_d , n_D — эффективные объемные плотности доноров и дислокационных акцепторных центров ($n_D = N_D a^{-1}$; N_D — двумерная плотность дислокаций; a — межатомное расстояние), а в условиях $n_d \cong 10^{-2} n_D$. Это обстоятельство должно быть учтено при выборе модели нижнего акцепторного уровня в спектре электронов на дислокации.

4. В полупроводниках p -типа дислокации демонстрируют **акцепторно-донорное действие**. После введения дислокаций холловская плотность дырок может быть как ниже, так и выше плотности свободных носителей в свободном образце, что и свидетельствует об акцеп-

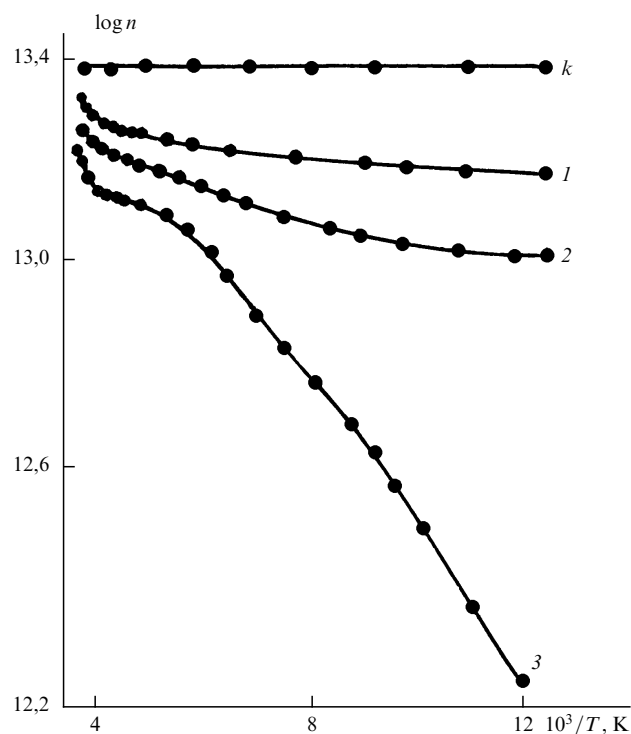


Рис. 1. Зависимость плотности электронов от температуры в пластически деформированном германии [8]. k — контрольный образец с плотностью доноров $n_d = 2,9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$; 1, 2, 3 — разные степени деформации образца с плотностью дислокаций, соответственно $(2, 8; 4, 4; 6) \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$

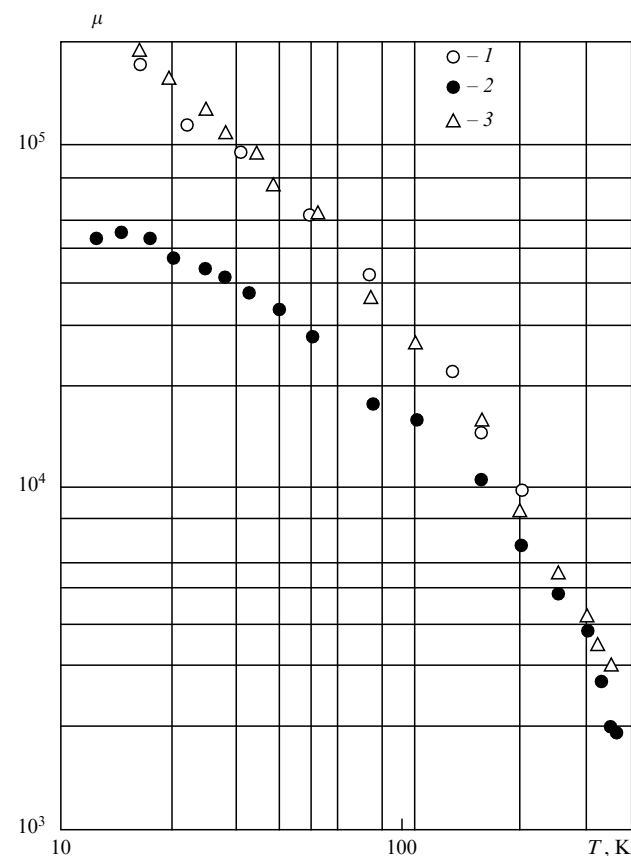


Рис. 2. Зависимость подвижности от температуры T [5]: 1 — $I \parallel D$, 2 — $I \perp D$, 3 — контрольные измерения

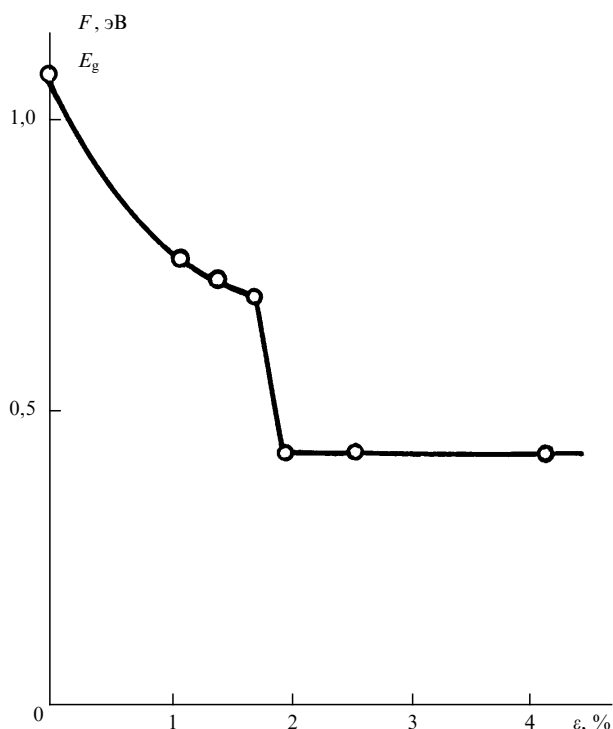


Рис. 3. Поведение уровня Ферми F в функции от относительной пластической деформации для кристаллов кремния [8, 28]

торно-донорном действии дислокационных состояний в р-полупроводнике. Типичный пример подобного поведения свободных дырок в деформированном образце приведен на рис. 4.

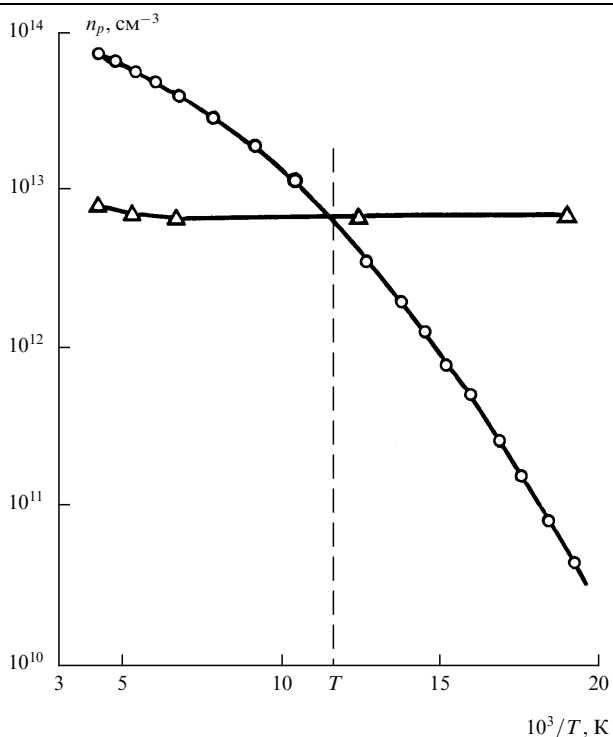


Рис. 4. Плотность дырок n_p в контрольном (Δ) и пластически деформированном (○) р-германии [7, 25] в функции от T^{-1} , плотность акцепторов $n_a = 7,3 \cdot 10^{12}$ см⁻³ и плотность дислокаций $n_d = 4,6 \cdot 10^7$ см⁻²

5. Существует качественная аналогия между поведением заряженных дислокаций в германии и кремнии. Эта аналогия не абсолютна, если, например, иметь в виду спин-зависящие свойства (в кремнии наблюдается сигнал ЭПР дислокационного происхождения, а в германии его нет). Но с точки зрения электрических свойств аналогия между германием и кремнием достаточно глубока.

Перечисленные факты определяют степень сложности феноменологической модели заряженной дислокации, претендующей на самосогласованное описание основных наблюдаемых эффектов с участием заряженных дислокаций. Речь идет о линейных дефектах, имеющих глубокие дискретные акцепторные уровни E_i и донорные уровни ε_i в запрещенной зоне полупроводника. Схема расположения этих уровней представлена на рис. 5. Отсчет всех энергий ведется от потолка валентной зоны. Положения основного акцепторного E_1 и донорного ε_1 уровней практически совпадают между собой. Это утверждение следует из рис. 4, где видно, что наклон температурной зависимости числа дырок в деформированном образце практически не меняется при переходе от донорного действия дислокаций к акцепторному, т.е. при переходе через точку $T = T^*$.

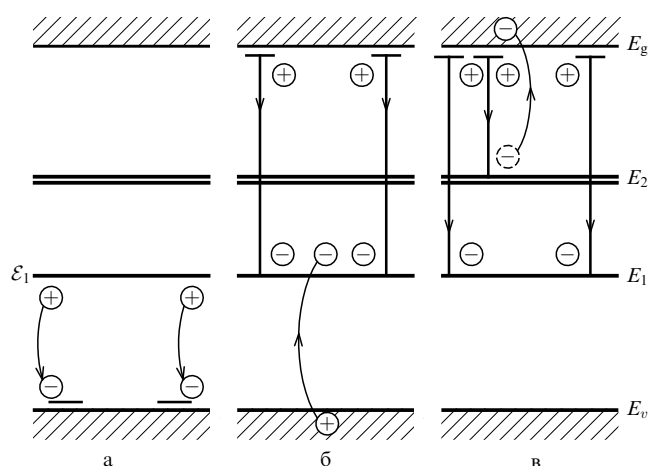


Рис. 5. Схема энергетических уровней для электронов, локализованных на 60-градусной дислокации в германии и кремнии (а, б, в — варианты электронных переходов)

Специфический характер инверсии проводимости деформированного образца с ростом плотности дислокаций N_D (см. рис. 3) заставляет предположить, что основной акцепторный уровень E_1 имеет ограниченную емкость $C_1 < 0,1$. Для единообразия полагаем, что и все остальные дислокационные уровни имеют определенные емкости C_i . Как будет видно ниже, наличие конечных емкостей C_i достаточно также для наблюдения в спектре DLTS¹ различных дислокационных уровней. Естественно, введение конечных емкостей C_i — не единственный способ возможного заполнения электронами вышележащих дислокационных уровней. Такими же свойствами, в принципе, будет обладать модель, учитывающая свободное движение электронов вдоль оси дислокации, и как следствие, конечную энергию нулевых колебаний вдоль дислокации. Однако этот вариант теории не может объяснить резкость перехода на рис. 3.

¹ Deep Level Temper Spectroscopy.

Одна из задач обзора заключается в демонстрации непротиворечивости предложенной модели разнообразным экспериментам в образцах n- и p-типа. При этом полагается, что константы \mathcal{E}_i , E_i , C_i , а при необходимости и S_i (S_i — емкости донорных уровней) определяются экспериментально и должны разумно воспроизводиться при переходе от одной разновидности экспериментов к другой.

2. Равновесные свойства заряженной дислокации в полупроводниках n-типа

Как отмечалось выше, специфическая особенность задачи о заполнении электронами дислокационных уровней — необходимость учета кулоновского взаимодействия между электронами, "осевшими" на дислокации. Правильный учет этого взаимодействия и его влияния на процесс локализации электронов, является, по существу, основой теории Рида [3, 4] и всех последующих ее модификаций. Для систематического изложения этой теории необходимо ввести ряд конкретных определений, используемых при описании равновесных и простейших кинетических свойств заряженных дислокаций.

2.1. Длина экранировки

2.1.1. Предположим, что в полупроводнике n-типа с плотностью доноров n_d в области температур, отвечающей полной ионизации доноров, расположена заряженная нить с коэффициентом заполнения f :

$$f = \frac{a}{c}. \quad (1)$$

Здесь a — период решетки вдоль оси дислокации, c — среднее расстояние между электронами на дислокации. Естественно, что потенциал φ заряженной дислокации в результате экранировки ионизированными донорами спадает при удалении от оси. Если при этом во всей области определения $\varphi(r)$ выполняется требование

$$\frac{e\varphi}{T} \ll 1, \quad 0 \leq r < \infty, \quad (2)$$

где T — температура, r — расстояние от оси дислокации, то общее уравнение Пуассона

$$\Delta\varphi = \frac{4\pi e}{\varepsilon}(n_d - n_e), \quad (3)$$

$$n_e(r) = n_d \exp\left(-\frac{e\varphi}{T}\right) \quad (3a)$$

может быть линеаризовано:

$$\Delta\varphi = \frac{4\pi en_d}{\varepsilon T} \varphi.$$

Здесь ε — диэлектрическая постоянная полупроводника. Это уравнение становится безразмерным с помощью подстановки

$$x = \frac{r}{r_D}, \quad r_D^2 = \frac{\varepsilon T}{4\pi e^2 n_d}, \quad (4)$$

где r_D — известная длина экранирования слабых электростатических полей, получившая название "дебаевской длины".

2.1.2. В ходе решения задачи экранирования для заряженной дислокации приходится, однако, сталкиваться с обратной ситуацией, когда в широком диапазоне рас-

стояний $0 < r \leq R$ от оси дислокации имеет место неравенство:

$$\frac{e\varphi}{T} \gg 1, \quad (5)$$

противоположное (2). Если указанная область $r \leq R$ удовлетворяет требованию

$$R \gg r_D, \quad (6)$$

то в пределах этой области можно использовать новое упрощение, считая, что $n_e \ll n_d$. Тогда уравнение Пуассона сводится к виду:

$$\Delta\varphi \approx \frac{4\pi en_d}{\varepsilon}. \quad (7)$$

Решение (7) с "геометрическим" граничным условием

$$\left. \frac{\partial\varphi}{\partial r} \right|_{r=R} \approx 0 \quad (7a)$$

и упрощающим предположением $\varphi|_{r=R} \approx 0$ выглядит так:

$$\varphi(r) = \frac{ef}{\varepsilon a} \left[2 \ln \frac{R}{r} - \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \right], \quad (8)$$

$$\pi R^2 n_d = \frac{f}{a}.$$

Величина R , определенная в (8), возникла впервые в работах Рида [3, 4] и в дальнейшем будет называться радиусом Рида. Физический смысл этой величины достаточно прост. В геометрическом приближении, т.е. в условиях $R \gg r_D$, величина R определяет расстояние, на котором поле заряженной дислокации компенсируется полем ионизированных доноров. Естественно, что полная картина экранировки выглядит сложнее. Однако в условиях $R \gg r_D$ можно, как правило, пренебрегать экранировкой Дебая, ограничиваясь учетом экранирования по Риду.

Отношение ридовской длины к дебаевской согласно (4) и (8) есть

$$\frac{R^2}{r_D^2} = \frac{4e^2 f}{\varepsilon a T}. \quad (9)$$

Это отношение велико, если

$$\Gamma = \frac{e^2 f}{\varepsilon a T} \gg 1. \quad (10)$$

В реальных случаях германия и кремния, когда $f \leq 0,1$, отношение (10) может достигать значения $\Gamma \geq 10$. В этих условиях ридовское экранирование является определяющим.

Имеет смысл отметить, что кроме электростатических сил между дислокацией и свободными электронами имеется деформационное взаимодействие $V_\xi(r, \theta)$, детально обсуждаемое ниже. Это взаимодействие не является цилиндрически симметричным:

$$V_\xi(r, \theta) = \frac{\text{const}}{r} \sin(\theta),$$

где θ — угол, отсчитываемый от плоскости скольжения краевой дислокации, и поэтому общее распределение электронов вокруг заряженной дислокации, в принципе, зависит от угла θ . Однако деформационный потенциал

уменьшается с расстоянием как $1/r$, в то время как электростатический потенциал $\varphi(r)$ (8) логарифмически зависит от r . По этой причине на расстояниях $r \cong R$, где формируется ридовский цилиндр, влиянием деформационного взаимодействия можно пренебрегать либо учитывать его по теории возмущений.

Еще одно, на первый взгляд, очевидное упрощение, требует специального обсуждения. Речь идет о роли дырок в формировании свойств заряженной дислокации в полупроводниках n -типа. Равновесная плотность дырок вдали от дислокации экспоненциально мала, и ее вкладом в распределение заряда в окрестности заряженной дислокации, казалось бы, можно пренебречь:

$$n_p = n^*(T) \exp\left(-\frac{F}{T}\right) \ll n_d. \quad (11)$$

Здесь $n^*(T)$ — плотность состояний для дырок в валентной зоне, F — уровень Ферми. Однако дырки притягиваются к отрицательно заряженной дислокации, причем довольно нетривиальным образом. В самом деле, рассчитаем полное число дырок, втянутых в ридовский цилиндр:

$$\begin{aligned} N_+ &= 2\pi \int_c^R n_p \exp\left(\frac{e\varphi}{T}\right) r dr = \\ &= 2\pi n_p \int_c^R \left(\frac{R}{r}\right)^{2\Gamma} \exp\left[-\Gamma\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)\right] r dr, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\varphi(r)$ — из (8), Γ — из (10). Величина N_+ скачкообразно зависит от параметра Γ . Если $\Gamma < 1$, интеграл (12) определяется, в основном, расстояниями $r \leq R$:

$$\begin{aligned} N_+ &= \pi R^2 n_p \exp(-\Gamma) \int_0^1 x^{-\Gamma} \exp(\Gamma x) dx = \\ &= \pi R^2 n_p \exp\left[-\Gamma\left(\frac{1}{1-\Gamma} - \Gamma \frac{\Gamma}{2-\Gamma}\right)\right]. \end{aligned} \quad (12a)$$

В этом пределе локализация дырок на заряженной дислокации не существенна.

Если же $\Gamma > 1$, то основная часть интеграла N_+ (12) определяется малыми расстояниями $r \geq c$. В результате выражение (12a) должно "пройти" через особенность $\Gamma = 1$, что отвечает скачкообразному росту N_+ в узком интервале изменения параметра Γ . Наличие этого скачка в функции от T может приводить к наблюдаемым эффектам, обсуждаемым ниже.

2.1.3. Дебаевское и ридовское упрощения уравнения Пуассона для заряженной дислокации в полупроводнике n -типа не исчерпывают всех предельных случаев, имеющих место в экспериментах. Так, специального внимания заслуживает область параметров, когда электроны начинают "оседать" на доноры, и определение $n_e(r)$ (3a) теряет силу. В этом случае структура переходной области, сшивающей область полной ионизации доноров в окрестности дислокации с невозмущенной частью кристалла, заметно отличается от дебаевской, что в целом позволяет говорить о третьем (наряду с дебаевским и ридовским) варианте экранирования поля заряженной дислокации в полупроводнике n -типа.

Для выяснения деталей этого различия необходимо выходить за рамки "геометрического приближения" (7a)

в решении уравнения Пуассона с целью получения информации о реальном поведении потенциала $\varphi(r)$ в переходной области. В случае полной ионизации доноров, т.е. в постановке (3), (3a), интересующее нас решение строится следующим образом.

Прежде всего нетрудно убедиться в том, что общее цилиндрически симметричное решение (8) для $\varphi(r)$ вблизи границы ридовского цилиндра R имеет асимптотику:

$$\varphi(r) = \frac{2\pi en_d x^2}{\varepsilon}, \quad x = R - r, \quad x \ll R. \quad (13)$$

В этом же приближении $x/R \ll 1$ точное уравнение для $\varphi(x)$, следующее из (3), (3a), в переходной области выглядит так:

$$\begin{aligned} \Phi'' &= [1 - \exp(-\Phi)], \quad \Phi' = \frac{d\Phi}{d\bar{x}}, \\ \bar{x} &= \frac{x}{r_D}, \quad \Phi = \frac{e\varphi}{T}, \quad r_D^2 = \frac{\varepsilon T}{4\pi n_d e^2}, \end{aligned} \quad (14)$$

r_D — радиус Дебая для плотности электронов $n = n_d$.

Первый интеграл этого уравнения с константой интегрирования, выбранной так, чтобы обеспечить обращение в нуль функции Φ' при $\Phi \rightarrow 0$, имеет вид

$$\Phi' = \sqrt{2} [\Phi - 1 + \exp(-\Phi)]^{1/2}. \quad (15)$$

Следовательно, зависимость $\Phi(\bar{x})$ определена соотношением

$$\int \frac{d\Phi}{[\Phi - 1 + \exp(-\Phi)]^{1/2}} = \pm \sqrt{2} (\bar{x} + C), \quad (16)$$

где C — произвольная константа.

Потребуем теперь, чтобы при больших x координатная зависимость ϕ , следующая из (16), совпадала с φ из (13). Замечая с этой целью, что в области больших Φ соотношение (16) принимает вид

$$\Phi = 0, 5(\bar{x} + C)^2, \quad (16a)$$

видим, что для совпадения асимптотик $\varphi(x)$ (13) и (16a) необходимо положить $C = 0$. Другими словами, решения для φ (13) и (16) асимптотически сшиваются между собой, если начало отсчета в решении (16) совпадает с геометрической границей ридовского цилиндра $r = R$.

Для практических расчетов удобно в интеграле (16) расставить подходящие пределы:

$$\int_{\Phi_R}^{\Phi} \frac{d\Phi}{[\Phi - 1 + \exp(-\Phi)]^{1/2}} = \pm \sqrt{2} \bar{x}, \quad (17)$$

где константа Φ_R определена условием

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} n(x, \Phi_R) dx &= \int_{-\infty}^0 (1 - n(x, \Phi_R)) dx, \\ n(x, \Phi) &= 1 - \exp(-\Phi). \end{aligned} \quad (17a)$$

Учитывая общие представления о границе ридовского цилиндра, можно при отыскании величины Φ_R и обсуждении других вопросов ориентироваться на вспо-

могательное определение Φ_R^* . Это определение имеет вид $n(\Phi_R^*) = 1/2 (n(\Phi) — \text{плотность заряда (17a)})$. Записанное в явном виде определение Φ_R выглядит так:

$$1 - \exp(-\Phi_R^*) = \frac{1}{2}. \quad (18)$$

Отсюда $\Phi_R^* = 0,693$. Правильное значение Φ_R из (17a), имеющее смысл электропотенциала на поверхности ридовского цилиндра, близко к определению Φ_R^* (18).

Графики зависимостей $\Phi(x)$ и $n(x)$, следующих из определений (17), (17a), (13), приведены на рис. 6. Интересно отметить, что реальная переходная область в случае электронного экранирования размыта не на один, а на 5–6 дебаевских радиусов.

