

© 1992

ЗАРЯЖЕННЫЕ ДИСЛОКАЦИИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ *p*-ТИПА

А. Баженов, Н. Шикина, Ю. Шикина

Обсуждается роль деформационного взаимодействия в формировании дискретного электронного спектра для заряженных дислокаций в полупроводниках *p*-типа.

Эксперименты с одиночными дислокациями в кристаллах германия и кремния *p*-типа [1-4] свидетельствуют о наличии на них акцепторно-донорного уровня, расположенного определенно в нижней части запрещенной зоны выше потолка валентной зоны. С другой стороны, изучение проводимости границы бикристалла германия, которая в известном смысле является набором периодически расположенных краевых дислокаций с расстоянием d между ними

$$d = \frac{b}{2\sin\frac{\theta}{2}}, \quad (1)$$

указывает на существование конечной плотности дырок при $T \rightarrow 0$. Это обстоятельство требует введения в теорию дислокационного уровня ниже потолка валентной зоны [5-8]. Здесь b — вектор Бюргера, θ — угол разориентации. В противном случае, казалось бы, невозможно объяснить дырочный характер проводимости границы бикристалла и наличие свободных дырок на этой границе при стремлении температуры к нулю.

Отмеченное качественное противоречие существует около десяти лет без попыток его объяснения. В данной работе мы хотим обратить внимание на возможную роль деформационного взаимодействия в обсуждаемой проблеме.

1. Хорошо известно, что в окрестности отдельной дислокации с краевой компонентой электроны (дырки) испытывают влияние деформационного потенциала $V(r, \varphi)$, который в изотропном приближении записывается в виде [9].

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

Здесь W — константа деформационного взаимодействия, имеющая для германия масштаб $W \approx 10$ эВ; ν — коэффициент Пуассона; φ — угол, отсчитываемый от плоскости скольжения.

Знакопеременность взаимодействия (2), 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. Схематически такая возможность изображена на рис. 1. Развитие этой гипотезы приводит к ряду качественных следствий.

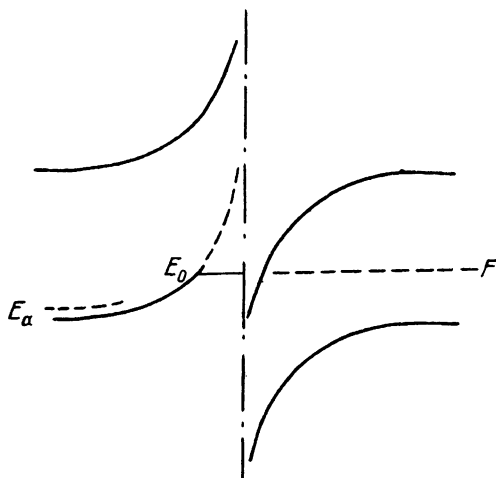


Рис. 1. Схема энергетических зон полупроводника при наличии деформационного возмущения. E_0 — положение деформационного уровня, F — положение уровня Ферми, E_a — положение уровня точечных акцепторов.

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 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 порядка 0.1 эВ над возмущенным положением потолка валентной зоны [10].

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, отмеченный в начале статьи.

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 на этом пути остается неясным механизм образования двумерной дырочной системы вдоль плоскости бикристалла. В самом деле, если изобразить в изотропном приближении распределение изознергетических линий потенциала $V(r, \varphi)$ (2), то возможность перекрытия дырочных либо электронных областей при выстраивании отдельных дислокаций в периодическую цепочку не очевидна (рис. 2). Однако более точная формулировка вопроса о деформационном потенциале, приведенная ниже, снимает и эту проблему.

2. Рассмотрим единичную 60-градусную дислокацию. Пусть для определенности ось Ox направлена вдоль вектора Бюргерса краевой компоненты 60-градусной дислокации, ось Oz параллельна направлению дислокационной линии $\langle 011 \rangle$, ось Oy перпендикулярна плоскости скольжения $\langle 111 \rangle$. В этом случае, согласно [9], тензор относительных деформаций ε_{ij} 60-градусной дислокации выражается через соответствующие тензоры относительных деформаций 90-градусной и винтовой компонент:

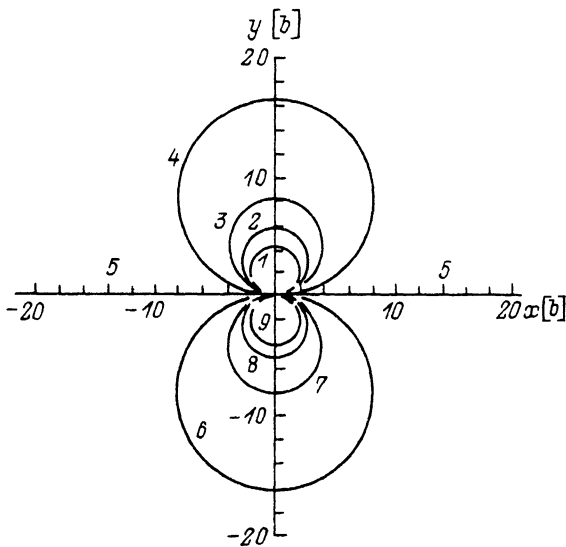


Рис. 2. Изолинии деформационного потенциала валентной зоны германия, определяемые полем упругих напряжений 60-градусной дислокации в гидростатическом приближении. $\Delta E_V \equiv V(r, \varphi) = -A \text{Sp } \varepsilon_{ij}$ (формула (2)).

краевая компонента

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \Lambda \frac{y}{(x^2 + y^2)^2} [2\nu(x^2 + y^2) - y^2 - 3x^2], \\ \varepsilon_{22} &= \Lambda \frac{y}{(x^2 + y^2)^2} [2\nu(x^2 + y^2) + x^2 - y^2], \\ \varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} &= \Lambda \frac{x}{(x^2 + y^2)^2} (x^2 - y^2), \quad \Lambda = \frac{\sqrt{3}b}{8\pi(1-\nu)}. \end{aligned} \quad (3)$$

винтовая компонента

$$\begin{aligned} \varepsilon_{13} = \varepsilon_{31} &= \frac{b}{8\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \\ \varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} &= \frac{b}{8\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}, \end{aligned} \quad (4)$$

где b — вектор Бюргерса 60-градусной дислокации, ν — коэффициент Пуассона. Деформационный потенциал в валентной зоне кубического кристалла определяется, согласно [10], соотношением

$$\begin{aligned} \Delta E_V = A \text{Sp } \varepsilon_{ij} \pm \sqrt{\frac{B^2}{2} [(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22})^2 + (\varepsilon_{22} - \varepsilon_{33})^2 + \dots + (\varepsilon_{33} - \varepsilon_{11})^2] +} \\ + \sqrt{D^2(\varepsilon_{12}^2 + \varepsilon_{23}^2 + \varepsilon_{13}^2)}. \end{aligned} \quad (5)$$

Знаки \pm отвечают расщеплению исходно вырожденных зон легких и тяжелых дырок валентной зоны кубических кристаллов. Значения констант деформационного потенциала взяты из [10, 11]. Для германия $A = -4$ эВ, $B = -2.7$ эВ, $D = 5$ эВ, $\nu = 0.2$.

Расчет линий постоянной энергии осуществляется численно. При этом из расчета исключалась область $r \leq 2b$, в которой континуальные определения ε_{ij