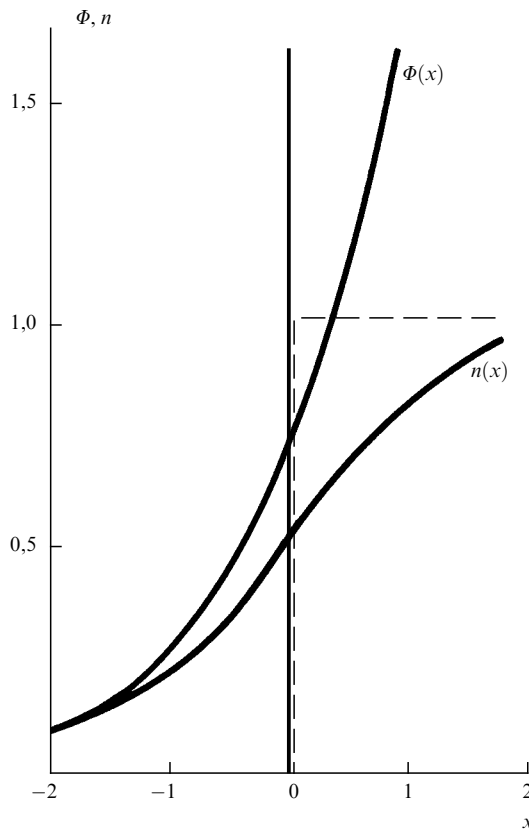


Рис. 6. Поведение плотности ионизированных доноров n и кулоновской энергии свободных электронов Φ в окрестности границы ридовского цилиндра (штриховая линия). Локальная плотность $n(x)$ отнесена к объемной плотности доноров n_d , координата x — в единицах дебаевского радиуса r_D , кулоновская энергия $e\varphi$ отнесена к температуре ($\Phi = e\varphi/T$)

Пусть теперь температура образца близка к температуре вымерзания свободных электронов. В этом пределе уровень Ферми определен выражением [11]:

$$F^0 = -0,5 E_d + 0,5 T \ln \frac{n_d}{N_e}, \quad N_e = \frac{2}{h^3} \left(\frac{m^* T}{2\pi} \right)^{3/2}, \quad (19)$$

где m^* — эффективная масса электрона, E_d — донорный уровень, отсчитанный от дна зоны проводимости. Следовательно, выражение для уровня Ферми во внешнем поле имеет вид

$$F = F^0 - e\varphi. \quad (20)$$

Соответствующее безразмерное уравнение для Φ , заменяющее уравнение (14), выглядит так:

$$\Phi'' = \left[1 - \frac{1}{1 + \alpha \exp \Phi} \right] - \alpha \exp(-\Phi) = n(\Phi), \quad \alpha = \left(\frac{N_e}{n_d} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_d}{2T}\right) \ll 1. \quad (21)$$

Первое слагаемое в правой части этого уравнения отвечает заряду вокруг дислокации, обусловленному ионизацией доноров в поле заряженной нити, второе слагаемое — вклад в объемную плотность заряда за счет свободных электронов. В области $\Phi \rightarrow 0$ правая часть уравнения (21) обращается в нуль.

Первый интеграл уравнения (21) есть

$$\frac{(\Phi')^2}{2} = \ln \frac{1 + \alpha \exp \Phi}{1 + \alpha} + \alpha [\exp(-\Phi) - 1]. \quad (22)$$

Зависимость $\Phi(\bar{x})$ определена соотношением

$$\int_{\Phi_R}^{\Phi} d\Phi \left[\ln \frac{1 + \alpha \exp \Phi}{1 + \alpha} + \alpha (\exp(-\Phi) - 1) \right]^{-1/2} = \pm \sqrt{2} \bar{x}, \quad (23)$$

где, как и выше, константа Φ_R находится из условия

$$\int_0^{\infty} n(\bar{x}, \Phi_R) d\bar{x} = \int_{-\infty}^0 [1 - n(\bar{x}, \Phi_R)] d\bar{x}, \quad (24)$$

а $\Phi(\bar{x})$ — из (23).

Выражение для $\Phi(\bar{x})$ (23) нетрудно исследовать численно так же, как это было сделано выше для случая электронного экранирования (рис. 7). Однако в данном случае полезность одномерного рассмотрения оказывается ограниченной, ибо переходная область сильно

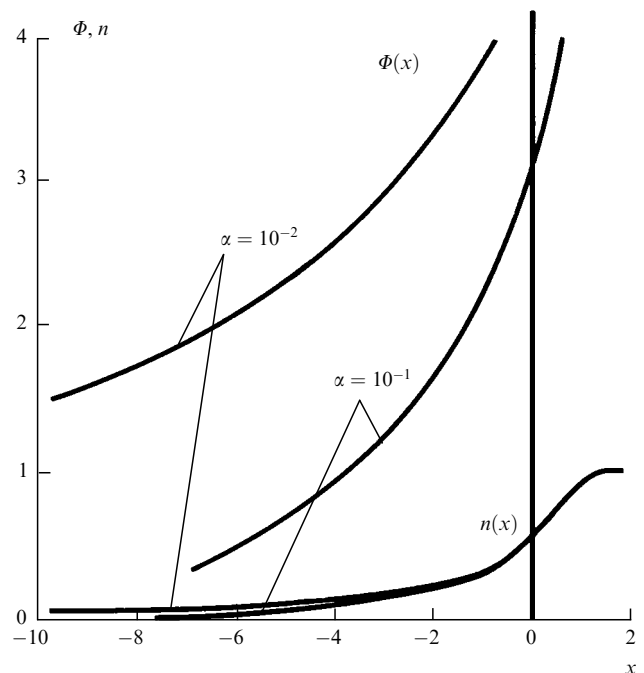


Рис. 7. Зависимости $\Phi(x)$ и $n(x)$ для разных значений α

размывается, и ее одномерное описание перестает быть корректным.

Для анализа возникшей ситуации отметим, что Φ_R , определенное условием $n(\Phi_R) \approx 0,5$, есть величина, гораздо больше единицы:

$$\Phi_R = \ln \frac{2}{\alpha} \gg 1. \quad (25)$$

Это обстоятельство существенно отличает случай экранировки поля заряженной нити локализованными электронами от рассмотренного выше случая экранировки свободными электронами. В самом деле, в данном варианте экранировки собственно ридовская область, в которой все доноры ионизированы, существует лишь при условии $\Phi \gg \Phi_R$. Общее уравнение (21) в данной области, записанное с цилиндрическим оператором Лапласа Δ , принимает вид

$$\Delta \Phi = 1. \quad (26)$$

Затем появляется новая область, полностью отсутствовавшая при экранировке свободными электронами:

$$\Delta \Phi = 2\alpha \sinh(\Phi), \quad \Phi_R \gg \Phi \gg 1. \quad (27)$$

И только в условиях $\Phi \leq 1$ потенциал Φ экспоненциально стремится к нулю:

$$\Delta \Phi \approx 2\alpha \Phi. \quad (28)$$

Таким образом, появление нового малого параметра α в задаче заметно усложняет структуру границы ридовского цилиндра.

Чтобы заострить внимание на существенных деталях этого предельного случая, полезно, как и в первоначальном варианте описания поля вокруг заряженной нити (см. определение $\varphi(r)$ (8)), получить конечные результаты для распределения потенциала в предположении о ступенчатом распределении заряда вокруг заряженной нити:

$$n(r) = \begin{cases} n_d, & 0 \leq r \leq R_d, \\ n_e, & R_d \leq r \leq R_e, \end{cases} \quad (29)$$

$$n_e = n_d \alpha, \quad \alpha \ll 1 \quad (\text{см. (21)}).$$

Величина n_e имеет смысл плотности свободных электронов. Физическая картина, отвечающая подобному распределению плотности экранирующего заряда, заключается в следующем. В области $r \leq R_d$ все доноры ионизированы. Радиус этой области определен требованием

$$e\varphi(R_d) \approx 0,5E_d. \quad (30)$$

Однако положительный заряд, заключенный в этом цилиндре, недостаточен для полной экранировки поля заряженной нити. Следовательно, поле нити выходит за пределы первого скачка плотности заряда. В области $R_d \leq r \leq R_e$ амплитуда поля недостаточна для полной ионизации доноров. Поэтому дальнейшая экранировка возможна лишь за счет малой плотности свободных электронов $n_e \ll n_d$. Очевидно, что распределение $n(r)$ (29) слабо напоминает реально сглаженное распределение плотности заряда (21). Тем не менее оно обладает нужными характерными свойствами и позволяет решить цилиндрически симметричную задачу для потенциала до

конца. При решении этой задачи использованы граничные условия

$$\begin{aligned} \varphi(R_d + 0) &= \varphi(R_d - 0), & \varphi'(R_d + 0) &= \varphi'(R_d - 0), \\ \varphi(R_e) &= 0, & \varphi'(R_e) &= 0, \end{aligned} \quad (31)$$

а также дополнительное условие (30), определяющее всю специфику ситуации.

Решая соответствующую граничную задачу, получаем следующее конечное выражение для R_e и уравнение для определения R_d :

$$R_e^2 = \frac{R^2 - R_d^2}{\alpha}, \quad (32)$$

$$1 - x^2 = \frac{E_d}{2V_C \ln[\alpha^{-1}(1 - x^2)]}, \quad x = \frac{R_d}{R}, \quad (33)$$

$$V_C = e^2 n_d \varepsilon^{-1} \pi R^2, \quad (34)$$

R — ридовский радиус задачи.

Согласно (33) радиус R_d донорного экранирования меньше ридовского радиуса R в меру отличного от нуля параметра $\gamma = E_d V_C^{-1}$. Что касается электронного радиуса R_e , то $R_e \gg R$, если $\alpha \ll 1$.

Остановимся на ограничениях теории донорного экранирования. Как было отмечено выше, появление дополнительной ступеньки в распределении плотности заряда вокруг заряженной дислокации связано со стремлением химического потенциала к значению $F \rightarrow 0,5E_d$. Такая асимптотика F верна для сколь угодно низких температур в случае полупроводника с одним типом примесей. Если же кроме доноров в образце имеется небольшая примесь акцепторов n_a , то химический потенциал будет оставаться в окрестности $F \approx 0,5E_d$ лишь до тех пор, пока $n_d \gg n_e \gg n_a$. При дальнейшем уменьшении температуры химический потенциал стремится к значению $F \rightarrow E_d$, и причины для возникновения дополнительной ступеньки пропадают. Таким образом, необходимым условием существования дополнительной ступеньки является требование

$$n_d \gg n_e \gg n_a, \quad (35)$$

которое может реализоваться в окрестности температуры вымерзания свободных электронов.

Что касается использования одномерного описания переходной области, то оно справедливо при выполнении неравенства

$$r_D^* = r_D \alpha^{-1/2} \ll R. \quad (36)$$

Определения R_d , R_e (см. (32) и (33)) найдены из решения цилиндрически симметричной задачи. Чтобы эти определения были разумны, необходима достаточная резкость первой из ступенек в распределении $n(r)$. Поэтому указанные соотношения справедливы лишь в области существенно низких температур и носят, в основном, качественный характер, позволяя четко определить разницу между R , R_d и R_e .

2.2. О спектре электронов на заряженной дислокации

В случае мелкого дислокационного уровня ответ на поставленный вопрос сводится к решению в однозонном приближении соответствующего уравнения Шрёдингера, содержащего исходный притягивающий потенциал $V_d(r)$

дислокационного происхождения и кулоновское поле заряженной дислокации $V_C(r)$:

$$\begin{aligned} V_C(r) &= e\varphi(r), \quad \varphi(r) \text{ из (8),} \\ [\mathcal{E}(\hat{\mathbf{p}}) + V_d(r) + V_C(r)] \psi &= E\psi, \\ \mathcal{E}(\hat{\mathbf{p}}) &= \frac{\hbar}{2m_*} \Delta, \end{aligned} \quad (37)$$

где ψ — волновая функция электрона, m_* — его эффективная масса, Δ и $\hat{\mathbf{p}}$ — операторы Лапласа и импульса. Примеры решения подобной задачи содержатся в ряде теоретических работ [12].

С увеличением глубины эффективной дислокационной ямы положение, на первый взгляд, усложняется, так как отпадает возможность использования однозонного приближения. Однако, интересуясь не полным решением задачи о спектре электрона на дислокации, а лишь деформацией этого спектра кулоновским взаимодействием, можно говорить об упрощении ситуации. Дело в том, что в условиях сильной локализации электронов на дислокации, достигающей в реальных полупроводниках нескольких межатомных расстояний, среднее кулоновское поле в окрестности оси заряженной дислокации оказывается гораздо более плавной функцией координаты r , чем эффективная потенциальная энергия $V_d(r)$ дислокационного происхождения. В подобной ситуации исходное уравнение (37), в котором $\mathcal{E}(\hat{\mathbf{p}})$ теперь является сложной функцией квазиимпульса $\hat{\mathbf{p}}$ электрона, приводится к виду:

$$[\mathcal{E}(\hat{\mathbf{p}}) + V_d(r)] \psi = [E_j(p_{||}) - V_C(0)] \psi, \quad (38)$$

где $V_C(0)$ — среднее значение кулоновской энергии в окрестности оси заряженной дислокации, $E_j(p_{||})$ — собственные значения волнового уравнения (38) для электрона, находящегося на заряженной дислокации. Индексом j в определении E_j нумеруются дискретные квантовые числа, отвечающие поперечному движению электрона в поле $V_d(r) + V_C(r)$, импульс $p_{||}$ характеризует движение электрона вдоль оси дислокации.

Из (38) следует, что задача о глубоких уровнях для электрона на дислокации сводится к задаче без кулоновского взаимодействия переобозначением:

$$E_j(p_{||}) - V_C(0) = E_j^0(p_{||}), \quad (39)$$

где $E_j^0(p_{||})$ — закон дисперсии электрона на дислокации в отсутствие кулоновского взаимодействия. Таким образом, кулоновское взаимодействие приводит к простой сдвиге положения всех глубоких уровней на величину

$$E_j(p_{||}) = E_j^0(p_{||}) + V_C(0). \quad (40)$$

Расстояние между соседними глубокими уровнями при этом не меняется. В качестве $V_C(0)$ в формуле (40) следует употреблять величину $V_C = e\varphi(c)$, где $\varphi(r)$ получают из (8).

Следующий вопрос, не имеющий пока систематического решения, касается зависимости E_j от $p_{||}$. Первые указания на существование свободного движения электронов вдоль дислокации в кремнии содержатся в работах [13, 14] по спин-зависимым эффектам². Однако

общая точка зрения по этому поводу еще не сформировалась.

В отсутствие информации о характере движения дислокационных электронов приходится использовать какие-либо модельные предположения, допуская свободное движение электрона вдоль дислокации с некой эффективной массой m_* либо считая электроны локализованными. Имеет смысл, однако, заметить, что вклад продольного движения электронов в полную свободную энергию дислокационных электронов пропорционален температуре. В то же время, энергии $E_j(0)$ и $V_C(0)$ для глубоких дислокационных уровней и не малых коэффициентов заполнения существенно превосходят температуру. По этой причине конкретная зависимость $E_j(p_{||})$ в задаче о вычислении коэффициента заполнения дислокации играет роль лишь в области $eV_C(0) < T$. В обратном предельном случае $eV_C(0) > T$, имеющем для глубоких уровней широкую область применимости, выражение (40) можно заменить приближенным:

$$E_j(p_{||}) \approx E_j^0(0) + V_C = E_j + V_C. \quad (41)$$

Величины E_j являются константами теории и должны определяться экспериментально.

Выражения (40), (41) позволяют сделать существенный вывод о последовательности заполнения уровней E_j . Именно пока заполняется нижний уровень дислокационного спектра E_1 , все остальные уровни должны оставаться пустыми, так как растущее значение V_C автоматически поднимает более высокие уровни с $j > 1$ над химическим потенциалом. В связи с этим замечанием, а также экспериментальным фактом возможности заполнения различных дислокационных уровней, продемонстрированном, например, на рис. 3, следует предположить, что дислокационные уровни имеют конечные емкости C_j , дополнительно характеризующие свойства данного уровня. Не претендуя в дальнейшем на вычисление значений этих емкостей, так же, как и положений дислокационных уровней в запрещенной зоне полупроводника, будем считать, что каждый из уровней характеризуется двумя константами: E_j и C_j , значения которых должны определяться экспериментально.

До сих пор при обсуждении равновесных свойств заряженной дислокации полностью игнорировались деформационные явления, способные влиять на параметры заряженной дислокации. В данном разделе этот пробел частично восполняется.

Обсудим прежде всего роль деформационного взаимодействия, возникающего между электронами (дырками) и дислокацией. В изотропном приближении это дополнительное (наряду с кулоновским) взаимодействие имеет вид:

$$V_\xi^i(r, \vartheta) = W_i \frac{(1-2\nu)}{2\pi(1-\nu)} \frac{|\mathbf{b}|}{r} \sin(\vartheta), \quad i = l, p, \quad (42)$$

где \mathbf{b} — вектор Бюргерса, W_i — константы электрон-фононного взаимодействия, имеющие для германия масштаб $W_i \approx 10$ эВ [11] и различные, в принципе, для электронов и дырок, ν — коэффициент Пуассона, ϑ — угол, отсчитываемый от плоскости скольжения дислокации. Учитывая, что энергия $V_\xi(r, \vartheta)$ (42) знакопеременна, считаем, что имеются квазимикроскопические области валентной зоны и зоны проводимости, в окрестности

² В дальнейшем выяснилось, что в экспериментах [13, 14] участвуют дислокации Ломера [15].

которых электроны (дырки) притягиваются к дислокации либо отталкиваются от нее.

Естественно, что в потенциале (42) возникают связанные электронные и дырочные состояния. В отсутствие цилиндрической симметрии детали деформационного спектра электронов и дырок на дислокации могут быть выявлены лишь численно. Соответствующие расчеты [16–21] дают для германия оценки "глубины" основного деформационного уровня E_ξ следующего масштаба:

$$\begin{aligned} E_\xi^e &\approx -0,1 \text{ эВ для электронов,} \\ E_\xi^p &\approx +0,02 \text{ эВ для дырок.} \end{aligned} \quad (43)$$

Такие энергии можно относить еще к разряду "мелких", что и оправдывает при расчете $E_\xi^{e,p}$ использование однозонного приближения.

Интересно отметить, что относительная глубина деформационной ямы для дырок в окрестности заряженной дислокации может меняться в зависимости от степени заполнения дислокационных уровней электронами. Дело в том, что с ростом f электроны, осевшие на дислокации, начинают дополнительно сжимать решетку в соответствии с известными положениями теории деформационного потенциала. В результате, энергия отдельного электрона на дислокации уменьшается на величину [11]

$$\tilde{V}_\xi \approx W_0 \operatorname{div} \mathbf{u} \approx \frac{W_0^2 f}{\mu \pi a^3}, \quad (44)$$

где константа W_0 аналогична использованной в (42), μ — модуль сдвига, a — межатомное расстояние. Наличие упругой деформации, пропорциональной f , внутри трубки радиусом a/f деформирует, в принципе, и решетку за пределами дислокации. Однако, как показывают конкретные расчеты, этим эффектом можно пренебречь. Влияние взаимодействия (44) на величину f продемонстрировано на рис. 8 (сплошная кривая).

Еще один изящный эффект деформационного происхождения не имеет пока экспериментального подтверждения, но вполне заслуживает внимания и должен приниматься в расчет в будущих постановках различных экспериментов с электронами на дислокациях. Речь идет о самолокализации электрона, осевшего на дислокационный уровень и способного, в принципе, свободно двигаться вдоль оси дислокации. В действительности, однако, этого не происходит, так как вмещивается в "игру" деформационное взаимодействие (44). Наличие этого взаимодействия приводит к тому, что в одномерном варианте движения, которое возникает в данном случае, электрону выгоднее самолокализоваться на определенном масштабе длины на оси дислокации. При этом вдоль дислокации движется уже не свободный электрон, а образование полярного типа с заметно перенормированной массой деформационного происхождения. Подобное образование, впервые изученное при локализации электронов на дислокации в работе Воронова и Косевича [22], получило специальное название конденсона.

Стандартный способ демонстрации явления одномерной локализации заключается в следующем. Полный функционал энергии электрона на дислокации с учетом его взаимодействия с деформацией решетки минимизируется и усредняется по поперечному движению электрона. Возникающий после осуществления этих

процедур функционал дает следующее одномерное уравнение для движения электрона:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m_*} \chi'' - \lambda \chi + \alpha \beta^2 \gamma^2 \chi^3 &= 0, \\ \int |\chi| dz &= 1, \\ \alpha &\approx 0,003, \quad \beta = \frac{W^2}{G}, \quad \gamma = \frac{2mWb(1-2\nu)}{2\pi\hbar^2(1-\nu)}. \end{aligned} \quad (45)$$

Здесь W — см. (42), G — модуль Юнга, α — численная константа, возникающая в ходе усреднения по поперечным переменным, λ — энергия.

Интересующее нас нормированное решение уравнения (45) имеет вид

$$\chi(z) = \sqrt{0,5k} \cosh^{-1}[k(z-z_0)], \quad k = \frac{m_* \alpha \beta^2 \gamma^2}{8\hbar^2 G^2}. \quad (46)$$

Таким образом, возникает самолокализация электрона при его движении вдоль оси заряженной дислокации.

2.3. Определение коэффициента заполнения

Обсуждение равновесных свойств заряженных дислокаций должно завершиться расчетом равновесного коэффициента заполнения f отдельной дислокации в разных предельных случаях по температуре, плотности точечных дефектов и степени деформации образца. При выполнении этой программы для образцов n -типа эффективно используется информация, изложенная в разделах 2.1 и 2.2. Считая задачу цилиндрически симметричной, пренебрегая конечностью электронной массы при движении электрона вдоль оси дислокации и требуя выполнения неравенства $R < N_D^{-1/2}$, используем для определения f следующее выражение:

$$f = \sum f_j, \quad f_j = C_j \left[\exp\left(\frac{E_j + V_C - F}{T}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad j = 1, \dots, J. \quad (47)$$

Здесь F — текущее значение химического потенциала, $V_C \approx e\varphi(c)$, $\varphi(r)$ — см. (8), отсчет энергий E_j и химического потенциала ведется от потолка валентной зоны, J — максимальный номер дислокационного уровня, N_D — плотность дислокаций. В случае малого числа дислокаций, когда ридовские цилиндры отдельных дислокаций не перекрываются между собой, т.е. $R < N_D^{-1/2}$, в качестве F можно использовать определение F в образце n -типа без дислокаций.

Если число дислокационных уровней равно единице ($J = 1$) и $C_1 = 1$, определение f (47) сводится к процедуре использованной в работах Риды [3, 4]. В этом случае с логарифмической точностью можно дополнительно упростить определение f , требуя выполнения равенства

$$E_1 + V_C = F. \quad (48)$$

Соотношение (48) эквивалентно уравнению Риды:

$$E_1 + \frac{e^2 f}{\varepsilon a} \left(2 \ln \frac{R}{c} - 1 \right) = F, \quad (49)$$

полученному им в своих первых работах по теории заряженных дислокаций (здесь c взято из (1)).

С повышением температуры T обращение в нуль показателя экспоненты в знаменателе фермиевской функции оказывается плохим приближением даже в случае задачи с одним уровнем. В самом деле, приведем общее определение

$$f = C_1 \left[\exp \left(\frac{E_1 + V_C - F}{T} \right) + 1 \right]^{-1} \quad (50)$$

к виду, удобному для сравнения с (49):

$$E_1 + V_C = F^*, \quad F^* = F + T \left(\ln \frac{C_1}{f} - 1 \right). \quad (51)$$

Очевидно, что определение f из (51) имеет структуру, аналогичную (49), но с перенормированным значением F^* .

В общем случае $J > 1$ имеется лишь одна корректная возможность расчета f — использование общего соотношения (47).

Практическую информацию о величине f можно черпать из различных экспериментов. Наиболее популярной является методика, использующая измерения холл-эффекта в деформированных образцах [6, 23]. При этом полагается, что холловские измерения дают прямые сведения о средней плотности свободных носителей $\langle n_e \rangle$ (электронов или дырок), связанной с истинной плотностью n_e и относительным объемом v ридовских цилиндров $v \approx \pi R^2 N_d$ соотношением [9]:

$$\langle n_e \rangle = n_e(1 - v), \quad v = \pi R^2 N_d. \quad (52)$$

Зная $\langle n_e \rangle$ и n_e , нетрудно оценить v и, далее, используя измеренное значение N_d , найти R , а значит, и $f = \pi R^2 N_d a$. На вставке рис. 8. представлены экспериментальные данные для v [23], полученные указанным способом.

Если дислокации, введенные в образец, достаточно коллинеарны, то информация о параметре v может быть получена из измерений проводимости образца вдоль и поперек направления введенных дислокаций, ибо в этом случае

$$\sigma_{\parallel} = \sigma_0(1 - v), \quad \sigma_{\perp} = \sigma_0(1 - v)g(v), \quad (53)$$

где σ_0 — проводимость контрольного образца, $g(v)$ — структурный фактор, учитывающий эффект огибания свободными носителями ридовских цилиндров.

В экспериментах [23] степень анизотропии в распределении дислокаций имела масштаб 1:5, так что применимость определений (53) резонна. Результаты соответствующих измерений f с использованием (53) дают значения, приведенные на рис. 8.

Располагая данными $f(T)$ и определением f (47), определяем параметры электронного спектра на дислокации. Рис. 8 содержит серию теоретических кривых, найденных в разных приближениях:

штриховая кривая получена с помощью соотношения (48) с уровнем $E_1 \equiv E_2 = 0,34$ эВ;

штрихпунктирная кривая определена в приближении двух уровней с помощью общей формулы (47).

Обращает на себя внимание то обстоятельство, что варьирование положения уровня E_1 и его емкости не дает возможности увеличить наклон теоретической кривой, чтобы приблизить расчет к эксперименту;

сплошная кривая построена в приближении двух уровней с учетом деформационного взаимодействия \tilde{V}_{ξ}

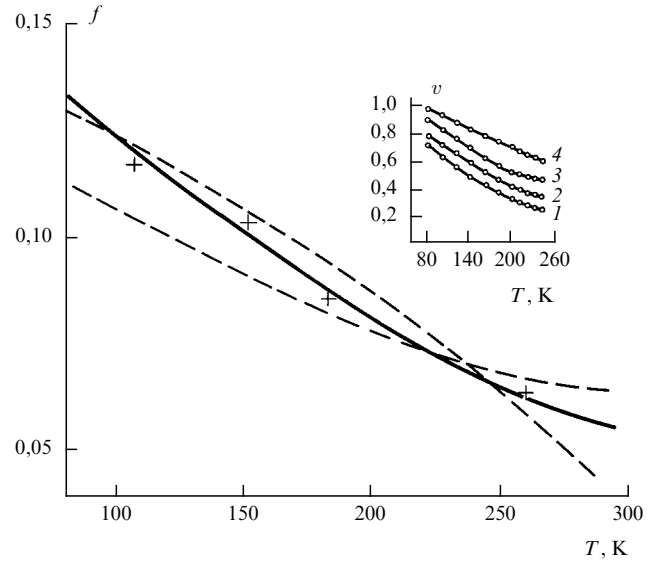


Рис. 8. Различные варианты обработки экспериментальных данных [23] для $f(T)$. Штриховая линия — ридовское приближение: $E_1 = E_2$, $E_2 + V_C = F$, $E_2 = 0,34$ эВ, химический потенциал F имеет те же значения, что и на вставке. Штрихпунктирная линия отвечает определению $f(T)$ (47) в модели с двумя уровнями: $E_2 = 0,41$ эВ, $C_2 = 0,1$, $E_1 = 0,1$ эВ, $C_1 = 0,05$. Сплошная линия — $f(T)$ из (47) с такими же двумя уровнями и дополнительным вкладом деформационного происхождения, точки — эксперимент [23]. На вставке — температурная зависимость доли объема v , занимаемого дислокационными цилиндрами, вычисленная по (52) для образцов 1–4 с $N_d = (3; 3,8; 5; 2; 6) \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$; $n_d = 2,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$

(44) в предположении, что волновая функция электрона, локализованного на дислокации, размазана на расстоянии 9Å .

Разные варианты расчетных кривых, расположенных вблизи экспериментальных точек, свидетельствуют о том, что транспортные измерения величины f слишком неоднозначны для определения характеристик дислокационных уровней. Эти данные должны дополняться экспериментами типа DLTS, информацией о поведении р-германия или какими-либо оптическими измерениями, допускающими последовательную интерпретацию.

Здесь же имеет смысл отметить, что поведение параметра v для кремния в области $v < 0,5$ пока не изучено.

Заканчивая обсуждение экспериментальных следствий, демонстрирующих наличие в пластически деформированных полупроводниках заряженных линейных дефектов, отметим красивый качественный результат, полученный уже в первых работах [5] по изучению влияния ориентированных дислокаций на проводимость кристалла и исследованный затем более подробно в [24]. Речь идет о резком возрастании анизотропии образца с дислокациями при уменьшении температуры полупроводника T , меньше некой критической T_0 (рис. 9).

Качественное объяснение этого эффекта заключается в том, что в момент $T = T_0$ ридовские цилиндры соседних дислокаций касаются друг друга, и протекание тока в направлении, нормальном осям дислокации, оказывается затрудненным. Таким образом, положение точки T_0 можно оценить из требования

$$R(T_0) \approx N_d^{-1/2}, \quad (54)$$

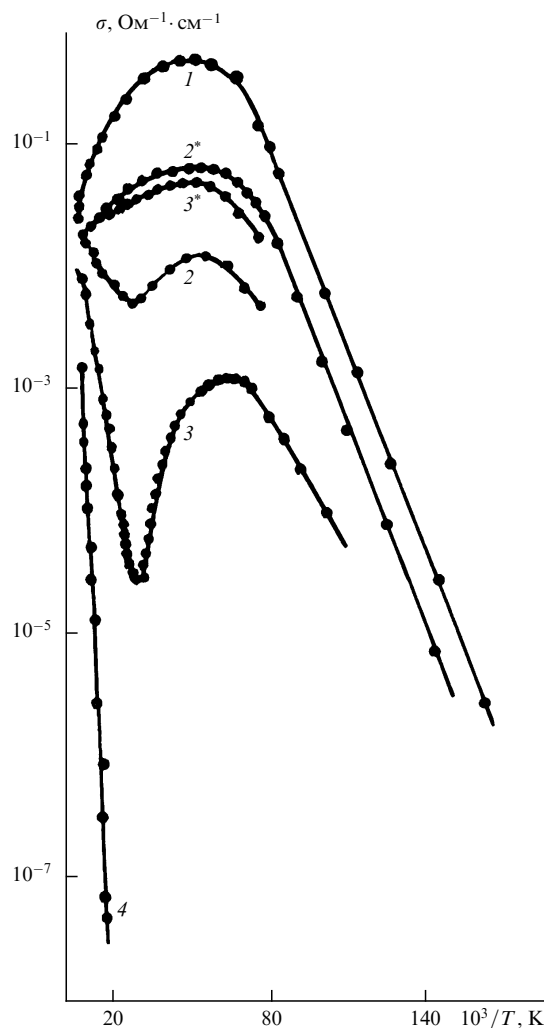


Рис. 9. Температурная зависимость электропроводности в контрольном (1) и деформированных (2–4) образцах при направлении электрического поля вдоль (кривые 2* и 3*) и поперек кривые (2–4) преимущественного направления дислокации. Плотность дислокаций в образцах 2–4 составляет $3,0 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$, $3,8 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$ и $5,2 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$ соответственно [24]

где N_d — плотность дислокаций в данном образце. При изменении плотности дислокаций можно ожидать вариации температуры T_0 в соответствии с оценкой (54) и определением ридовского радиуса

$$\pi R^2 n_d = \frac{f}{a},$$

в котором коэффициент заполнения меняется с температурой примерно линейно (см. рис. 8). Измерения [24] подтверждают падение температуры T_0 при уменьшении плотности дислокаций в соответствии с (54).

3. Заряженные дислокации в полупроводниках р-типа

Обратимся к случаю р-легирования. Как впервые было отмечено Шретером [25], дислокации, введенные в р-германий, демонстрируют параллельно акцепторное и донорное свойства. Это заключение следует из экспериментальных данных о температурной зависимости плотности свободных дырок в образцах до и после пластической деформации (см. рис. 4). В области $T < T^*$ плот-

ность свободных дырок n_p в деформированном образце меньше соответствующей плотности контрольного образца n_p^0 , что можно объяснить донорным действием введенных в образец дислокаций. В случае $T > T^*$ — обратная картина, $n_p > n_p^0$ — факт, свидетельствующий об акцепторном действии дислокаций на свойства полупроводника.

Обработка данных из [25], а также более поздних результатов [26–28] была выполнена с использованием минимума информации о свойствах заряженных дислокаций в р-полупроводниках. А именно, полагалось, что при температуре $T = T^*$, когда дислокации нейтральны, уровень Ферми F совпадает с положением дислокационного уровня E_0 :

$$F(T^*) = E_0. \quad (55)$$

Это предположение выглядит на первый взгляд разумным и позволяет оценить величину E_0 (согласно [25–27], для германия $E \approx 0,09$ эВ над вершиной валентной зоны), однако остается нерешенным ряд качественно интересных вопросов. Прежде всего, какое действие приписывается уровню E_0 — акцепторное или донорное? Как объяснить точное обращение в нуль фактора заполнения f дислокационного уровня электронами в условиях (55) при конечной температуре $T = T^*$. Наличие этого факта несомненно (в точке $T = T^*$ плотности дырок деформированного и контрольного образца совпадают, что соответствует отсутствию лишних электронов на дислокациях), но его интерпретация не ясна. Наконец, менее очевидный вопрос: достаточна ли модель заряженной дислокации с одним феноменологическим параметром — положением дислокационного уровня E_0 в запрещенной зоне полупроводника для описания свойств $n_p(T)$ в области высоких температур $T \gg T^*$. В самом деле, пусть в этой области T дислокации "работают" как акцепторы. В условиях $T \gg T^*$ средняя плотность дырок $n_p(T)$ в деформированном образце заметно превосходит плотность дырок n_p^0 в контрольном образце, что позволяет при обсуждении ситуации $T \gg T^*$ пренебречь плотностью точечных акцепторов. В результате вопрос о заполнении дислокации электронами и, в частности, решение соответствующей электростатической задачи сводится к описанию взаимодействия отрицательно заряженной дислокации с облаком окружающих ее дырок.

Сформулированная электростатическая задача допускает точное решение [29, 30]. Опуская в связи с этим детали расчетов, которые можно найти в [30], приведем финальное выражение для средней плотности дырок:

$$\tilde{n}_p(T) = \frac{1}{aR^2} \frac{T}{T_C}, \quad T_C = \frac{e^2}{\epsilon a}, \quad T^* < T < T_C. \quad (56)$$

Здесь a — межатомное расстояние, ϵ — диэлектрическая постоянная полупроводника, R — среднее расстояние между дислокациями.

Нетрудно видеть, что предсказание (56) качественно противоречит наблюдениям [26, 27] (рис. 10, где зависимость $\tilde{n}_p(T)$ (56) нанесена штриховой линией). Это противоречие можно устранить лишь одним способом, предполагая, что заполнение электронами дислокационного уровня ограничено не только кулоновскими силами (этот фактор точно учтен при выводе (56)), но и другими причинами не электрического происхождения.

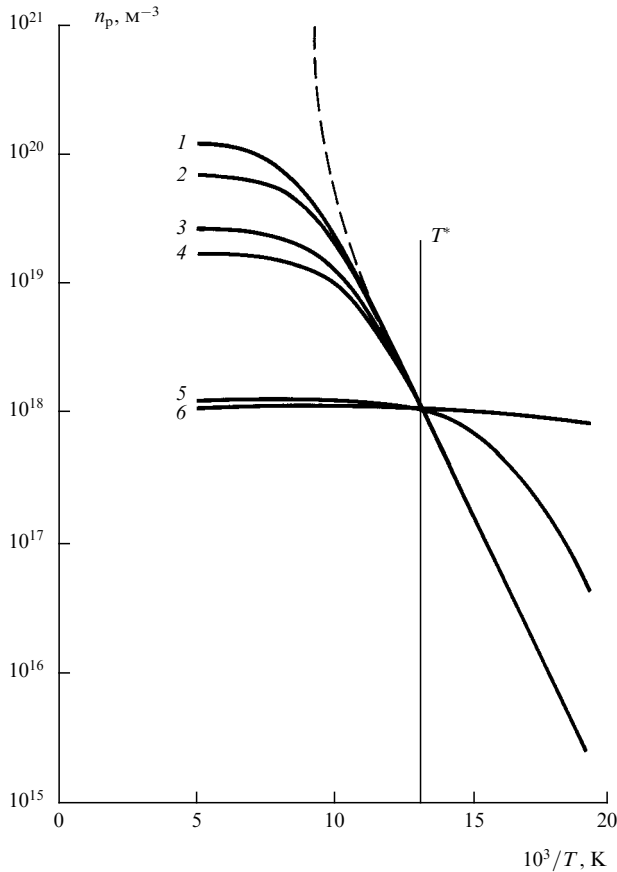


Рис. 10. Поведение $n_p(T)$ в нейтральном приближении и условии $E_1 = \mathcal{E}_1 = E_0$, $S_1 = 1$. Для определения параметров E_0 и C_1 использовано экспериментальное [27] положение $T = T^*$ и наклон кривой $n_p(T)$ в этой точке. В результате получено $E_0 = 0,077$ эВ, $C_1 = 0,144$. Кривые 1–6 соответствуют плотностям дислокаций $3, 5 \cdot 10^{11}$; $2, 10^{11}$; $7 \cdot 10^{10}$; $4, 5 \cdot 10^{10}$; 10^9 ; 10^7 м $^{-2}$. Для кривых 1–4 N_d взята из [27]

Учитывая сказанное, приходится усложнять модель спектра для описания свойств р-полупроводника с достаточно большой плотностью дислокаций:

а) этот спектр должен содержать в нижней части запрещенной зоны два уровня: акцепторный E_1 и донорный \mathcal{E}_1 ;

б) уровни E_1 и \mathcal{E}_1 обладают конечной емкостью C_1 и S_1 .

3.1. Нейтральная модель акцепторно-донорного действия дислокаций

Если наряду с предположениями а), б), отмеченными выше, плотность дислокаций N_d достаточно велика, то электроны (дырки), оседающие на дислокации, практически не взаимодействуют между собой, и статистика полупроводника с дислокациями напоминает аналогичную задачу с точечным легированием. В частности [31], можно использовать условие локальной нейтральности, являющееся уравнением относительно уровня Ферми F :

$$N_v(T) \exp\left(-\frac{F}{T}\right) + \frac{n_d}{1 + \exp\left(-(\mathcal{E}_1 - F)/T\right)} = \frac{n_a}{1 + \exp\left((E_1 - F)/T\right)} + n_a^0. \quad (57)$$

Здесь n_a^0 — объемная плотность точечных акцепторов, E_1 и \mathcal{E}_1 — положения акцепторного и донорного уровней в

запрещенной зоне полупроводника, $n_a = N_d C/a$, $n_d = N_d S_1/a$ — эффективные плотности дислокационных акцепторов и доноров, C , S_1 — соответствующие емкости, $N_v(T)$ — плотность состояний дырок в валентной зоне. Для того чтобы кривая $n_p(T)$ проходила через точку $T = T^*$ без излома, как это имеет место в экспериментах [25–27], необходимо полагать

$$E_1 \cong \mathcal{E}_1 = E_0. \quad (58)$$

Используя это дополнительное предположение и обозначения

$$x = \exp\left(\frac{E_0 - F}{T}\right), \quad n_0 = N_v(T) \exp\left(-\frac{E_0}{T}\right), \quad (59)$$

приведем уравнение (57) к виду

$$n_0 x + \frac{x n_d}{1 + x} = \frac{n_a}{1 + x} + n_a^0 \quad (60)$$

или

$$x = -\frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_d}{n_0} - \frac{n_a^0}{n_0} \right) + \left[\frac{1}{4} \left(1 + \frac{n_d}{n_0} - \frac{n_a^0}{n_0} \right)^2 + \frac{n_a}{n_0} + \frac{n_a^0}{n_0} \right]^{1/2}. \quad (61)$$

В интересующем нас случае

$$n_d > n_a \gg n_a^0, \quad (62)$$

и выражение (61) упрощается:

$$x \approx \frac{n_a + n_a^0}{n_0 + n_d - n_a^0}. \quad (63)$$

Отсюда нетрудно видеть, что в пределе $T \rightarrow \infty$

$$n_0 \gg n_d, \quad x \rightarrow \frac{1}{n_0} (n_a + n_a^0), \quad n_p(T) = n_0 x = n_a + n_a^0. \quad (64)$$

Асимптотика (64) для $n_p(T)$ позволяет оценить емкость C_1 по известным из эксперимента величинам $n_p(\infty)$ и N_d . Согласно [26] $n_p(\infty) = 10^{20}$ м $^{-3}$, $N_d = 3,5 \cdot 10^{11}$ м $^{-2}$ и, следовательно,

$$C_1 \approx 0,13. \quad (65)$$

Интересна точка T^* , которая в терминах (59), (60) определяется равенствами

$$\begin{cases} n_d x^* = n_a & x^* = x(T^*), \\ n_0 x^* = n_a^0, & n_0^* = n_0(T^*) \end{cases} \quad (66a)$$

$$(66b)$$

или

$$\frac{C_1}{S_1} = \frac{n_a^0}{n_0(T^*)}. \quad (67)$$

Очевидно, что величина T^* не зависит от плотности дислокаций, т.е. все зависимости $n_p(T)$ для разных плотностей дислокаций должны пересекаться в одной точке $T = T^*$, что и имеет место в действительности.

Далее, учитывая, что эксперименты [27] не дают указаний на специальную малость S_1 , можно полагать $S_1 \cong 1$. В этом случае соотношения (66), (67) являются определением энергии E_0 :

$$x^* = \frac{C_1}{S_1} \quad \text{или} \quad E_0 = F(T^*) - T^* \ln \frac{C_1}{S_1}. \quad (68)$$

Определение E_0 (68) совпадает с (55) в специальном случае $C_1 = S_1$.

Наклон зависимости $n_p(T)$ в точке T^* есть

$$\left. \frac{dn_p}{d(T^{-1})} \right|_{T=T^*} = \frac{E_0 n_0^* n_d}{n_0^* + n_d} \left(\frac{n_0^*}{n_d + n_0^*} - 1 \right). \quad (69)$$

При стремлении N_d к нулю наклон естественно стремится к нулю. Однако численно эта зависимость слишком слаба, чтобы объяснить наблюдаемую дисперсию кривых $n_p(T)$ в функции от N_d . На рис. 10 приведены численные зависимости $n_p(T)$, построенные в [31] с помощью определения $n_p = x n_0$ и выражения для x из (61). Эти графики хорошо коррелируют с экспериментом [26, 27] в широком интервале температур для плотностей N_p , равных $3,5 \cdot 10^{11} \text{ м}^{-2}$ и $2 \cdot 10^{11} \text{ м}^{-2}$, но расходятся с ним в области $N_d < 7 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-2}$. Причиной такого несоответствия может являться кулоновское взаимодействие между зарядами на дислокациях, величина которого растет с уменьшением плотности дислокаций.

3.2. Кулоновская коррекция модели

Асимптотические свойства нейтральной модели исследованы в разделе 3.1 для предельного случая $E_1 = \mathcal{E}_1$, $S_1 \rightarrow 1$. Что касается общей картины, то здесь приходится использовать численные методы. Полагая, как и в разделе 3.1, $E_1 = \mathcal{E}_1$, $S_1 \rightarrow 1$, находим зависимость плотности дырок n_p от T [32]. Небольшая разница между параметрами E_0 , C_1 , следующими из рис. 10, и аналитическими оценками раздела 3.1 связана с разными способами подгонки экспериментальных данных [27]. В разделе 3.1 принималось во внимание значение температуры T^* и асимптотическое значение n_p в области высоких температур. На рис. 10 подгонка шла с использованием значения T^* и наклона зависимости $n_p(T)$ в точке T^* .

Недостатком нейтральной модели является слабая чувствительность $n_p(T)$ к плотности дислокаций N_d в области $N_d < N_d^*$, где N_d^* — асимптотическое значение N_d , при котором $n_p(T)$ перестает зависеть от N_d . Конечно, при стремлении N_d к нулю зависимость $n_p(T)$ стремится к контрольной величине n_p^0 (см. рис. 10). Однако степень этой зависимости недостаточна для объяснения данных [26, 27] в области малых деформаций образца. Цель данного раздела — обсуждение возможных причин, повышающих чувствительность модели к плотности дислокаций. Причин таких две: разная высота уровней E_1 и \mathcal{E}_1 , а также кулоновское взаимодействие электронов, осевших на дислокации.

3.2.1. Для определения роли $2\Delta = E_1 - \mathcal{E}_1$ в нейтральной модели

$$E_1 = E_0 + \Delta, \quad \mathcal{E}_1 = E_0 - \Delta, \quad (70)$$

нет необходимости во введении каких-либо дополнительных понятий. Речь идет о системе определений из раздела 3.1 либо о формулах (76), (77), приведенных

ниже, в которых убираются кулоновские добавки. Результирующее поведение $n_p(T)$ для условий из [27], $S_1 = 1$ и двух значений Δ/E_0 , равных 0,25, 0,35 дается на рис. 11. Параметры E_0 и C_1 выбираются по двум точкам зависимости $n_p(T)$ (положение точки $T = T^*$ и значение $n_p(T)$ при $10^3/T \geq 5$). Данные рис. 11 показывают, что с ростом Δ вверх кривых $n_p(T)$ в окрестности точки $T = T^*$ возрастает. Однако начиная с $\Delta/E_0 \geq 0,25$ в температурной зависимости $n_p(T)$ появляются новые качественные детали (дополнительные изгибы), отсутствующие на экспериментальных кривых. Поэтому увеличение Δ в область $\Delta/E_0 \geq 0,25$ не имеет смысла.

Что касается масштаба веера кривых $n_p(T)$ в окрестности точки $T = T^*$, то он все еще недостаточен для объяснения экспериментальной ситуации из [26, 27], и теория должна усложняться за счет учета кулоновских эффектов.

3.2.2. Кулоновское взаимодействие зарядов на дислокации области $T = T^*$ можно условно разбить на две части:

$$V_C = V_C^+ + V_C^-. \quad (71)$$

Энергия V_C^+ отвечает знакопеременному распределению заряда вдоль дислокации при равенстве нулю общего заряда. Очевидно, что $V_C^+ \neq 0$ в точке $T = T^*$ и может быть определена выражением, являющимся разновидностью энергии Маделунга в теории ионных кристаллов:

$$V_C^+ = \frac{2e^2}{\varepsilon a} f^+ \ln 2, \quad (72)$$

$$f^+ = C_1 \left[\exp \left(\frac{E_0 - V_C^+ - F}{T} \right) + 1 \right]^{-1} + S_1 \left[\exp \left(\frac{-E_0 + V_C^+ + F}{T} \right) + 1 \right]^{-1},$$

ε — диэлектрическая постоянная, a — межатомное расстояние, F — химический потенциал. Энергия V_C^+ понижает энергию как акцепторов, так и доноров дислокационного происхождения:

$$E_a = E_0 - V_C^+, \quad E_d = E_0 - V_C^+. \quad (72a)$$

Напомним, что согласно разделу 3.1 эксперименты [26, 27] дают для E_a и E_d в нейтральном приближении близкие значения $E_a \approx E_d \approx E_0$.

Энергия V_C^- возникает при отсутствии компенсации положительного и отрицательного зарядов на дислокации:

$$f^- = C_1 \left[\exp \left(\frac{E_a^- - F}{T} \right) + 1 \right]^{-1} + S_1 \left[\exp \left(\frac{F - E_d^-}{T} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (73)$$

Можно полагать, что

$$V_C^- = \frac{e^2 f^-}{\varepsilon a} \ln \left(\frac{r_d}{a} f^- \right), \quad r_d^2 = \frac{\varepsilon T}{4\pi e^2 n_p(T)}. \quad (74)$$

Дебаевская экранировка в (74) позволяет использовать V_C^- лишь в окрестности T^* .

При $V_C^- \neq 0$ энергии E_a и E_d не равны друг другу, даже если в нейтральной модели они совпадали. В самом деле, если, например, дислокация заряжена в целом положи-

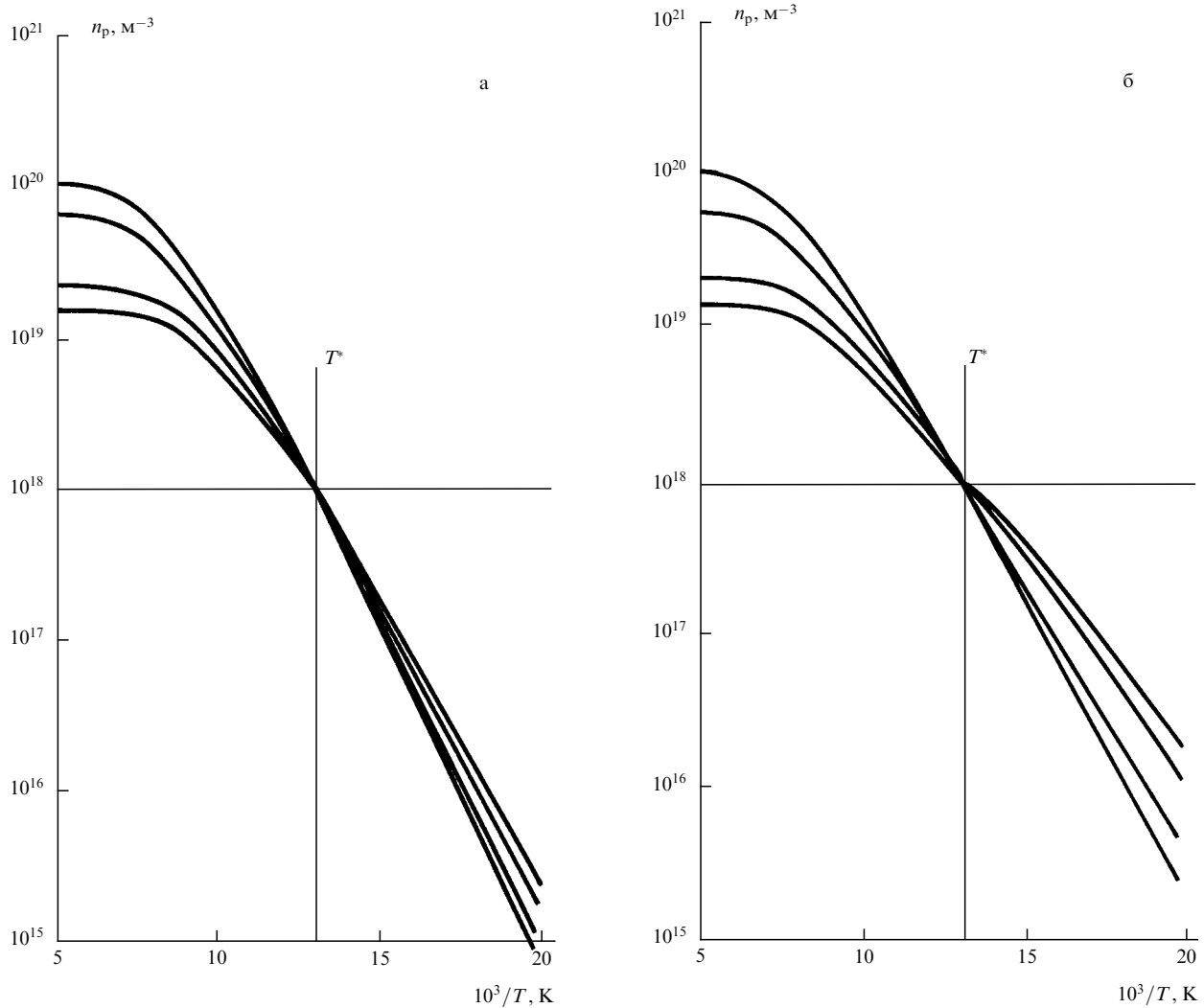


Рис. 11. Влияние параметров Δ/E_0 на поведение $n_p(T)$. Для определения параметров E_0 и C_1 использованы положение точки $T = T^*$ и значение $n_p(T)$ при высоких температурах из [27]: (а) — $\Delta/E_0 = 0,25$; $E_0 = 0,0831$ эВ; $C_1 = 0,146$; (б) — $\Delta/E_0 = 0,35$, $E_0 = 0,0835$ эВ, $C_1 = 0,145$. Плотности дислокаций N_d отвечают первым четырем значениям на рис. 10 (расчет из [32]).

тельно, то она притягивает электроны (понижает энергию E_a) и отталкивает дырки (повышает энергию E_d). В результате мы должны полагать, что

$$E_a^- = E_0 - V_C^- + \Delta, \quad E_d^- = E_0 + V_C^- - \Delta. \quad (75)$$

Очевидно, что роль V_C^- возрастает при удалении от точки $T = T^*$. Что касается V_C^+ , то ее наличие в наибольшей мере проявляется в окрестности точки $T = T^*$. Для общности в определение E_a^- , E_d^- (75) добавлена $\Delta \neq 0$ из (70).

Положение химического потенциала F^\pm определяется уравнением локальной нейтральности:

$$\begin{aligned} N_v(T) \exp\left(\frac{-F^\pm}{T}\right) + \frac{N_d C_1 / a}{1 + \exp((-E_d^\pm + F^\pm)/T)} = \\ = \frac{N_d S_1 / a}{1 + \exp((E_a^\pm - F^\pm)/T)} + n_a^0, \end{aligned} \quad (76)$$

что имеет смысл лишь в окрестности точки $T = T^*$. Здесь n_a^0 — плотность точечных акцепторов, $N_v(T)$ — плотность

состояний в валентной зоне, плотность $n_p(T)$ связана с F^\pm соотношением

$$n_p(T) = N_v(T) \exp\left(\frac{-F^\pm}{T}\right). \quad (77)$$

Решение (76), (77) совместно с (70) в условиях $V_C^\pm = 0$ дает результаты, приведенные на рис. 11. Комментарии к ним собраны в разделе 3.2.1. Введение в расчет энергии V_C^\pm , т.е. система (76), (77) вместе с (72), (72а) вызывает незначительную перенормировку E_0 и практически не влияет на вид $n_p(T)$ (не более 10%).

Наконец, поведение $n_p(T)$ при наличии V_C^- (73)–(75) представлено на рис. 12 вместе с экспериментальными точками [27], отвечающими разным плотностям дислокаций. Оптимальный набор параметров, использованный для этого, $E_0 = 0,081$ эВ, $C_1 = 0,1$, $\Delta/E_0 = 0,16$.

Итак, наблюдаемые свойства $n_p(T)$ из [25–27], включая зависимость от N_d , можно объяснить в предложенной нами модели, полагая $\Delta \neq 0$ и учитывая кулоновские эффекты, сопровождающие заполнение дислокаций электронами.

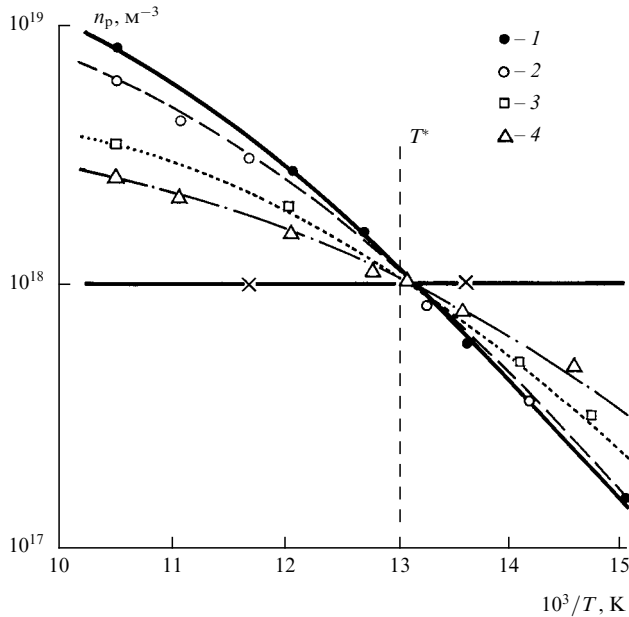


Рис. 12. Поведение $n_p(T)$ при наличии $\Delta \neq 0$ и кулоновского взаимодействия между электронами, осевшими на дислокации [32]. Кривые 1–4 — решение уравнений (73)–(75) для экспериментальных значений N_d [27]: 1 — $3,5 \cdot 10^{11} \text{ м}^{-2}$; 2 — $2 \cdot 10^{11} \text{ м}^{-2}$; 3 — $7 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-2}$; 4 — $4,5 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-2}$; точки (x) отвечают контрольному образцу без дислокаций. Параметры теории: $E_0 = 0,0813 \text{ эВ}$, $C_1 = 0,106$, $S_1 = 1$, $\Delta/E_0 = 0,1624$

3.3. Происхождение акцепторно-донорного уровня [33]

Эксперименты с одиночными дислокациями, обсуждавшиеся выше, указывают на то, что акцепторно-донорный уровень находится выше потолка валентной зоны. В то же время опыты с проводимостью **бикристаллической границы** германия, которая в известном смысле может интерпретироваться как **периодическая система краевых дислокаций с расстоянием D между ними**

$$D = \frac{b}{2 \sin(0,5\varphi)}, \quad (78)$$

требует введения в теорию дислокационного уровня ниже потолка валентной зоны [34–37]. **Здесь b — вектор Бюргерса, φ — угол разориентации.** В противном случае, казалось бы, невозможно объяснить наличие свободных дырок в окрестности дислокаций при стремлении температуры к нулю.

Предлагаемая нами модель акцепторно-донорного уровня позволяет устранить это качественное противоречие. Речь идет о модели деформационного происхождения. Как отмечалось выше (см. раздел 2) в окрестности отдельной дислокации электрон (дырка) испытывают влияние деформационного потенциала, который для краевой дислокации в изотропном приближении выглядит так:

$$V(r, \vartheta) = W \frac{1-2\nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{b}{r} \sin \vartheta. \quad (79)$$

Здесь W — константа деформационного взаимодействия (для германия $W \approx 10 \text{ эВ}$), ν — коэффициент Пуассона, ϑ — угол, отсчитываемый от плоскости скольжения.

Знакопеременность взаимодействия (79), а также масштаб константы W , позволяют высказать гипотезу,

что на расстояниях r порядка b возможно явление инверсии в электронном спектре, когда локально возмущенный потолок валентной зоны оказывается выше дна возмущенной зоны проводимости. Развитие этой гипотезы приводит к ряду качественных следствий:

а) в собственном полупроводнике электроны из вершины возмущенной валентной зоны начинают переходить в яму зоны проводимости, создавая электрон-дырочную систему;

б) уровень Ферми, разделяющий пустые и занятые состояния в запрещенной зоне полупроводника, должен спуститься к вершине возмущенной валентной зоны, обеспечивая металлический характер зоны проводимости дырок вдоль дислокации, даже в пределе $T \rightarrow 0$;

в) реально дырочный спектр на вершине деформированной валентной зоны квантован в направлении, поперечном оси дислокации, причем масштаб этого квантования характеризуется уровнем $E_0 \sim 0,1 \text{ эВ}$ над невозмущенным положением потолка валентной зоны (см. (43));

г) в полупроводнике p -типа уровень E_0 на вершине возмущенной валентной зоны начинает играть роль акцепторно-донорного уровня, взаимодействуя с точечными акцепторами; при этом обеспечивается правильное положение этого уровня (выше потолка невозмущенной валентной зоны и выше уровня E_a точечных акцепторов), что решает, в принципе, парадокс в интерпретации свойств границы бикристалла.

Таким образом, учет деформационного взаимодействия электронов с упругим полем дислокации оказывается перспективным с точки зрения самосогласованного описания экспериментов с отдельными дислокациями и с их цепочкой на границе бикристалла. Вместе с тем остается неясным механизм образования двумерной дырочной системы вдоль плоскости бикристалла. В самом деле, если изобразить в изотропном приближении распределение энергетических линий потенциала $V(r, \vartheta)$ (79), то возможность перекрытия дырочных либо электронных областей при выстраивании отдельных дислокаций в периодическую цепочку не очевидна (рис. 13). Однако более точная формулировка вопроса о деформационном потенциале, приведенная ниже, снимает и эту проблему [33].

Рассмотрим единичную 60-градусную дислокацию. Пусть для определенности ось x направлена вдоль вектора Бюргерса краевой компоненты 60-градусной дислокации, ось z параллельна направлению дислокационной линии $\langle \bar{0} \bar{1} \bar{1} \rangle$, ось y перпендикулярна плоскости скольжения $(\bar{1} \bar{1} \bar{1})$. В этом случае согласно [38] тензор относительных деформаций ε_{ij} 60-градусной дислокации выражается через соответствующие тензоры относительных деформаций 90-градусной дислокации и винтовую компоненту.

Краевая компонента

$$\varepsilon_{11} = \frac{\sqrt{3}b}{8\pi(1-\nu)} \frac{y}{(x^2+y^2)^2} (2\nu(x^2+y^2) - y^2 - 3x^2),$$

$$\varepsilon_{22} = \frac{\sqrt{3}b}{8\pi(1-\nu)} \frac{y}{(x^2+y^2)^2} (2\nu(x^2+y^2) - y^2 + x^2), \quad (80)$$

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = \frac{\sqrt{3}b}{8\pi(1-\nu)} \frac{y}{(x^2+y^2)^2} (x^2 - y^2).$$

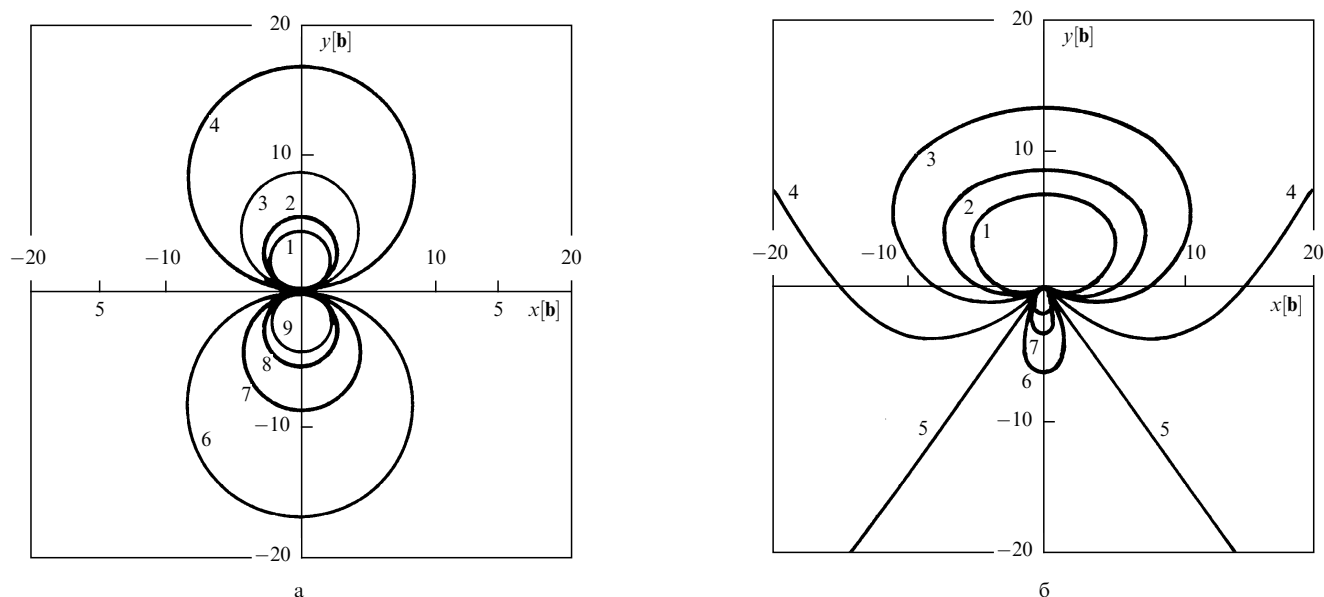


Рис. 13. Изолинии деформационного потенциала валентной зоны германия, определяемые полем упругих напряжений 60-градусной дислокации в гидростатическом приближении (а) и в соответствии с формулой (82) (б): кривые 1–9 соответствуют ΔE_v от +0,1 до –0,1 эВ с шагом 0,25 эВ; **b** — вектор Бюргерса 60-градусной дислокации\

Винтовая компонента

$$\begin{aligned} \varepsilon_{13} = \varepsilon_{31} &= -\frac{\mathbf{b}}{8\pi} \frac{y}{(x^2 + y^2)}, \\ \varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} &= -\frac{\mathbf{b}}{8\pi} \frac{y}{(x^2 + y^2)}, \end{aligned} \quad (81)$$

где **b** — вектор Бюргерса 60-градусной дислокации, ν — коэффициент Пуассона.

Деформационный потенциал в валентной зоне кубического кристалла определяется, согласно [39], соотношением

$$\begin{aligned} \Delta E_v = A \operatorname{Sp} \varepsilon_{ij} \pm \left(0,5B^2 [(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})^2 + (\varepsilon_{22} - \varepsilon_{33})^2 + \right. \\ \left. + (\varepsilon_{33} - \varepsilon_{11})^2 + d^2(\varepsilon_{12}^2 + \varepsilon_{23}^2 + \varepsilon_{13}^2)] \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (82)$$

Знаки "±" отвечают расщеплению исходно вырожденных зон легких и тяжелых дырок валентной зоны кубических кристаллов. Значения констант деформационного потенциала взяты из [39, 40]. Для германия $A = -4$ эВ, $B = -2,7$ эВ, $d = 5$ эВ, $\nu = 0,2$.

Расчет линий постоянной энергии приведен на рис. 13б, 14. При этом из расчета исключалась область $r \leq 2\mathbf{b}$, в которой континуальные определения ε_{ij} (80) имеют расходящийся вид. Учитывая, что размер ядра дислокации $r_0 = 3 \div 5\mathbf{b}$, расчет по формулам (80)–(82), по-видимому, имеет смысл при $r > r_0$. На рис. 13б показана структура изолиний, рассчитанных по (82) для отдельной дислокации в германии. Очевидно, что область, отвечающая повышенной плотности дырок, занимает сектор с раствором 286° , что заметно больше, чем в гидростатическом приближении (рис. 13а). При этом для $\Delta E_v > 0$ площадь, ограниченная изолинией, определяемой формулой (82), в 10 раз превышает соответствующую площадь в гидростатическом приближении.

В заключение остановимся на результатах, представленных на рис. 14. Здесь изображена структура изолиний валентной зоны германия, искаженной полем упру-

гих напряжений границы бикристалла, состоящей из одного ряда 90-градусных дислокаций. Расчет проводился по формуле (82) для знака $\langle\langle + \rangle\rangle$ и значений тензора относительных деформаций, приведенных в [39,

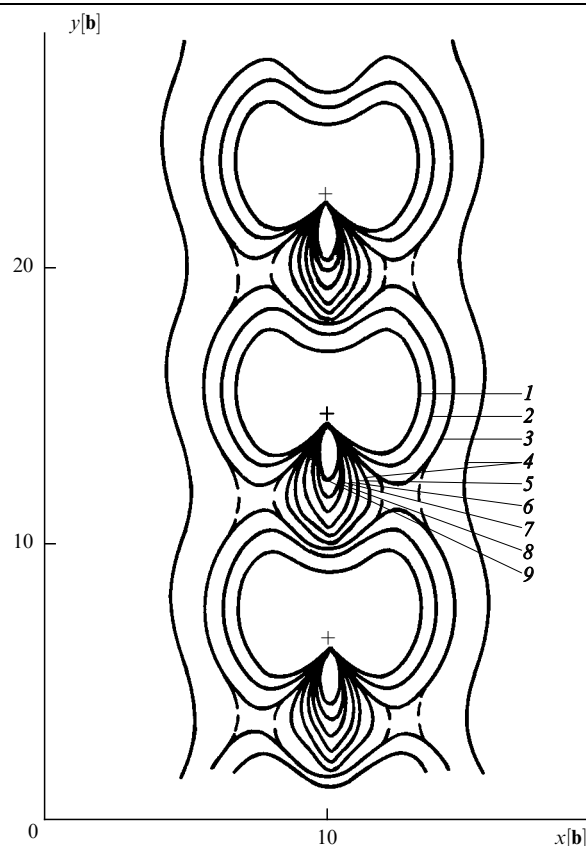


Рис. 14. Изолинии деформационного потенциала валентной зоны германия, определяемые полем упругих напряжений границы бикристалла, состоящей из одного ряда 90-градусных дислокаций (нумерация линий идентична рис. 13, направление дислокационной линии — вдоль 100, направление вектора Бюргерса — вдоль 011)

40]. При уменьшении расстояния D между дислокациями сначала возникает пара изолиний 4 с минимальной положительной энергией (0,025 эВ в нашем случае), вне которых наблюдается экспоненциальный спад искажений валентной зоны. Изолиния $\Delta E_v = 0$, в случае отдельной дислокации, простиравшаяся в бесконечность, сворачивается в замкнутую линию (линии 5 на рис. 14), локализованную между дислокациями, сжимая изолинии с отрицательными энергиями (линии 6–9). Сплошными линиями показано решение при $D = 8b$. При $D = 7b$ изолинии 0,05 эВ трансформируются по схеме, показанной штриховыми линиями, и возникает дополнительная пара изолиний. При $D = 5b$ аналогичную трансформацию претерпевают изолинии 0,075 эВ. Изолинии 0,7 эВ, соответствующие глубине залегания дислокационного уровня относительно потолка невозмущенной валентной зоны, трансформируются в пару бесконечно простирающихся изолиний при $D = 5,5b$, что по формуле (78) соответствует углу разориентации бикристалла 10° . Экспериментальные исследования [34] показали, что металлическая проводимость границы бикристалла германия появляется при $\vartheta \geq 8^\circ$. Это свидетельствует в пользу применимости предлагаемой модели металлической проводимости по состояниям деформационного потенциала дислокаций.

3.4. Инверсия типа проводимости в пластически деформированных полупроводниках n-типа

Учитывая акцепторное действие дислокаций в германии и кремнии, разные проявления которого обсуждались выше, можно считать, что монотонное увеличение плотности дислокаций в полупроводнике n-типа должно приводить к инверсии типа проводимости данного полупроводника, как это имеет место при варьировании плотности точечных акцепторов в полупроводнике n-типа [11]. Однако детали этого перехода в функции от относительной плотности акцепторов n_a^0/n_d существенно различны для задач о точечных дефектах и в дислокациях. Здесь n_a^0 и n_d соответствуют плотности точечных акцепторов и доноров. Некоторые качественно интересные фрагменты этих исследований обсуждаются ниже, следуя [41]. Вопрос о структуре инверсионного перехода интересен также с точки зрения апробации феноменологической модели дислокационных уровней, хорошо зарекомендовавшей себя при описании пластически деформированных проводников p-типа [31, 32].

Конкретные результаты связаны с описанием поведения уровня Ферми в пластически деформированных полупроводниках в функции от плотности дислокаций N_d при достаточно низких температурах. Соответствующее поведение химического потенциала F в образцах с точечными примесями считается известным [11]. Грубо говоря (если задача симметрична по отношению к электронам и дыркам), зависимость $F(n_a^0/n_d)$ имеет вид ступеньки с центром в точке $n_a^0 = n_d$ и шириной Δ порядка

$$\Delta \approx \frac{T}{E_g}, \quad (83)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны.

Описание поведения химического потенциала F в пластически деформированном полупроводнике n-типа естественно начать с области малых плотностей дисло-

каций N_d , когда

$$R^2 \leq N_d^{-1}. \quad (84)$$

Здесь R имеет смысл радиуса ридовского цилиндра вокруг отдельной заряженной дислокации. В геометрическом приближении $R \gg r_D$ (где r_D — дебаевский радиус экранировки, отвечающий плотности n_d точечных доноров) ридовский радиус определяет длину, на которой экранируется поле заряженной дислокации.

В условиях (84) эффективное уравнение нейтральности, определяющее, как обычно, поведение химического потенциала, должно быть записано так:

$$N_c \exp\left(\frac{F}{T}\right) \left(1 - \frac{V^*}{V}\right) + \frac{N_d f}{a} = n_d, \\ N_c = \frac{2}{\hbar^3} \left(\frac{m_e T}{2\pi}\right)^{3/2}, \quad (85)$$

где V , V^* — полный объем кристалла и объем, приходящийся на ридовские цилиндры, m_e — эффективная масса электрона. В первом слагаемом левой части (85) учтено вытеснение электронов из ридовских цилиндров, второе слагаемое определяет вклад в плотность отрицательных зарядов от заряженных дислокаций, каждая из которых имеет коэффициент заполнения f , связь которого с V^* дается выражением (85). В правой части (85) мы имеем плотность доноров, которые полагаются ионизированными.

Учитывая связь между f и V^*/V :

$$\frac{V^*}{V} = \frac{N_a f}{an_d}, \quad (85a)$$

получаем, что определение F (85) сводится к его определению в отсутствие дислокаций [11]:

$$N_c \exp \frac{F}{T} = n_d. \quad (86)$$

Другими словами, дислокации не влияют на поведение F , пока $R^2 < N_d^{-1}$.

Таким образом, с точки зрения поведения химического потенциала в функции от параметра n_a/n_d ничего особенного в области $n_a/n_d \approx 1$ задача о дислокационной инверсии типа проводимости не содержит (в отличие от задачи с точечными центрами, где область $n_a^0/n_d \approx 1$ является критической). В самом деле, неравенство (84) с учетом $\pi R^2 n_d = f/a$ может быть переписано так:

$$R^2 N_d = \frac{f}{\pi} \frac{n_a}{n_d} < 1, \quad n_a = \frac{N_d}{a}. \quad (87)$$

Учитывая, что максимальное значение f для n-германия и кремния не превышает $f \approx 10^{-1}$, видим, что в области $n_a/n_d \approx 1$ исходный полупроводник n-типа остается таковым с хорошим запасом, поскольку неравенство (87) здесь еще не нарушено.

В условиях, обратных (87) (область $R^2 N_d > 1$), дислокации в состоянии "собрать" все электроны с доноров, и поэтому положение химического потенциала становится зависимым от плотности дислокаций. Этот эффект описан нами, следуя [41], в цилиндрической модели, которая трактует качественно правильно основные свойства инверсии, за исключением критической зависимости N_d^0 плотности дислокаций, начиная с которой вступает в

силу приближение $R^2 N_d \geq 1$. Величина N_d^0 зависит от деталей распределения дислокаций в образце и может варьироваться в определенных пределах параметра $R^2 N_d$, описываемых численным фактором ~ 1 .

В рамках простой цилиндрической модели коэффициент заполнения отдельной дислокации f , как и выше (см. (85a)), связан с эффективным радиусом R , характеризующим среднее расстояние между дислокациями, соотношением

$$\pi R^2 n_d = \frac{f}{a}. \quad (88)$$

В отсутствие свободных электронов и дырок, плотность которых мы полагаем экспоненциально малой (это приближение особенно удобно для кремния), соотношение (88) является условием, обеспечивающим полную нейтральность кристалла.

Что касается положения химического потенциала, то оно следует из определения величины f :

$$f = C_1 \left[\exp \left(\frac{+E_1 + V_C - F}{T} \right) + 1 \right]^{-1} + C_2 \left[\exp \left(\frac{+E_2 + V_C - F}{T} \right) + 1 \right]^{-1}, \quad (89)$$

$$V_C = \frac{2\pi e^2}{\epsilon} n_d R^2 \left\{ 2 \ln(\pi R^3 n_d) - [1 - (\pi^2 R^6 n_d^2)^{-1}] \right\}. \quad (89a)$$

При записи (89) учтена структура дислокационных уровней, следующая из обработки данных о поведении дислокаций в полупроводниках n-типа. Кроме того, в явном виде использованы достоинства цилиндрической модели, приводящей к достаточно простому виду для V_C (89a).

Критическое значение R_0 , начиная с которого определения (89) имеют смысл, возникает из требования, что при $R = R_0$ химический потенциал F должен занимать положение, характерное для полупроводника n-типа при $T = 0$ в отсутствие дислокаций, т.е.

$$F = E_g. \quad (90)$$

В результате определение R_0 выглядит так:

$$\pi R_0^2 n_d a = C_1 \left[\exp \left(\frac{E_1 + V_C(R_0) - E_g}{T} \right) + 1 \right]^{-1} + C_2 \left[\exp \left(\frac{E_2 + V_C(R_0) - E_g}{T} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (91)$$

Поведение F в области $R < R_0$ для значений $E_1 = 0,42$ эВ, $E_2 = 0,62$ эВ, $C_2 = 1$ и разных C_1 представлено на рис. 15. Несколько деталей этого рисунка заслуживают специального внимания. Во-первых, химический потенциал F начинает "погружаться" в глубь запрещенной зоны плавно, а не скачком, как это имеет место для точечных примесей. При этом пересечение в точке $R = R_C$ уровня

$$F = 0,5 E_g, \quad (92)$$

что формально отвечает инверсии типа проводимости, никак не выделено. Во-вторых, интересны детали "прохождения" химическим потенциалом уровня E_2 . Возникающий здесь скачок ΔF имеет масштаб

$$\Delta F \approx -E_2 + E_1 \quad (93)$$

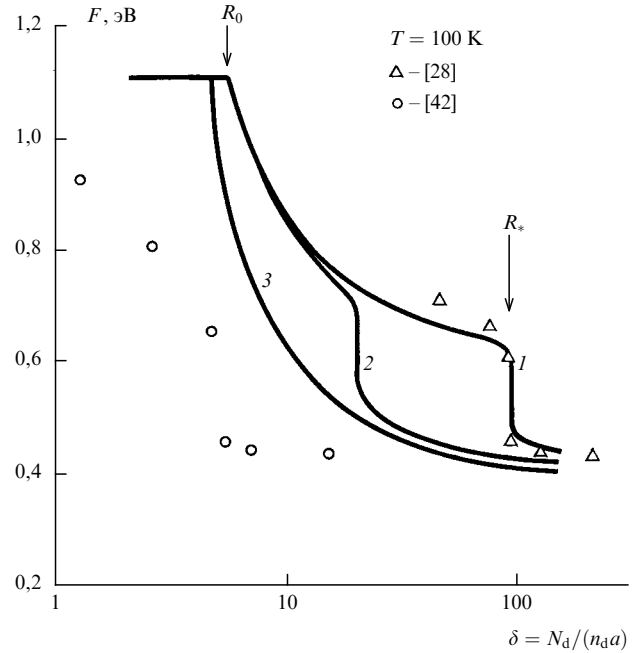


Рис. 15. Зависимость химического потенциала F от безразмерной плотности дислокаций $\delta = N_d/(n_d a)$ для трех значений параметра C_1 : 1 — $C_1 = 0,01$; 2 — $C_1 = 0,06$; 3 — $C_1 = 0,2$. Для кривых 1, 3 константы C_1 выбирались так, чтобы расчетные положения скачков $F(\delta)$ совпадали с экспериментом; кривая 2 имеет промежуточное значение $C_1 = 0,06$

и положение R_* , следующее из оценки

$$(\pi R_*^2 n_d a)^{-1} \approx C_1. \quad (94)$$

Численное определение величины R_* с помощью (89) для разных значений C_1 подтверждает зависимость $R_*^{-2} \sim C_1$ с коэффициентом пропорциональности из (94). Таким образом, в модели двух уровней с ограниченной емкостью C_1 зависимость $F(\delta)$ ($\delta = N_d/(n_d a)$) при дислокационной инверсии проводимости содержит характерный скачок, положение которого зависит от величины емкости C_1 .

Полученные результаты могут быть привлечены к анализу экспериментальных данных [28, 42] о дислокационной инверсии проводимости в кремнии. В обеих работах исходный кремний, легированный в качестве доноров фосфором с примерно одной и той же плотностью ($n_d = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ в [28] и $n_d = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ в [42]) менял тип проводимости (что фиксировалось изменением знака константы Холла) при монотонном увеличении плотности дислокаций. В обеих работах наблюдается скачок химического потенциала при переходе через середину запрещенной зоны. Однако положения этого скачка δ^* на оси δ в [28] и [42] существенно различны, что хорошо видно на рис. 15. Отметим для дальнейшего, что в областях правее скачка, т.е. в областях $\delta > \delta^*$ данные [28] и [42] для $F(\delta)$ практически не обнаруживают дисперсии. Другими словами, в этих областях химический потенциал фиксируется примерно на одной высоте $E_1 \approx 0,42$ эВ над валентной зоной.

Положение экспериментальных точек [42] на рис. 15 указывает на неприменимость для их описания цилиндрической модели инверсионного перехода, развитой выше. В самом деле, согласно [42], химический потенциал начинает существенно зависеть от δ в области, где

он должен сохранять свое значение, не зависящее от плотности дислокаций. Более того, как отмечалось авторами [42], нужно ставить под сомнение не только цилиндрическую модель инверсионного перехода, но и саму идею Рида о локализации дислокационных зарядов в узкой трубке радиусом $C = a/f \ll R$. С использованием модели Рида и данных [42] кулоновская энергия в области $R > R_0$ превосходит ширину запрещенной зоны E_g , чего не может быть. Попытки найти выход из положения привели авторов [42] к необходимости рассмотрения альтернативной модели, в которой дислокационный заряд "размазан" практически внутри всего ридовского цилиндра [43].

Обратим, однако, внимание на одну экспериментальную деталь, мало чувствительную к модели обработки экспериментальных данных и практически одинаковую для обеих серий экспериментов [28, 42]. Как отмечено выше, дисперсия $F(\delta)$ в области $\delta > \delta^*$ практически отсутствует. Такое поведение $F(\delta)$ объясняется цилиндрической моделью инверсии типа проводимости в предельном случае $C_1 \ll 1$. Если же C_1 находится в области $C_1 \approx 0,2$, там, где расположен скачок F из [42] то, согласно рис. 15, неизбежна сильная дисперсия $F(\delta)$, чего не наблюдается экспериментально.

Таким образом, отсутствие заметной дисперсии $F(\delta)$ в области $\delta > \delta^*$ для экспериментов [42] свидетельствует с нашей точки зрения о том, что реальное значение C_1 находится в области $C_1 \ll 1$. Другими словами, плотности дислокаций из [42], найденные по ямкам травления, несколько занижены по сравнению с реальными. Возможно, что в [28], напротив, плотности дислокаций завышены (здесь использовалась методика электронного парамагнитного резонанса (ЭПР)). Поэтому точное значение емкости C_1 , имеющее масштаб $C_1 = 0,01$ (см. рис. 15 кривая 1), в последующих экспериментах может быть уточнено. Ясно лишь, что эта константа C_1 должна быть достаточно малой ($C_1 \ll 0,1$).

3.5. Инверсия проводимости в германии

В экспериментах с германием нет подробной информации о прохождении химическим потенциалом окрестности его скачка, зато детально исследованы окрестности участка в районе $R < R_*$ и $R \leq R_0$.

Для количественного описания окрестности скачка ΔF и поведения эффективной плотности дырок $n_p(T)$ следует учитывать влияние дырок, роль которых здесь достаточно заметна, особенно с повышением температуры. Кроме того, плотность $n_p(T)$ является наблюдаемой величиной, позволяющей следить за развитием инверсии в р-области.

Конечная плотность дырок модифицирует в расчете поведения F соотношение (88), которое теперь приобретает вид:

$$\pi R^2 n_d + 2\pi \int_{r_0}^R n_p(r) r dr = \frac{f}{a}, \quad (95)$$

$$n_p(r) = n_p^0 \exp \frac{e\varphi}{T},$$

$$\Delta\varphi = 4\pi e \varepsilon^{-1} [n_d + n_p(r)], \quad (96)$$

$$\varphi'|_{r=R} = 0, \quad \varphi|_{r=R} = 0. \quad (97)$$

Здесь $n_p(r)$ — плотность дырок в окрестности дислокации, ε — диэлектрическая постоянная полупроводника.

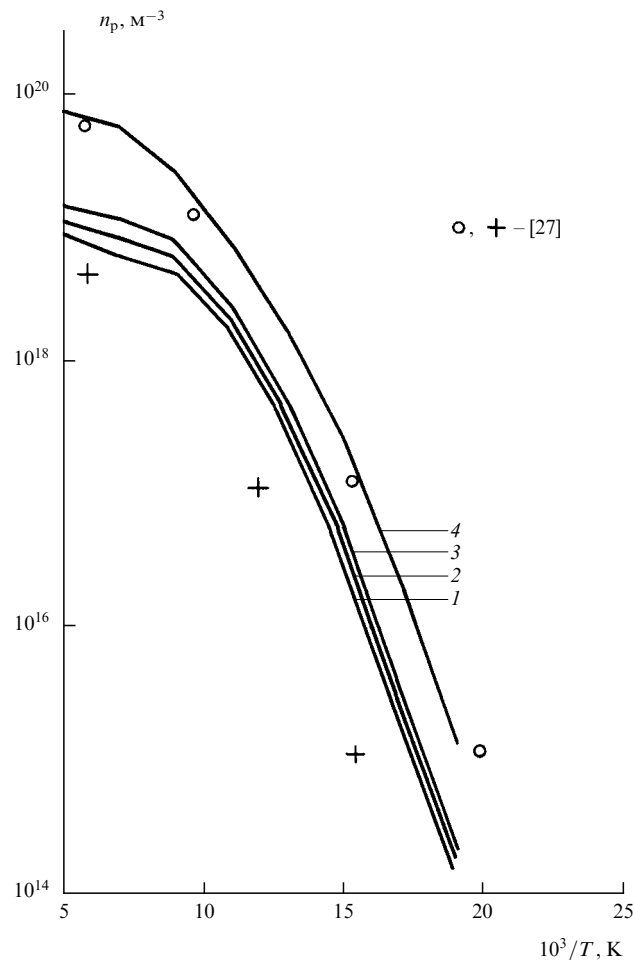


Рис. 16. Плотность дырок в пластически деформированном п-германии для модели с двумя электронными уровнями. Параметры расчета $E_1 = 0,11$ эВ; $C_1 = 0,1$, $E_2 = 0,28$ эВ, $n_d = 5 \cdot 10^{11}$ см⁻³. Плотности дислокаций N_d , соответственно: 1 — $5 \cdot 10^6$; 2 — $4 \cdot 10^6$; 3 — $5,5 \cdot 10^6$; 4 — $3 \cdot 10^7$ см⁻². Параметры спектра подбирались для наилучшего совпадения с кривой 4 экспериментальных данных (o) из [27] (расчет [44])

Граничные условия (97) для электропотенциала $\varphi(r)$ обеспечиваются в пренебрежении вкладом свободных электронов в общую нейтральность кристалла.

Расчитанные в [44] с помощью (89), (95)–(97) значения $n_p(R)$ приведены на рис. 16 вместе с экспериментальными данными [27].

Интересен также рис. 9 из [24], где присутствует сразу несколько заслуживающих внимания эффектов.

Во-первых, четко видна вилка в температурной зависимости $\sigma_{||}(T)$ и $\sigma_{\perp}(T)$. Наличие этой вилки обсуждалось выше в комментариях к формуле (54).

Во-вторых, в случае германия удается наблюдать постепенное "погружение" химического потенциала в нижнюю часть запрещенной зоны (левые части кривых 2–4). Напомним, что для кремния эта часть в температурной зависимости химического потенциала пока не промерена (см. рис. 15, где верхняя часть зависимости $F(N_d)$ практически не представлена экспериментальными точками).

В-третьих, можно убедиться в том, что в области $T < T_0$ для поперечного движения возникает дополнительный потенциальный барьер, высота которого плавно растет с увеличением плотности дислокаций.

4. Вольт-амперная характеристика образца с заряженными дислокациями

Одной из причин возникновения потенциальных барьеров, препятствующих прохождению электрического тока в полупроводниках, является система ориентированных дислокаций достаточной плотности. Речь идет, например, о малоугловых границах зерен или границах бикристалла [34–36, 45], когда ридовские цилиндры соседних заряженных дислокаций перекрываются между собой. Другой вариант дислокационного барьера имеет место в задаче об электростатических свойствах полупроводника с набором заряженных дислокаций, ориентированных лишь в одном направлении. Возможность создания набора заряженных дислокаций такого типа продемонстрирована в ряде экспериментов [24, 46]. Степень ориентации дислокаций достигает в этих работах значений 1:10. Очевидно, что с ростом плотности дислокаций либо при уменьшении температуры ридовские цилиндры соседних дислокаций, перекрываясь между собой, образуют бесконечный кластер, рассекающий весь образец. Неизбежность возникновения такого кластера следует из общих положений современной теории протекания [47]. С интересующей нас точки зрения кластер есть барьер дислокационного происхождения, существенно влияющий при его возникновении на электрические свойства полупроводника.

Заметим теперь, что дислокационные барьеры обладают характерной особенностью — седловыми точками, через которые, в основном, протекает ток свободных электронов, преодолевающих барьер. В связи с этим возникает необходимость построения специальной теории ВАХ для тока через барьер с дислокациями.

В данном разделе предложен общий формализм, позволяющий описывать в диффузионном приближении свойства барьеров с произвольно глубокими седловыми точками, получены в омическом режиме ВАХ и ВФХ (вольт-фарадная характеристика) для дислокационного барьера в предельных случаях сильного или слабого перекрытия ридовских цилиндров, обсуждается роль случайных флуктуаций формы барьера.

4.1. ВАХ для барьера с седловыми точками

Вычисление ВАХ при прохождении тока через потенциальный барьер сводится к решению уравнения неразрывности $\text{div } j = 0$ в окрестности барьера с определенными граничными условиями на его берегах, учитывающими наличие внешней разности потенциалов. Эта программа, детально разработанная для одномерных барьеров, может быть реализована и в случае барьеров с седловыми точками.

4.1.1. Пусть для определенности заряженные дислокации расположены периодически с периодом d вдоль оси y . Ось x нормальна к плоскости барьера. Плотность тока в диффузионном приближении определена известным образом:

$$j_1 = - \sum \mu_{ik} \left(T \frac{\partial n}{\partial x_k} + en \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right), \quad (98)$$

где μ_{ik} — элементы матрицы

$$\mu_{ik} = \mu \delta_{ik}, \quad i = 1, 2; \quad k = 1, 2, \quad (99)$$

$x_1 \equiv x$, $x_2 \equiv y$, барьер вытянут вдоль оси y , μ — подвижность электронов, T — температура, n — плотность электронов, φ — электростатический потенциал.

Решение уравнения $\text{div } j = 0$ с j из (98) в окрестности седловой точки удобно искать, следуя рекомендациям Лангера [48]. Разложим в связи с этим потенциал $\varphi(x, y)$ вблизи седла в ряд Тейлора:

$$\varphi(x, y) \approx \varphi_s + 0,5(\lambda_2 y^2 - \lambda_1 x^2), \quad \lambda_i = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} \Big|_{x_i \rightarrow x_s}, \quad (100)$$

где φ_s и λ_i — потенциал и его кривизны в седловой точке.

Факторизация потенциала $\varphi(x, y)$, как следует из рассуждений [48], сопровождается обращением в нуль y -компоненты полного тока, так что зависимость от координаты y электронной плотности имеет равновесный (больцмановский) вид

$$n(x, y) = \sigma(x) \exp \left[-\frac{e\varphi(x, y)}{T} \right], \quad (101)$$

где $\sigma(x)$ — произвольная функция x . Что касается x -компоненты тока, то с учетом $n(x, y)$ (101) имеем из (98)

$$j_x(y) = -\mu T \frac{\partial \sigma}{\partial x} \exp \left(-\frac{e\varphi_s + 0,5e\lambda_2 y^2}{T} \right) \quad (102)$$

при условии, что

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \frac{j_0}{\mu T} \exp \left(-\frac{e\lambda_1 x^2}{2T} \right) \quad (103)$$

или

$$\sigma(x) = -\frac{j_0}{\mu T} \int_{-\infty}^x \exp \left(-\frac{e\lambda_1 x^2}{2T} \right) dx + C. \quad (103a)$$

Для определения констант j_0 и C в формуле (103a) следует воспользоваться граничными условиями для $n(x, y)$ на берегах барьера. При этом полагается, что вдали от седла потенциал $\varphi(x, y)$ становится одномерным (зависящим лишь от координаты x). Другими словами,

$$\begin{aligned} n &= n_d, & \varphi &= 0 \quad \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ n &= n_d, & \varphi &= -V \quad \text{при } x \rightarrow +\infty, \end{aligned} \quad (104)$$

где n_d — плотность доноров, V — внешний потенциал на барьере. Учитывая определения n (101), $\sigma(x)$ (103a) и условия (104), имеем

$$C = n_d, \quad j_0 = \mu T n_d \left[1 - \exp \left(-\frac{eV}{T} \right) \right] \left(\frac{\lambda_1}{2\pi T} \right)^{1/2}. \quad (105)$$

Средний ток на один период дислокационной цепочки равен [49, 50]

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{1}{D} \int_{-\infty}^{+\infty} j_x(y) dy = \\ &= \mu T n_d d^{-1} \left(1 - \exp \left(-\frac{eV}{T} \right) \right) \exp \left(-\frac{e\varphi_s}{T} \right) \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{1/2} \approx \\ &\approx |eV < T| \approx \frac{e\mu n_d V}{D} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{e\varphi_s}{T} \right), \end{aligned} \quad (106)$$

где $j_x(y)$ см. в (102). Таким образом, вопрос о вычислении проводимости барьера свелся к определению величин φ_s , λ_i . Если задача содержит разброс по величинам D и φ_s , то выражение (106) должно быть усреднено по возможным значениям D и φ_s с соответствующими весами. Подробнее эта задача обсуждается ниже.

4.1.2. Результаты, изложенные выше, достаточно строги в области $(e\varphi_{\max} - e\varphi_s)/T \gg 1$. В случае, если же $(e\varphi_{\max} - e\varphi_s)/T < 1$, приближение Лангера, в частности, разложение $\varphi(x, y)$ вида (100) теряет свою точность, что затрудняет исследование предельного перехода к определению ВАХ для одномерного барьера. В связи с этим имеет смысл обсудить еще один вариант решения задачи о ВАХ для дислокационного барьера в условиях $(e\varphi_{\max} - e\varphi_s)/T < 1$.

Предположим, что дислокации расположены вдоль вершины барьера периодически с периодом D . Разложим в связи с этим все интересующие нас функции в ряды Фурье:

$$\begin{aligned} n(x, y) &= \sum n_k(x) \cos(k\omega y), & y &= \sum y_k \cos(k\omega y), \\ j_x &= - \sum j_{xk}(x) \cos(k\omega y), & j_y &= - \sum j_{yk}(x) \sin(k\omega y), \\ \omega &= \frac{2\pi}{D} \end{aligned} \quad (107)$$

и попробуем удовлетворить уравнению $\text{div } \mathbf{j} = 0$ приближенно, производя расщепление гармоник в нелинейном слагаемом $n(\partial\varphi/\partial x_k)$ общего выражения для плотности тока (98).

Нулевое приближение:

$$\frac{\partial j_{x0}}{\partial x} = 0$$

или

$$j_{x0} = \text{const} = -T\mu'_0 - e\mu(n_0\varphi'_0 + 0, 5n_1\varphi'_1), \quad n' = \frac{dn}{dx}. \quad (108)$$

Вклад более высоких гармоник в нулевое приближение опущен. Влияние периодического рельефа барьера связано с наличием в (108) слагаемого, соответствующего $n_1\varphi_1$.

Первое приближение:

$$\frac{\partial j_{x1}}{\partial x} + \frac{\partial j_{y1}}{\partial y} = 0, \quad (109)$$

$$\varphi_1'' - \omega^2\varphi_1 = -\frac{4\pi en_{s1}}{\varepsilon}, \quad (110)$$

$$\varphi_1|_{\pm\infty} \rightarrow 0, \quad \varphi_1'|_{x \rightarrow +0} - \varphi_1'|_{x \rightarrow -0} = -\frac{4\pi en_{s1}}{\varepsilon}.$$

Здесь n_{s1} — фурье-компонента поверхностной плотности зарядов

$$n_s(y) = \sum n_{sk} \cos(k\omega y). \quad (111)$$

Нулевые граничные условия для φ_1 на больших расстояниях верны, пока $L \gg d$, что предполагается выполненным.

Уравнение (109), записанное в явном виде с точностью до слагаемых порядка n_{s1} и φ_1 , выглядит так:

$$\begin{aligned} -Tn_1''(x) - en_{s1}'\varphi_0' - en_{s1}\varphi_0'' - en_0'\varphi_1' - \\ - en_0\varphi_1'' + \omega^2(Tn_{s1} + en_0\varphi_1) = 0, \end{aligned} \quad (112)$$

$$n_{s1}|_{x \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0, \quad n_{s1}|_{x=0} = \frac{e\varphi_1}{T} n_0|_{x=0}. \quad (113)$$

Последнее из граничных условий (113) эквивалентно требованию $j_{y1}(0, y) = 0$, которое должно выполняться на вершине барьера.

Отметим, что в отсутствие полного тока через барьер условие $j_{y1} = 0$ имеет место тождественно и сводится к требованию для всех x

$$n_{s1}(x) = \frac{e\varphi_1(x)}{T} n_0(x). \quad (114)$$

Обращается в нуль и величина j_{x1} , причем равенство $j_{x1} = 0$ следует автоматически, если выполнены соотношения (108)–(112).

Опуская детали решения системы (107)–(114), имеем в первом приближении для ВАХ:

$$j_{x0} = \frac{e\mu n_d V}{\int_{-L}^{+L} \exp(e\varphi_0(x)/T - e^2\varphi_1^2(x)/4T^2) dx}, \quad (115)$$

где

$$\varphi_1(x) = -\frac{2\pi en_{s1}}{e\omega} \exp(-\omega|x|). \quad (116)$$

В условиях $\varphi_1 \rightarrow 0$ результат (115) переходит в известное выражение для ВАХ одномерного барьера.

4.2. Параметры седловых точек

Вычисление параметров седловых точек дислокационного барьера является довольно сложной самостоятельной задачей. Ситуация упрощается в предельных случаях сильного ($D \ll R$) либо слабого ($D \leq R$) перекрытия ридовских цилиндров радиусом R , когда соответствующие аналитические выкладки можно довести до конца. Рассмотрим каждый из этих предельных случаев по отдельности.

4.2.1. Сильное перекрытие. Опуская детали вычислений [49, 50], приведем здесь лишь сводку основных результатов:

$$\begin{aligned} \varphi(x, y) &= 2\pi L^2 en_d \varepsilon^{-1} \left(1 - \frac{|x|}{L} \right)^2 - \frac{x}{2L} + \\ &+ 2den_d L \varepsilon^{-1} \left(\frac{2\pi|x|}{D} - \ln \left[2 \left(\cosh \frac{2\pi x}{D} - \cos \frac{2\pi y}{D} \right) \right] \right), \\ L &= \frac{n_s}{2n_d}, \quad n_s = \frac{f}{Da}. \end{aligned} \quad (117)$$

Здесь ε — диэлектрическая проницаемость кристалла, n_d — плотность объемных доноров, f — коэффициент заполнения отдельной дислокации, a — межатомное расстояние.

Значение φ в характерных точках

$$\varphi_s = \varphi_0 \left(1 - \frac{2D}{L} \ln(2) \right), \quad (118)$$

$$\varphi_{\max} = \varphi_0 \left(1 + \frac{2D}{L} \ln \frac{D}{2\pi c} \right), \quad (118a)$$

$$\varphi_0 = 2\pi en_d L^2 \varepsilon^{-1}, \quad c = \frac{a}{f}, \quad \frac{D}{2\pi c} \gg 1.$$

Величины φ_s , φ_{\max} , φ_0 фигурируют в определении существенных характеристик барьера. Так, значение φ_s входит в экспоненту ВАХ. Потенциал φ_{\max} необходим для

расчета коэффициента заполнения f заряженной дислокации в барьере, определяемого из соотношения

$$-E_d + V_C = F,$$

где $V_C = e\varphi_{\max}$ — кулоновская энергия электрона на дислокации, E_d — положение дислокационного уровня, F — уровень Ферми. Наконец, потенциал φ_0 входит в определение емкости барьера C :

$$C = \frac{Q}{\varphi_0} = \frac{\varepsilon S}{2\pi L}, \quad (119)$$

где S — площадь контакта, Q — полный заряд.

Полезно отметить, что для одномерного барьера все три характеристики φ_s , φ_{\max} , φ_0 совпадают. В самом деле, если в (118) перейти к пределу $(D/L) \rightarrow 0$, то получим, что $\varphi_s = \varphi_{\max} = \varphi_0$.

4.2.2. Слабое перекрытие. Грубое представление о свойствах седловой точки двух слабо перекрывающихся ридовских цилиндров можно получить, используя простую геометрическую картину (рис. 17) с параметрами задачи, отвечающими одиночным ридовским цилиндрам. Пусть величина h имеет смысл глубины перекрытия. Хорда $2b_0$, вдоль которой происходит контакт двух цилиндров, связана с h соотношением

$$b_0 \approx (2Rh)^{1/2}, \quad R \gg b_0 \gg h \gg r_D, \quad (120)$$

где R — радиус ридовского цилиндра, $\pi R^2 n_d = f/a$.

Распределение потенциала φ в зоне контакта можно получить, комбинируя два цилиндрически-симметричных решения для потенциала одиночной заряженной дислокации $\varphi_0(x, y)$, перекрывающиеся между собой на величину h :

$$\tilde{\varphi}(x, y) = \varphi_0(x, y + R - h) + \varphi_0(x, y - R + h), \quad (121)$$

$$\varphi_0(x, y) = \frac{ef}{\varepsilon a} \left[2 \ln \frac{R}{(x^2 + y^2)^{1/2}} - \left(1 - \frac{x^2 + y^2}{R^2} \right) \right]. \quad (121a)$$

Седло имеет координаты $x = y = 0$. При этом

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_s &= \frac{4\pi en_d h^2}{\varepsilon}, & \tilde{\varphi}_x'' &= -\frac{8\pi en_d h}{\varepsilon R}, \\ \tilde{\varphi}_y'' &= 8\pi en_d \frac{1 + h/R}{\varepsilon}. \end{aligned} \quad (122)$$

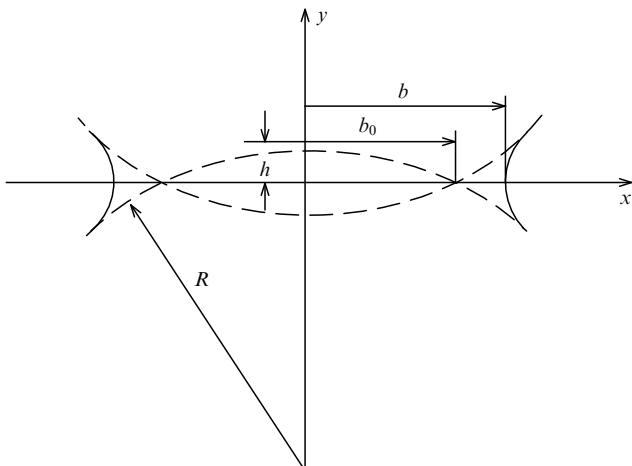


Рис. 17. Контакт двух ридовских цилиндров при их слабом перекрытии. Сплошные линии — реальная граница ридовских цилиндров

Следует, однако, отметить, что результат $\tilde{\varphi}_s$ (122) не является окончательным. Дело в том, что при возникновении перекрытия между ридовскими цилиндрами сегменты этих цилиндров, расположенные в зоне контакта, не имеют свободных электронов и поэтому не участвуют в нейтрализации полей заряженных дислокационных линий. Возникший дефицит в свободных электронах должен компенсироваться за счет областей, лежащих вне пределов контакта, не имеющих свободных электронов и поэтому не участвующих в нейтрализации полей заряженных дислокационных линий. Чтобы учесть это обстоятельство в рамках используемого приближения суперпозиции двух цилиндрически симметричных решений (121), надо разместить в зоне контакта дополнительный заряд σ_- и соответствующий заряд σ_+ за пределами контакта. Очевидно, что этот заряд σ_+ должен быть максимально близок к зоне контакта.

Полагая, что дополнительные заряды являются поверхностными, имеем

$$\sigma(x) = \sigma \left(1 - \frac{x^2}{b_0^2} \right), \quad \sigma = en_d h < 0, \quad (123)$$

$$\sigma(x) = \begin{cases} < 0, & 0 \leq x \leq b_0, \\ > 0, & b_0 \leq x < b. \end{cases} \quad (123a)$$

Величина b определяется из условия

$$\int_{-b}^{+b} \sigma(y) dy = 0 \quad (124)$$

и оказывается равной

$$b = \sqrt{3} b_0. \quad (124a)$$

Значение гармонического потенциала $\varphi^{(1)}$, отвечающего распределению зарядов (123) и вычисленное в седловой точке, равно

$$\varphi_s^{(1)} = \frac{2b_0 b \sigma}{\varepsilon(b - b_0)} \ln \frac{b}{b_0} \simeq \frac{3,7\sigma}{\varepsilon} (hR)^{1/2}. \quad (125)$$

Таким образом, интересующий нас потенциал в седловой точке при слабом перекрытии ридовских цилиндров представляется в виде

$$\varphi_s = \frac{\sigma [4\pi h + 3,7(hR)^{1/2}]}{\varepsilon}. \quad (126)$$

Специального обсуждения заслуживает также вопрос о распределении потенциала в зоне контактов при наличии разности потенциалов между берегами барьера. Для выяснения качественных особенностей этой задачи сформулируем ее в явном виде

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= 0, \\ \psi(r, \vartheta) &= \begin{cases} V & \text{при } \alpha \leq \vartheta \leq \pi - \alpha, \\ -V & \text{при } \pi + \alpha \leq \vartheta \leq 2\pi - \alpha, \end{cases} \quad \alpha = \frac{b}{R}. \end{aligned} \quad (127)$$

Соответствующее распределение

$$\psi(r, \vartheta) = \frac{2V}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{2Rr \sin \vartheta}{R^2 - r^2}. \quad (128)$$

При получении (128) использовано соотношение

$$\sum A^{2n+1} \frac{\sin(2n+1)\vartheta}{2n+1} = 0, 5 \arctg \frac{2A \sin \vartheta}{1-A^2}. \quad (129)$$

Емкость

$$C = \frac{Q}{V} = D_3 D_2 V^{-1} \int \sigma(\vartheta) d\vartheta = \frac{\varepsilon D_2 D_3}{\pi R} \ln \frac{2R}{b}, \quad (130)$$

D_2, D_3 — размеры барьера в направлениях y и z .

Определение C (130) вместе с выражением для плотности тока j_x (106)

$$j_x = \frac{e \mu_n V}{D} \left(\frac{h}{R} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{e \varphi_s}{T} \right), \quad (131)$$

учитывающим явные результаты для φ_s и $(\lambda_1/\lambda_2)^{1/2}$ (126), (122), завершают программу по описанию свойств барьера со слабым перекрытием ридовских цилиндров ($D = R - h, h \ll R$).

4.3. Влияние случайных флуктуаций формы барьера

Рассмотрим ситуацию с глубокими седлами, когда в среднем $(e \varphi_{\max} - e \varphi_s)/T \gg 1$. В этом случае полная проводимость барьера складывается из проводимостей отдельных седловых точек (проводимость параллельно соединенных проводников):

$$I = \sum_c \langle j_x(h_c) \rangle. \quad (132)$$

Вводя вероятность $\omega(h_c)$ появления данной величины h_c и полагая эту вероятность гауссовой, перепишем определение (132) в следующем виде:

$$\langle j_x \rangle = \frac{I}{D_2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(\delta_e) j_x(h_e) d\delta_e, \quad (133)$$

где $\delta_e = D_e - D$, $h_e = h + \delta_e$, $\omega(\delta_e) = \sqrt{2/\pi} \Delta^{-1} \times \exp(-\delta_e^2/2\Delta^2)$, Δ — дисперсия распределения δ_e , $j_x(h_e)$ из (131), (126). Полагая теперь $\delta \ll D$, $h \ll D$, имеем из (133):

$$\begin{aligned} \langle j_x \rangle &= j_x(\bar{h}) \sqrt{\frac{2}{\pi}} \Delta^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{\delta_e^2}{2\Delta^2} - p \delta_e \right) d\delta_e = \\ &= j_x(h) \exp(0, 5 p^2 \Delta^2), \quad p = \frac{3, 7 e^2 n_d}{\varepsilon T} \frac{3}{2} \sqrt{hD}. \end{aligned} \quad (134)$$

Таким образом, флуктуации формы барьера, характеризующие дисперсией Δ , приводят к появлению дополнительного экспоненциального фактора в определении $\langle j_x \rangle$, что дает возможность достаточно просто обнаружить влияние флуктуаций на ВАХ.

Заканчивая теоретическое введение, имеет смысл обсудить экспериментальную схему изучения барьеров с возможными седловыми точками. Для комплексности этих исследований необходимо наличие зависимости ВАХ и ВФХ от температуры и разности потенциалов V , приложенной к берегам барьера.

Первый качественный вопрос — является барьер квантовым или классическим — решается обработкой температурной зависимости ВАХ в координатах $\ln(j)$, T^{-1} . Спрямление ВАХ в этих координатах указывает на

активационное поведение тока, т.е. на его классичность, и позволяет определить энергию активации барьера.

Сравнение высот барьера, следующих из температурной зависимости ВАХ и измерения ВФХ в омической области, должно давать ответ на вопрос, имеются ли на барьере седловые точки, или барьер одномерен. Для одномерного барьера (см. (118)) существует лишь одна характерная высота барьера. В ситуации с седловыми точками информация, следующая из измерений ВАХ и ВФХ, дает представление о качественно разных деталях изучаемого барьера. При этом надо иметь в виду, что емкость барьера в омической области не всегда определяется простым выражением (119).

Дополнительной характеристикой барьера с глубокими седловыми точками является поведение ВАХ в нелинейной по V области. Дело в том, что в случае одномерных барьеров ВАХ с ростом V имеет характерное плато, возникающее в связи с тем, что конечный ток через барьер увеличивает коэффициент заполнения связанных электронных состояний, формирующих высоту барьера, т.е. стимулирует рост барьера. Для барьеров с глубокими седловыми точками плотность тока сосредоточена, в основном, вдали от заряженных дислокаций. Об этом косвенно свидетельствует распределение возмущающего потенциала $\psi(r, \vartheta)$ (128), обращающееся в нуль на осях ридовских цилиндров (т.е. в точке $r = 0$). В результате ВАХ для барьера с глубокими седловыми точками не должна иметь ярко выраженного плоского участка, соединяющего омическую область и пробойный участок ВАХ.

Последняя интересная деталь — обнаружение флуктуаций формы дислокационного барьера. Этой цели можно достичь, обрабатывая омическую часть температурной зависимости ВАХ в координатах $\ln(j)$, T^{-1} . Согласно (134) в случае $\Delta \neq 0$ на плоскости $\ln(j)$, T^{-1} должны происходить заметные отклонения от линейности (в связи с наличием в показателе экспоненты слагаемых $\sim T^{-2}$).

Не все из перечисленных экспериментов реализованы к настоящему времени. Но имеющаяся часть достаточно хорошо иллюстрирует предсказания теории.

4.4. Эксперименты с дислокационными барьерами

4.1.1. В тех случаях, когда предполагаемая неоднородность барьера γ (возможное определение этого параметра дано формулой (135)) не очень велика, удобный способ ее обнаружения возникает при совместном изучении ВАХ и ВФХ барьера. В этом случае ВАХ дает информацию о высоте седловых точек V_{\min} барьера, а ВФХ характеризует его среднюю высоту \bar{V} . При наличии седловых точек $V_{\min} < \bar{V}$. Отношение

$$\frac{V_{\min}}{\bar{V}} = \gamma \leq 1 \quad (135)$$

может использоваться в качестве меры неоднородности барьера. В одномерном случае $\gamma \rightarrow 1$.

Следует отметить, что неравенство (135) является необходимым требованием, вытекающим из анализа свойств барьера с седловыми точками. Поэтому его выполнение характеризует в определенном смысле самосогласованность экспериментальных данных о ВАХ и ВФХ для данного барьера.

Обсудим [51] с этой точки зрения эксперименты [45], содержащие информацию о ВАХ и ВФХ специально

приготовленной дислокационной стенки, введенной в кремний *n*-типа с числом объемных доноров $n_d \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Среднее расстояние D между дислокациями в стенке меньше размеров L области экранирования дислокационного заряда свободными электронами, так что перекрытие соседних ридовских цилиндров, характеризующих экранирующие свойства среды в задаче об одной заряженной дислокации, достаточно велико и параметр γ из (135) должен быть близок к единице.

Для реализации намеченной программы (т.е. определения свойств параметра γ) достаточно, в принципе, информации о ВАХ и ВФХ в линейной по возмущающему потенциалу V области. Однако данные [45] обладают рядом особенностей, заставляющих усложнять процедуру их обработки. Во-первых, ВАХ из [45] выходит из омической области на известное плато в зависимости $I(V)$ (I — наблюдаемый ток через барьер) в области $eV/T \sim 10 \gg 1$. В то же время разнообразные теории ВАХ [52–55], полагая природу барьера чисто электростатической, предсказывают возникновение этого плато для значений $eV/T \geq 1$ (рис. 18, где ВАХ в одномерном варианте для параметров из [45] построена в диффузионном приближении). По-видимому, в процессе изготовления рис. 1 из [45] допущены технические ошибки, обнаружение которых возможно лишь при построении ВАХ в широком интервале изменения параметра eV/T : $0 \leq eV/T \leq 10$. Во-вторых, для определения свойств ВФХ в линейном режиме необходима точная информация о геометрии барьера — вещь также плохо определенная в [45]. Поэтому и здесь имеет смысл выходить в нелинейную область, где сведения о V можно извлекать из относительных величин, нечувствительных к точной геометрии барьера.

Конкретные расчеты [51] выполнены в диффузионном приближении с использованием одномерных формул, детально исследованных многими авторами начиная с [52] (см. также (115)):

$$j = \frac{\mu T n_d [1 - \exp(-eV/T)]}{\int_{-L_1}^{L_2} \exp(e\varphi/T) dx}, \quad (136)$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{2\pi e n_d (x - L_2)^2}{\varepsilon} - V, & x > 0; \\ \frac{2\pi e n_d (x + L_1)^2}{\varepsilon}, & x < 0, \end{cases}$$

$$L_{1,2} = \frac{n_s}{2n_d} \pm \frac{\varepsilon V}{4\pi e n_s}, \quad n_s = \frac{f}{aD}, \quad f(T) = \frac{n(0)}{n_1(T) + n(0)}, \quad (137)$$

$$n(0) = n_d \exp\left(-\frac{e\varphi(0)}{T}\right) \left(1 - \frac{j}{\mu T n_d} \int_{-L_1}^0 \exp \frac{e\varphi(s)}{T} ds\right),$$

$$n_1(T) = N_C(T) \exp\left(-\frac{E_d}{T}\right).$$

Здесь j — плотность тока через барьер, μ — подвижность электронов, $\varphi(x)$ — распределение потенциала в зоне барьера, ε — диэлектрическая постоянная, f — коэффициент заполнения отдельной дислокации (для его определения (137)) использован вариант теории ВАХ из [53]),

$N_C(T)$ — плотность состояний в зоне проводимости, E_d — положение дислокационного уровня по отношению к дну этой зоны, $n(0)$ — плотность объемных электронов на вершине барьера.

Относительная емкость барьера определена выражением

$$C = 7,8 \frac{L_1(0) + L_2(0)}{L_1(V) + L_2(V)}, \quad (138)$$

где $L_{1,2}$ из (137).

График зависимости j (136) от безразмерного напряжения $U = eV/T$ приведен на рис. 18. Параметры расчета соответствуют эксперименту [45]: $n_d = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $\varepsilon = 12$, N_C — плотность состояний для кремния. Процедура определения E_d поясняется на этом же рисунке. Зависимость $j(V)$ для температур $T = 264 \text{ К}$ и $T = 296 \text{ К}$ построена в координатах, использованных в [45]. Кривые 1–4 отвечают разным значениям E_d . Лучшее всего с экспериментом [45] совпадает кривая 2, если экспериментальные точки предварительно сдвинуты вдоль оси на порядок. Эта сдвигка, как отмечалось выше, имеет паразитное происхождение (другого объяснения сдвигки авторы не имеют).

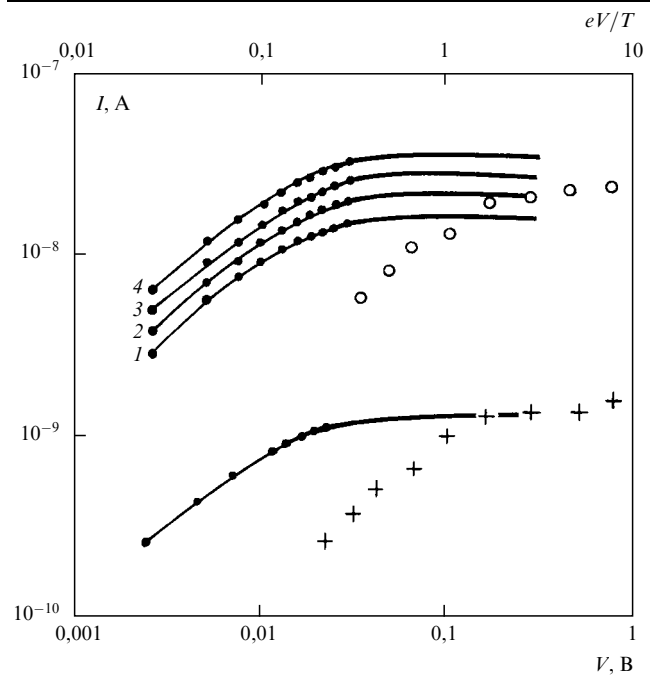


Рис. 18. Зависимость $I(V)$ для $T = 264 \text{ К}$ и $T = 296 \text{ К}$, построенная в координатах, использованных в [45]. Кривые 1–4 отвечают разным значениям E_d : 0,55, 0,60, 0,65, 0,70 эВ соответственно. Верхняя абсцисса дает представление о величине eV по отношению к T

Случайность сдвигки на рис. 1 из [45] становится очевидной, в частности, при обработке данных о ВФХ из [45]. Здесь введение подобной перенормировки V приводит к качественному несоответствию теоретических и наблюдаемых значений емкости. Поэтому представленное на рис. 19 сравнение расчетной зависимости $C(V)$ (138) и данных [45] выполнено в использованных авторами [45] координатах без какой-либо коррекции. В качестве привязки вдоль оси C предполагается, что теория и эксперимент совпадают при $V \rightarrow 0$. Согласно рис. 19, наиболее близка к экспериментальным данным кривая 2 с $E_d = 0,7 \text{ эВ}$.

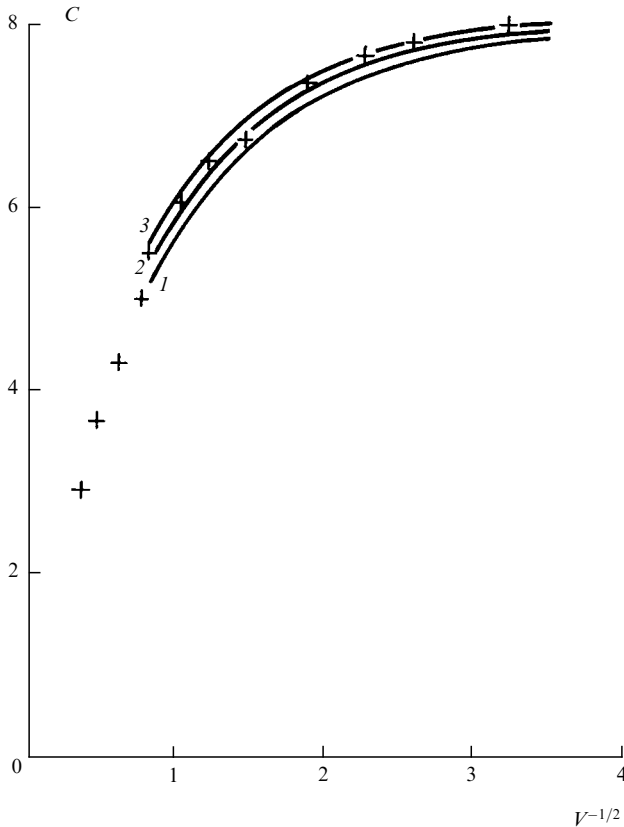


Рис. 19. Сравнение расчетной зависимости $C(V)$ и данных [45] без какой-либо коррекции. В качестве привязки вдоль вертикальной оси C полагается, что теория и эксперимент (+) совпадают при $V \rightarrow 0$. Наиболее близка к экспериментальным данным кривая 2: 1 — $E_d = 0,65$ эВ; 2 — $E_d = 0,7$ эВ; 3 — $E_d = 0,75$ эВ

Таким образом, данные ВАХ и ВФХ для барьера из [45] действительно дают разные значения E_d , и их отношение характеризует степень одномерности обсуждаемого барьера. Согласно изложенным выше соображениям $\gamma = 0,6/0,7 = 0,86$, т.е. барьер в большей степени одномерен, хотя наличие седловых точек на его вершине ощущается.

4.1.2. Одной из проблем в интерпретации ВАХ для барьеров различного происхождения в полупроводниках (границы зерен, границы бикристаллов, дислокационные барьеры и т.п.) является неоднозначное поведение ВАХ в промежуточной области разности потенциалов V на берегах барьера. В одних случаях [45] ВАХ имеет плато при переходе от омического режима к нелинейному росту j с увеличением V (см. рис. 18). В других экспериментах [55] такое плато отсутствует.

Качественное объяснение наличия плато (см. рис. 18) содержится в большом числе работ, использующих одномерную модель барьера с глубокими электронными состояниями, локализованными на его вершине (см., например, [52–54]). Рост тока через барьер в данном случае сопровождается возрастанием плотности свободных электронов на вершине барьера, что, в свою очередь, ведет к повышению коэффициента заполнения локализованных электронных состояний на вершине барьера и, как следствие, к увеличению высоты барьера.

Отсутствие плато может иметь место для барьеров с седловыми точками. Конкретные аргументы в пользу монотонной нелинейности $j(V)$, т.е. ВАХ с $\partial j / \partial V > 0$,

получены в [56] для барьера, возникающего в связи с перекрытием соседних ридовских цилиндров системы параллельных заряженных дислокаций, расположенных эквидистантно с периодом d , например, вдоль границы бикристалла, выбранной за ось y .

Предположим, что перекрытие h соседних ридовских цилиндров мало, так что хорда b на рис. 17 гораздо меньше радиуса ридовского цилиндра R , $b \ll R$. Предполагается также, что радиус R много больше дебаевского радиуса r_D данного полупроводника n -типа $r_D^2 = \varepsilon T / (4\pi e^2 n_d)$, где ε — диэлектрическая постоянная полупроводника, n_d — плотность доноров, T — температура, которая достаточно высока для того, чтобы считать все донорные состояния ионизированными, но слишком мала по сравнению с высотой барьера $e\varphi_s$ в седловой точке. В окрестности экстремума φ_s потенциал $\varphi(x, y)$ имеет вид, определенный формулами (120)–(122):

$$\begin{aligned} e\varphi(x, y) &= e\varphi_s + 0,5ky^2 - 0,5qx^2 + \dots, \\ \varphi_s &= 4\pi e^2 n_d \varepsilon^{-1} h^2, \quad k = 8\pi e^2 n_d \varepsilon^{-1}, \quad q = 8\pi e^2 n_d h \varepsilon^{-1} R^{-1}, \\ R &\gg b \gg h \gg r_D, \quad T \ll e\varphi_s, \quad b \approx (2Rh)^{1/2}. \end{aligned} \quad (139)$$

Здесь k и q — кривизны потенциала в седловой точке.

В условиях (139) общая задача о вычислении тока через барьер распадается на две части. Сначала нужно решить задачу о распределении потенциала $\psi(r, \vartheta)$ на барьере в отсутствие тока через барьер, а затем решить уравнение $\text{div}(\mathbf{j}) = 0$ с заданным распределением потенциала $\psi(r, \vartheta)$, пропорционального разности потенциалов V .

Учитывая неравенство $R \gg r_D$, задачу о структуре $\psi(r, \vartheta)$ можно формулировать как граничную:

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= 0, \quad \psi(r, \vartheta) \Big|_{r=R} = \\ &= \begin{cases} +V, & 0 \leq \vartheta \leq \pi - \alpha, \\ -V, & \pi + \alpha \leq \vartheta \leq 2\pi - \alpha, \end{cases} \quad \alpha = \frac{b}{R} \ll 1. \end{aligned} \quad (140)$$

В результате (см. (128))

$$\psi(r, \vartheta) = \frac{2V}{\pi} \arctg \frac{2Rr \sin(\vartheta)}{R^2 - r^2}. \quad (141)$$

Плотность дополнительных поверхностных зарядов вдоль границ ридовских цилиндров

$$\sigma(\vartheta) = \frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{\partial \psi}{\partial r} \Big|_{r=R} = -\frac{\varepsilon V}{2\pi^2 R \sin(\vartheta)}, \quad |\vartheta| \geq \alpha. \quad (142)$$

Появление зарядов $\sigma(\vartheta)$ (142) под действием разности потенциалов V реально означает, что границы барьера смещаются относительно своего равновесного положения в отсутствие V на величину $\xi(\vartheta)$:

$$\xi(\vartheta) = \frac{\sigma(\vartheta)}{en_d}, \quad \xi_{\max} \ll b. \quad (143)$$

В результате барьер теряет симметрию относительно плоскости, в которой находятся заряженные дислокации. Это обстоятельство и является основной причиной того, что в одномерной модели появление разности потенциалов V на берегах барьера сразу же меняет условия заполнения локализованных состояний на вершине барьера. Для случая $\xi(\vartheta)$ (143) смещения ридовских границ резко неоднородны. Они максимальны в зонах контактов и малы в меру $b/R \ll 1$ вдали от них. Следова-

тельно, можно полагать, что в нулевом по параметру $b/R \ll 1$ приближении начало координат задачи (140) совпадает с положением заряженной дислокации, и причины для изменения плотности свободных электронов на осях ридовских цилиндров под влиянием разности потенциалов V отсутствуют (ибо потенциал $\psi(r, \vartheta)$ из (141) равен нулю при $r \rightarrow 0$).

Расчет тока через барьер $e\varphi(x, y)$ выполняется в диффузионном приближении, т.е. полагается, что

$$\operatorname{div}(\mathbf{j}) = 0, \quad \mathbf{j} = -\mu[T\nabla n + en\nabla(\varphi + \psi)] \quad (144)$$

с граничными условиями, отвечающими разности потенциалов V на берегах барьера. Здесь μ — подвижность электронов. Формально задача (144) совпадает с аналогичной задачей о распаде метастабильного состояния в теории фазовых переходов 1-го рода, подробно исследованных Лангером [48] (см. также (106), (131)). Опуская в связи с этим детали расчета, приведем конечные результаты для зависимости средней плотности тока $\langle j_x \rangle$ через данную седловую точку от разности V :

$$\begin{aligned} \langle j_x \rangle &= \langle j_x^0 \rangle \left(\frac{1 + 0,5eV}{T} + \dots \right), \\ \langle j_x^0 \rangle &= e\mu n_d V d^{-1} \left(\frac{q}{k} \right)^{0,5} \exp(-e\varphi_s T^{-1}), \\ d &= R - h, \quad h \ll R, \quad \xi_{\max} = b. \end{aligned} \quad (145)$$

Очевидно, ВАХ (145) не имеет плато.

4.1.3. Специального внимания заслуживает эксперимент [46]. Во-первых, это единственный из известных нам опыт, демонстрирующий в явном виде возможное наличие "нейтральной" компоненты в структуре дислокационных барьеров. В самом деле, распределение ямок травления в этом эксперименте, представленное на рис. 20, вполне изотропно в плоскости xu рисунка. Однако нейтральные треки, тянущиеся за каждой из дислокаций, определяют анизотропию проводимости образца вдоль направлений x и y , как это видно на рис. 21. Таким образом, существует интересная задача о

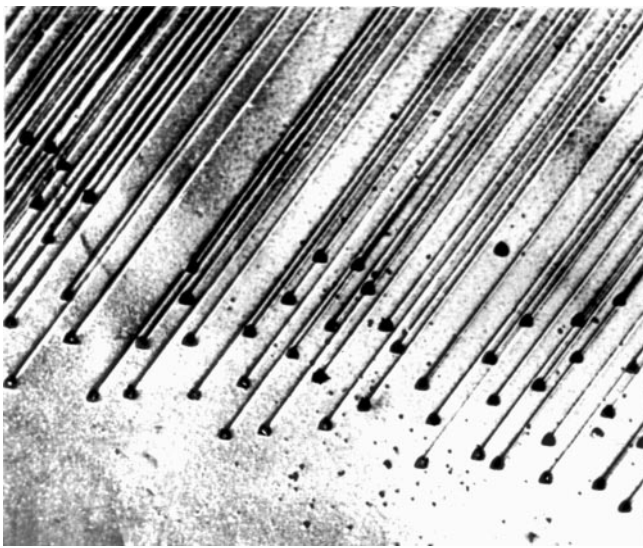


Рис. 20. Избирательное химическое травление поверхности кремния. Видны ямки травления на дислокациях и следы вдоль плоскостей скольжения [46]

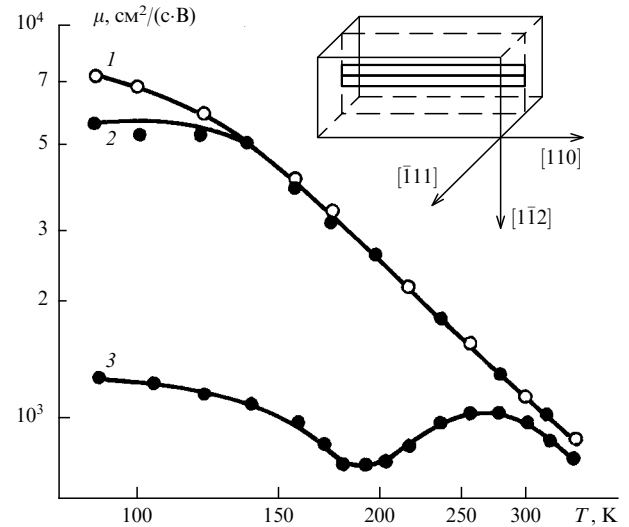


Рис. 21. Температурная зависимость подвижности электронов в пластически деформированном кремнии. Линии тока направлены перпендикулярно (3) плоскости скольжения и параллельно ей (1, 2 — соответственно, вдоль и поперек дислокаций). В верхнем углу показана схема образца и положения дислокаций и действовавшей плоскости скольжения [46]

свойствах ВАХ для комбинированного барьера, имеющего заряженную и нейтральную компоненты. Описание свойств таких барьеров пока отсутствует.

Во-вторых, интересна немонотонность температурной зависимости μ_{\perp} (компонента μ_{\parallel} такого минимума не имеет (см. рис. 21)). Такая немонотонность допускает следующую интерпретацию. Сразу после появления "вилки" (т.е. разницы между μ_{\parallel} и μ_{\perp}) примерно при $T \approx 300$ К, степень анизотропии начинает расти, что отвечает все большему перекрытию соседних ридовских цилиндров. Однако затем в области $T \approx 200$ К, там, где параметр $\Gamma = e^2 f / (\epsilon a T)$ становится сравнимым с единицей, прозрачность барьеров начинает расти. Этот рост можно сопоставить с резким возрастанием плотности дырок (см. (12)), что приводит к эффективному снижению отрицательности заряженных дислокаций. Оценка параметра Γ для кремния при $\epsilon \approx 10$, $a \approx 5 \cdot 10^{-8}$ см и $f \approx 0,1$ показывают, что Γ проходит через значение $\Gamma \approx 1$ в окрестности $T \approx 200$ К. Здесь же естественно упомянуть о формально аналогичном поведении σ_{\perp} в экспериментах с n-германием [24] (см. рис. 9). Однако причины температурной немонотонности в данном случае имеют другое происхождение. Речь идет о смене механизмов экранирования, происходящей при наличии "вымерзания" свободных электронов в образцах n-типа. Именно эта область отвечает положению минимума в $\sigma_{\perp}(T)$ на рис. 9, о чем можно судить по поведению проводимости контрольного образца и поведению $\sigma_{\parallel}(T)$. Что касается поведения $\sigma_{\perp}(T)$, то в области $T \approx T_{\min}$ радиус экранирования отдельных дислокаций определяется формулами (32)–(34) и в условиях частичного вымерзания электронов заметно превосходит ридовский радиус. В этих условиях перекрытие между соседними ридовскими цилиндрами максимально, и анизотропия стремится к максимуму. Однако в области $T < T_{\min}$ химический потенциал начинает опускаться до своего положения между дном зоны проводимости и энергией точечных доноров к уровню энергии доноров. В результате радиус экранирования снова стремится к своему ридовскому значению, что

существенно увеличивает прозрачность дислокационного барьера.

4.5. ВАХ отдельной заряженной дислокации в полупроводниках

Одним из красивых эффектов, демонстрирующих нарушение локальной нейтральности в окрестности дислокационных линий в полупроводниковых кристаллах кремния и германия, является несимметричность вольт-амперной характеристики при протекании тока от оси дислокации на периферию полупроводника, и наоборот. Соответствующие эксперименты, выполненные с отдельной дислокацией на кристаллах кремния [57] и германия [58], свидетельствуют о наличии четкого диодного эффекта дислокационного происхождения.

Описание диодного эффекта на отдельной заряженной дислокации в рамках дебаевского приближения, когда $V_C < T$, содержится в работе [59], где V_C — энергия электрона в электростатическом поле заряженной дислокации на ее оси, T — температура. Однако для реальных дислокаций с краевой компонентой в кремнии и германии в широком интервале температур выполняется обратное неравенство $V_C > T$. В этих условиях ВАХ отдельной дислокации должна рассчитываться заново, что и осуществлено авторами [60].

Предположим, что ядро дислокации совпадает с осью z цилиндрической системы координат, стационарная плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ направлена в радиальном направлении, так что $\text{div}(\mathbf{j}) = 0$ и

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{j_0 r_0}{r}. \quad (146)$$

Здесь r_0 — минимальное расстояние, на котором справедливо локальное диффузионное определение плотности тока:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mu n(\mathbf{r}) \nabla \zeta(\mathbf{r}), \quad (147)$$

где μ — подвижность электронов, $\zeta(\mathbf{r})$, $n(\mathbf{r})$ — локальные значения химического потенциала и электронной плотности в объеме полупроводника. Полагая, что разность химических потенциалов для электрона на оси дислокации и вдали от нее (т.е. на расстоянии $r \geq R$, где R — ридовский радиус, определяющий радиус экранирования электрического поля дислокации) равна eV (V — приложенная разность потенциалов), можно определения (146), (147) записать в следующем виде:

$$j_0 = \frac{\mu V}{r_0 \int_{r_0}^R [n(\mathbf{r})]^{-1} dr}. \quad (148)$$

Явный вид $n(\mathbf{r})$ восстанавливается с учетом структуры $\zeta(\mathbf{r})$ в пределе Больцмановской статистики для электронов в объеме полупроводника n -типа с плотностью доноров n_d и коэффициентом диффузии D :

$$\nabla \zeta = e \nabla \varphi + T n^{-1} \nabla n, \quad \mu = e D T^{-1}. \quad (149)$$

В этом случае из (146)–(148) следует

$$n(\mathbf{r}) = \exp\left(-\frac{e\varphi(\mathbf{r})}{T}\right) \left\{ n_d - \frac{j_0 r_0}{D} \int_r^R r^{-1} \exp\left[\frac{e\varphi(r)}{T}\right] dr \right\}, \quad (150)$$

причем для потенциала φ можно использовать определение (см. (8))

$$\varphi(r) = \frac{2ef}{\varepsilon a} \left[\ln \frac{R^2}{r} - 0,5 \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \right], \quad \pi R^2 n_d = \frac{f}{a}. \quad (151)$$

Здесь f — коэффициент заполнения дислокаций, ε — диэлектрическая постоянная, явное выражение для упоминавшегося выше радиуса ридовского цилиндра R годится в случае выполнения неравенства $R \gg r_D$, что предполагается выполненным, $r_D^2 = \varepsilon T / (4\pi e^2 n_d)$, a — межатомное расстояние.

Определения (148)–(151) связывают между собой величины j_0 , V и f . Чтобы извлечь из этих определений ВАХ, т.е. связь между j_0 и V , необходимо еще определить f в терминах E_d и V . Упрощенный вариант этого определения выглядит так:

$$-E_d + eV + V_C = \zeta(R), \quad V_C = e\varphi\left(\frac{a}{f}\right), \quad (152)$$

где E_d — отсчитанное от дна зоны проводимости положение дислокационного уровня в запрещенной зоне полупроводника, $\zeta(R) \equiv F$ — положение химического потенциала вдали от дислокации, $\varphi(r)$ из (151).

Система определений (148)–(152) может быть значительно упрощена после взятия интеграла $\int (n(\mathbf{r}))^{-1} dr$, фигурирующего в определении j_0 (148). В результате

$$j_0 = \frac{D n_d}{r_0} \frac{1 - \exp(-eV/T)}{\int_{r_0}^R r^{-1} \exp(e\varphi(r)/T) dr}. \quad (153)$$

Определение j_0 напоминает хорошо известное выражение для ВАХ в диффузионной теории выпрямления [61], что не удивительно, поскольку заряженная дислокация может рассматриваться как цилиндрически симметричный барьер Шоттки. Разница заключается лишь в появлении обрезającego фактора r_0 , который может иметь смысл радиуса острия, подводящего ток к оси заряженной дислокации, либо радиуса захвата электронов на дислокационный уровень.

В омиической области и с логарифмической точностью по параметру $R/r_0 \gg 1$ выражение (153) может быть приведено к виду:

$$j_0 = \frac{D n_d}{r_0} \frac{eV}{T} 2\Gamma \left(\frac{r_0}{R} \right)^{2\Gamma}, \quad \Gamma = \frac{e^2 f}{\varepsilon a T}. \quad (154)$$

Сравнение этого выражения с экспериментальными данными [57] для ВАХ на кремнии позволяют оценить r_0 при заданных $n_d \approx 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $f \approx 0,1$ для $T = 250 \text{ К}$, $R \approx 10^{-4} \text{ см}$, $\varepsilon \approx 12$ и $\rho = 150 \text{ Ом}\cdot\text{см}$. В результате $2\Gamma(250 \text{ К}) \approx 2$, $r_0/R \approx 10^{-1}$. Такую же оценку r_0/R можно получить, считая, что в [57] наклон ВАХ в омиической области примерно в 30–50 раз меньше, чем наклон ВАХ для бездислокационного кремния (рис. 22). Таким образом, $2\Gamma(r_0/R)^{2\Gamma} \approx 1/50$, откуда при $\Gamma \approx 1$ имеем $r_0/R \approx 10^{-1}$.

5. Релаксационные явления

Проблема установления равновесия в электронной системе полупроводника при наличии в нем заряженных дислокаций находится в удивительно неопределенном состоянии. С одной стороны, несомненны качественные

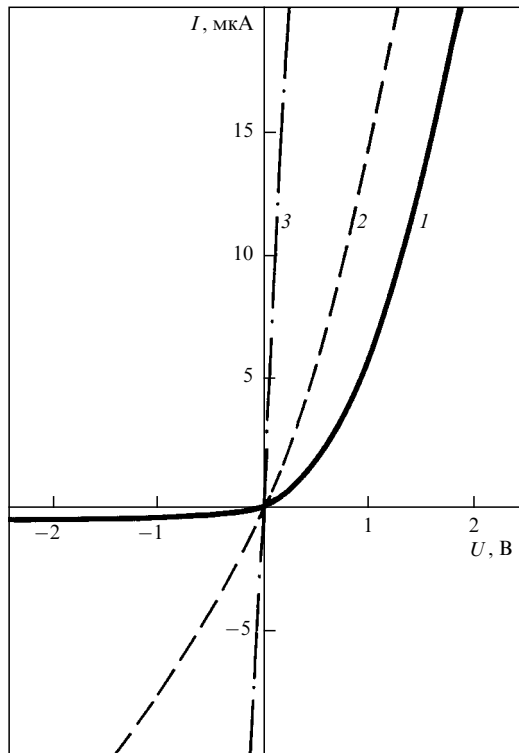


Рис. 22. Общий вид ВАХ для отдельной дислокации: 1 — для микрозоны, расположенного в месте выхода 60-градусной дислокации; 2 — для микрозоны, расположенного над бездислокационной поверхностью; 3 — для двух золотых омических контактов [57]

особенности релаксационных явлений в пластически деформированном полупроводнике, например неэкспоненциальное (логарифмическое) поведение во времени неравновесной фотопроводимости при ее заметном (нелинейном) отклонении от равновесного значения [62], с другой стороны, абсолютное отсутствие в литературе обсуждения количественных деталей даже простейшего релаксационного эффекта — экспоненциальной асимптотики релаксации, характерной для линейной стадии различных релаксационных процессов. Особенно заметна "неосвоенность" этой задачи на фоне успехов соответствующей деятельности (экспериментальной и теоретической) при изучении релаксации на точечных центрах (см., например, [63]).

По-видимому, экспериментаторов "расхолаживает" рутинность задачи об экспоненциальной релаксации. Ее существование не вызывает сомнений, а интерпретация следующего из измерений времени релаксации, в особенности предэкспоненты, определяющей сечение захвата, весьма затруднительна. В результате к настоящему времени авторам известна лишь одна достаточно подробная работа [62] о релаксации фотопроводимости в германии с небольшой плотностью дислокаций, когда соседние ридовские цилиндры не перекрываются между собой. Традиционный анализ данных [62], выполненный далее, приводит к неожиданному выводу: в области низких температур сечение захвата электронов на дислокации аномально велико (превосходит размеры образца!), чего не может быть. Обсуждение возможных причин этого парадокса приводит к интересной альтернативе в описании релаксационных явлений для дислокаций.

5.1. Экспоненциальный режим

5.1.1. Традиционным мы называем формализм, в котором релаксация коэффициента заполнения f отдельной заряженной дислокации в полупроводнике n -типа описывается уравнением [62, 11]:

$$\begin{aligned} \dot{f} &= 2\pi a r_0 v_T [\tilde{n}(1-f) - n_e f], \quad \dot{f} \equiv \frac{df}{dt}, \\ \tilde{n} &= n_d \exp\left(-\frac{V_C}{T}\right), \quad V_C \approx \frac{2e^2 f}{\varepsilon a} \ln \frac{R}{c}, \\ c &= \frac{a}{f}, \quad \pi R^2 n_d = \frac{f}{a}, \\ n_e &= N_e \exp(-E_d T^{-1}), \quad f < 1. \end{aligned} \quad (155)$$

Здесь $n_e = n_d$ — плотность электронов вдали от дислокации (предполагается, что все доноры, имеющие плотность n_d , ионизированы), R — ридовский радиус, ε — диэлектрическая постоянная полупроводника, E_d — глубина дислокационного уровня, отсчитанная от дна зоны проводимости, v_T — тепловая скорость электронов, a — межатомное расстояние вдоль дислокации, r_0 — длина захвата на дислокацию, \tilde{n} — локальная плотность объемных электронов на оси дислокации, T — температура, N_e — плотность электронных состояний в зоне проводимости.

В условиях малости возмущения равновесной величины f_0 , когда

$$f(t) = f_0 + \delta f(t), \quad \delta f \ll f_0, \quad (156)$$

уравнение (155), будучи линеаризованным, принимает с логарифмической точностью (в меру $\ln(R/c) \gg 1$) вид

$$\begin{aligned} \delta \dot{f} &= -\frac{\delta f}{\tau_0}, \quad \tau_0^{-1} = 2\pi a r_0 v_T n_e \frac{2e^2 f_0}{\varepsilon a T} \ln \frac{R_0}{c_0}, \\ \pi R_0^2 n_d &= \frac{f_0}{a}, \quad c_0 = \frac{a}{f_0}, \end{aligned} \quad (157)$$

где τ_0 — характерное время релаксации. Величина r_0 , вычисленная с помощью (157) и экспериментальных данных [62] о времени релаксации τ_0 фотопроводимости для n -германия с заряженными дислокациями, представлена в таблице [64], где собраны и другие сопутствующие величины. Масштаб изменения r_0 находится в интервале $10^3 \geq r_0 \geq 10^{-8}$ см. Очевидно, амплитуда этого изменения слишком велика, чтобы соответствовать какому бы то ни было физическому содержанию r_0 из (157).

Таблица

T, K	f	R, cm	2τ	τ^*, c	r_0, cm	r_σ, cm
80	0,13	$2,9 \cdot 10^{-4}$	6,25	10^3	10^2	10^{-6}
100	0,12	$2,8 \cdot 10^{-4}$	5	50	0,83	$5 \cdot 10^{-7}$
125	0,11	$2,64 \cdot 10^{-4}$	4,0	10	$3 \cdot 10^{-5}$	$1,4 \cdot 10^{-7}$
170	0,09	$2,4 \cdot 10^{-4}$	2,94	$6 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$0,7 \cdot 10^{-7}$
200	0,08	$2,25 \cdot 10^{-4}$	2,5	$8 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-8}$	$0,4 \cdot 10^{-7}$

Примечание. Данные для слабо деформированного n -германия с параметрами $\varepsilon = 16$, $E_d = 0,4$ эВ ниже дна зоны проводимости, $a = 5 \cdot 10^{-8}$ см, $n_d = 5 \cdot 10^{13} cm^{-3}$, $\sigma = 0,5 \cdot 10^{11} c^{-1}$. Величина r_0 рассчитана с использованием равенства $\tau^* = \tau_0$, где τ^* взято из таблицы, а τ_0 — из (157); величина r_σ получена с использованием равенства $\tau^* = \tau_\sigma$, где τ_σ — из (166). Данные для $T = 80 K$ взяты из [23], остальная информация относительно T, f, τ^* — из [62].

5.1.2. В уравнении (157) предполагается, что основной проблемой для объемного электрона, стремящегося "попасть" на дислокацию, является его переход из сплошного спектра на дискретный уровень. Вероятность этого процесса пропорциональна длине захвата r_0 . В действительности, однако, имеется еще одна причина, затрудняющая процесс перехода электрона из объема на дислокационный уровень. Речь идет о проводимости σ ридовского цилиндра. Полагая, что основной причиной конечности времени релаксации является ограниченная проводимость полупроводника, напишем новое релаксационное уравнение, являющееся альтернативой уравнению (157), и затем на его основе определим соответствующее время релаксации τ_σ .

Для получения альтернативного уравнения используются следующие предпосылки и упрощения.

Электронный ток в объеме ридовского цилиндра можно описывать в рамках локального (диффузионного) приближения:

$$j(r) = \frac{\mu}{e} n(r) \nabla \zeta. \quad (158)$$

Здесь μ — подвижность электрона, $\zeta(r)$, $n(r)$ — локальные значения химического потенциала и электронной плотности. Определение $j(r)$ (158) справедливо вплоть до минимального расстояния r_σ , за пределами которого в области $r < r_\sigma$ диффузионное приближение (158) теряет смысл, но здесь же происходит захват электрона на дислокационный уровень. Таким образом, длина r_σ играет роль длины захвата r_0 в уравнениях (155), (157). Величина r_σ не вычисляется и остается параметром теории.

В окрестности $r \approx r_\sigma$ локальные значения объемного химического потенциала $\zeta(r)$ и химического потенциала ζ_d электронов на дислокации совпадают между собой:

$$\zeta(r_\sigma) = \zeta_d, \quad \zeta_d = -E_d + V_C. \quad (159)$$

Здесь определения E_d и V_C аналогичны приведенным в (155). Требование (159) означает, что электрон, "поднявшийся" в область $r \approx r_\sigma$, уже "не имеет проблем" для проникновения на дислокационный уровень. При записи химического потенциала ζ_d дислокационных электронов мы для простоты пренебрегли энтропийным вкладом, так как E_d и V_C имеют масштаб, гораздо больший температуры.

С целью упрощения выкладок предполагаем задачу цилиндрически симметричной, что в общем случае неверно, так как на малых расстояниях $r = r_d$ заметный вклад в процессы релаксационных перемещений объемных электронов вносит анизотропный деформационный потенциал.

Исходное релаксационное уравнение имеет вид

$$\dot{f} = -2\pi r_\sigma j_\sigma, \quad (160)$$

где j_σ — объемный поток электронов на расстоянии $r = r_\sigma$ от оси цилиндра. Принимая, что характерное время установления электронного потока в ридовском цилиндре много меньше времени дислокационной релаксации

$$\tau_\sigma \gg \tau_d, \quad \tau_d \approx \frac{R^2}{D}, \quad \mu = \frac{eD}{T} \quad (161)$$

(наличие этого неравенства проверяется верификацией после определения формулой (166) времени τ_σ), считаем, что плотность электронного тока $j(r)$ удовлетворяет требованию $\text{div } j = 0$, т.е.

$$j(r) = j_\sigma r_\sigma r^{-1}, \quad r \geq r_\sigma. \quad (162)$$

Используя далее определение (158) и граничные условия (159), придадим величине j_σ из (160) следующий смысл:

$$j_\sigma = -\frac{\mu}{er_\sigma} \frac{\zeta_\infty + \zeta_d - V_C}{\int_{r_\sigma}^R dr/m(r)}, \quad V_C = e\varphi(c), \quad (163)$$

$$e\varphi(r) = \frac{2e^2 f}{\varepsilon a} \left[\ln \frac{R}{r} - 0,5(1 - r^2 R^{-2}) \right], \quad (163a)$$

$$n(r) = \exp\left(-\frac{e\varphi}{T}\right) \left[n_d - \frac{j_\sigma r_\sigma}{D} \int_r^R \frac{dr}{r} \exp \frac{e\varphi}{T} \right], \quad (163b)$$

где ζ_∞ — значение химического потенциала за пределами ридовского цилиндра, отсчитанное от дна зоны проводимости.

Очевидно, что в равновесии с логарифмической точностью

$$\zeta_\infty + E_d - V_C = 0. \quad (164)$$

Это требование является определением равновесного коэффициента заполнения f_0 . Если же комбинация (164) отлична от нуля, возникает ток j_σ (163) и, согласно (160), становится возможным изменение f со временем.

Интеграл, фигурирующий в определении j_σ (163), можно вычислить. В результате уравнение (160) с учетом (163) принимает вид:

$$j = 2\pi\Gamma\sigma \left(\frac{r_\sigma}{R}\right)^{2\Gamma} \left[1 - \exp \frac{\delta\zeta}{T} \right], \quad (165)$$

$$\delta\zeta = \zeta_\infty + E_d - V_C, \quad \sigma = \frac{n_d e^2 \tau}{m^*}, \quad \mu = \frac{eD}{T} = \frac{e\tau}{m^*}.$$

Здесь τ — импульсное время релаксации при рассеянии электронов на дефектах решетки, σ — проводимость в τ -приближении, m^* — эффективная масса электрона, Γ — из (154), V_C — из (155).

Линеаризуя уравнение (165) в области $\delta\zeta < T$, имеем определение τ_σ , характеризующее время релаксации на заряженных дислокациях за счет конечной проводимости σ [64]:

$$\tau_\sigma^{-1} = \frac{2\pi\sigma}{\varepsilon\Gamma_*} \ln \frac{R_0^2}{c_0^2}, \quad \Gamma_* = \frac{1}{\Gamma} \left(\frac{R_0}{r_\sigma}\right)^{2\Gamma} \gg 1. \quad (166)$$

Обработка данных [62] (информация о τ_σ при $T = 80$ К взята из [23]) с использованием τ_σ (166) дает значения r_σ , приведенные в таблице. Интервал изменения r_σ при варьировании T находится в пределах $10^{-7} \leq r_\sigma < 10^{-6}$ см, что выглядит более разумно, чем соответствующий интервал изменения r_0 из (157).

В заключение отметим, что конечность проводимости ридовского цилиндра может являться одной из существенных причин, влияющих на экспоненциальное время релаксации. В экспериментах [62] этот канал релаксации оказывается основным.

Несколько слов о физических причинах, формирующих радиус захвата r_0 . Как известно, определение сечения захвата является сложной кинетической задачей [63]. Тем не менее в случае дислокаций существуют наглядные энергетические соображения, позволяющие качественно оценить радиус захвата [65].

Дело в том, что комбинация кулоновского $V_C(r)$ (8) и деформационного $V_\xi(r, \vartheta)$ потенциалов вокруг заряженной дислокации содержит перевальную точку r_0 , через которую наиболее вероятно проникновение электронов из объема полупроводника на дислокацию. Положение этой точки определяется из требования

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[V_C(r) - V_\xi \left(r, \frac{\pi}{2} \right) \right] = 0, \quad (167)$$

что дает в результате

$$r_0 = \frac{(1-2\nu)}{2\pi(1-\nu)} \frac{W}{V_C^0} b, \quad V_C^0 = \frac{2e^2 f}{\epsilon a}. \quad (168)$$

Масштаб r_0 для параметров задачи, отвечающих случаю германия, есть $r_0 \geq 10^{-6}$ см.

5.2. Логарифмический режим

Обсуждая релаксационные явления на заряженных дислокациях, нельзя обойти вниманием так называемый логарифмический режим релаксации. Это специфическое явление наблюдается лишь на линейных заряженных дефектах и обнаружено впервые, по-видимому, Фигельским с сотр. [62] (рис. 23). Речь идет об одном из нелинейных эффектов, содержащихся в уравнении (155).

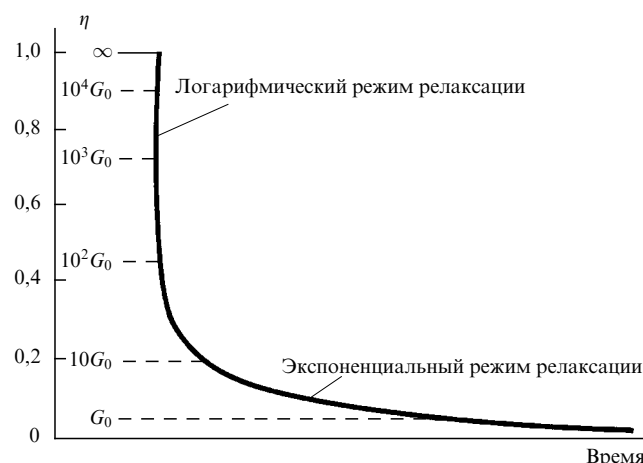


Рис. 23. Релаксация фототока в п-германии с заряженными дислокациями при низких температурах (штриховые линии отвечают разным исходным интенсивностям облучения [62])

Пусть в начальный момент времени произошло резкое изменение коэффициента заполнения δf в сторону его уменьшения. В этом случае восстановление равновесия происходит в основном за счет прихода электронов из объема полупроводника на дислокацию (уходный член не существен). Полагая дополнительно, что

$$f = f_0 + \delta f, \quad \delta f < f_0, \quad \text{но} \quad \frac{2e^2 \delta f}{\epsilon a T} \gg 1, \quad (169)$$

имеем из (155)

$$\begin{aligned} \delta \dot{f} &= \tau_*^{-1} \exp(-\lambda \delta f), \\ \tau_*^{-1} &= \langle \sigma v \rangle n_\infty (1 - f_0) \exp\left(\frac{eV_C^0}{T}\right), \\ \lambda &= \frac{2e^2}{\epsilon a T} \ln \frac{R_0}{c_0} \end{aligned} \quad (170)$$

или

$$\exp(\lambda \delta f) - 1 = \frac{\lambda t}{\tau_*}, \quad \lambda \delta f = \ln \left(1 + \frac{\lambda t}{\tau_*} \right). \quad (171)$$

Здесь V_C^0 см. (168).

Результат $\delta f \sim \ln t$ специфичен для линейных заряженных дефектов. В настоящее время это свойство широко используется для диагностики заряженных дислокаций в исследуемых кристаллах. Очень эффективно оно проявляется в DLTS-экспериментах с заряженными дислокациями (см., например, [66]). Однако обсуждение деталей DLTS выходит за рамки обзора.

Заключение

Заканчивая обзор, отметим еще раз, что большое число экспериментальных данных с заряженными дислокациями в германии и кремнии удается самосогласованно объяснить, используя схему уровней, представленную на рис. 5. Эта схема феноменологична, т.е. не содержит ответа на вопросы о реальном положении уровней в запрещенной зоне полупроводников либо о малости емкостей C_1 нижних акцепторных уровней E_1 . Тем не менее ее польза несомненна.

В последнее время интенсивно развиваются различные спектроскопические методы изучения дислокаций в полупроводниках. Здесь удастся получить информацию о роли деформационного потенциала, влиянии расщепления дислокаций, специфической роли точечных примесей, локализованных вблизи ядер заряженных дислокаций и т.д. Введение в этот круг вопросов требует написания нового обзора.

Авторы глубоко благодарны Ю.А. Осипьяну и В. Шретеру (W. Schröter) за внимание к работе и многочисленные стимулирующие дискуссии о физике заряженных дислокаций в полупроводниковых кристаллах.

Список литературы

1. Gallagher C J *Phys. Rev.* **88** 721 (1952)
2. Shockley W *Phys. Rev.* **91** 228 (1953)
3. Read W T J. *Phil. Mag.* **45** 775 (1954)
4. Read W T J. *Phil. Mag.* **45** 1119 (1954)
5. Pearson G L, Read W T, Morin F L *Phys. Rev.* **93** 666 (1957)
6. Logan R A, Pearson G L, Kleinman D A J. *Appl. Phys.* **30** 885 (1959)
7. Labusch R, Schröter W, in *Dislocations in solids* (Ed. F R N Nabarro) (North Holland Publ. 1980) chapt. 20
8. Ossipyan Yu A *Sov. Scientific Rev. A* **4** 219 (1982)
9. Matore N F J. *Appl. Phys.* **56** 2605 (1984)
10. Ossipyan Yu A, Petrenko V F, Zaretskii A V *Adv. Phys.* **35** 115 (1986)
11. Бонч-Бруевич В А, Калашников С Т "Физика полупроводников" (М.: Наука, 1977)
12. Бонч-Бруевич В А, Гласко В Б *ФТТ* **3** 36 (1961)
13. Кведер В В, Кравченко В Я, Мchedлидзе Т Р и др. *Письма в ЖЭТФ* **43** 202 (1986)

14. Кведер В В, Мчедлидзе Т Р, Осипьян Ю А, Шалынин А И *ЖЭТФ* **93** 1470 (1987)
15. Кведер В В, Мчедлидзе Т Р, Осипьян Ю А, Шалынин А И *ФТТ* **32** 2224 (1990)
16. Landeraner R *Phys. Rev.* **94** 1386 (1954)
17. Бонч-Бруевич В А *ФТТ* **3** 47 (1961)
18. Emtage P R *Phys. Rev.* **163** 865 (1967)
19. Classon A *Phys. Status Solidi B* **61**, **62** 599 (1974)
20. Witer S *Phys. Status Solidi B* **79** 673 (1977)
21. Набутовский В М, Шапиро Б Я *ЖЭТФ* **75** 948 (1979)
22. Воронов В П, Косевич А М *ФНТ* **6** 371 (1980)
23. Колнобакин А И, Осипьян Ю А, Шевченко С А *ЖЭТФ* **77** 975 (1979)
24. Колнобакин А И, Шевченко С А *Письма в ЖЭТФ* **30** 208 (1979)
25. Schröter W *Phys. Status Solidi* **21** 211 (1967)
26. Осипьян Ю А, Шевченко С А *ЖЭТФ* **65** 698 (1973)
27. Kolubakin F I, Shevchenko S A *Phys. Status Solidi A* **63** 677 (1981)
28. Grazulis V A, Kveder V V, Mukhina V Yu *Phys. Status Solidi A* **43** 407 (1977)
29. Камке Э *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям* (М.: Физматиз, 1965)
30. Глазман Л И, Сулис Р А *ФТП* **20** 1769 (1986)
31. Шикина Ю В, Шикин В Б *ФТП* **25** 2225 (1991)
32. Шикина Ю В, Шикин В Б *ФТП* **26** 927 (1992)
33. Баженов А, Шикина Ю, Шикина Н *ФТТ* **34** 789 (1992)
34. Вул Б М, Заварицкая Э И *ЖЭТФ* **76** 1089 (1979)
35. Заварицкая Э И *Письма в ЖЭТФ* **40** 116 (1984); **41** 231 (1985)
36. Landwehr G, Handler P J. *Phys. Chem. Solids* **23** 891 (1982)
37. Гергель В А, Сулис Р А *ФТП* **16** 1925 (1982)
38. Хирт Дж, Лот И *Теория дислокаций* (М.: Атомиздат, 1972)
39. Бир Г Л, Пикус Г Е, в кн. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М.: Наука, 1972) с. 394, 573
40. Baranskii P I, Kolomoets V V *Phys. Status Solidi B* **45** 55 (1970)
41. Шикина Ю В, Шикин В Б *ФТП* **28** 675 (1994)
42. Еременко В, Никитенко В, Якимов Е, Ярыкин Н *ФТП* **12** 273 (1978)
43. Koveshnikov S, Feklisova O, Yakimov E, Yarykin N *Phys. Status Solidi A* **127** 67 (1991)
44. Шикина Ю В, Шикина Н И *ФТП* **29** (1995) в печати
45. Еременко В Г, Фабер Б Я, Якимов Е Б *ФТП* **17** 1313 (1983)
46. Еременко В Г, Никитенко В И, Якимов Е Б *Письма в ЖЭТФ* **26** 72 (1977)
47. Шкловский Б И, Эфрос А Л *Электронные свойства легированных полупроводников* (М.: Наука, 1978)
48. Langer J S *Ann. Phys.* **54** 258 (1969)
49. Велиев З А, Шикина Н И, Шикин В Б *ФТП* **17** 153 (1983)
50. Велиев З А, Шикин В Б *ФТП* **19** 858 (1985)
51. Шикина Ю В, Шикин В Б *ФТП* **26** 992 (1992)
52. Teylor W E, Odell N H, Fan H F *Phys. Rev.* **88** 867 (1953)
53. Гольдман Е И, Ждан А Г *ФТП* **10** 1839 (1976)
54. Гольдман Е И, Гуляев И, Ждан А Г, Сандомирский В *ФТП* **10** 2089 (1976)
55. McGonial G C, Thomson D J, Shaw J G, Grad H C *Phys. Rev. B* **28** 5908 (1983)
56. Шикина Н И, Шикин В Б *ФТП* **24** 749 (1990)
57. Еременко В Г, Никитенко В И, Якимов Е Б *ЖЭТФ* **69** 990 (1975)
58. Hess K J *Diplomarbeit. Clausthal Germany* (1989)
59. Винокур В М, Кравченко В Я *ФТП* **9** 1346 (1975)
60. Шикин В Б, Шикина Ю В *ФТП* **25** 1065 (1991)
61. Ансельм А И *Введение в теорию полупроводников* (М.: Наука, 1978)
62. Jastrebska V, Figelski T *Phys. Status Solidi* **7** K101 (1984)
63. Абакумов В И, Перель В И, Яснеевич И Н *ФТП* **12** 3 (1978)
64. Шикин В Б, Шикина Н И *ФТП* **24** 749 (1990)
65. Шикин В Б, Шикина Н И *Phys. Status Solidi A* **108** 669 (1988)
66. Kveder V V, Ossipyan Yu A, Schröter W, Zoth G *Phys. Status Solidi A* **72** 70 (1972)

CHARGED DISLOCATIONS IN SEMICONDUCTORS

V.B. Shikin

*Institute of Solid State Physics,
142432 Chernogolovka, Moscow district, Russia
Fax: (096) 517-19 49,
E-mail: shikin@sherna.msk.su.*

Yu.V. Shikina

*Institute of microelectronic technology and high purity materials
142432 Chernogolovka, Moscow district, Russia*

The situation in the problem of charged dislocations in silicon and germanium crystals is discussed. A phenomenological model of electron spectrum of charged dislocation in these crystals developing Shockley–Read's ideas is used in order to explain the equilibrium and some simplest transport properties of plastically deformed germanium and silicon. The proposed model includes two acceptor levels: E_1 and E_2 and one donor level ε_1 (see fig. 5). We also have introduced a concept of finite capacities C_1 of the level E_1 . Within the framework of this model one can describe self-consistently the main electrical properties of plastically deformed germanium and silicon, i.e. their conductivity in n - and p - states, the details of the inversion of the type of conductivity caused by dislocations, some features of I – V characteristics of the crystals with oriented dislocations, the simplest relaxation phenomena etc. At this for germanium the acceptor level E_1 turns out to be $\sim 0,1$ eV above top of the valence band and the capacity $C_1 \lesssim 1$. For the silicon $E_1 \simeq 0,4$ eV $C_1 \lesssim 0,01$. We would like to note the smallness of the capacities C_1 which validates the introduction of these additional parameters into characteristics of electron spectrum of dislocations.

PACS numbers: 61.72.Bb, 61.72.Lk, 61.72.Hh, **72.20.–i**

Bibliography — 66 references

Received 16 November 1994, revised 27 February 1995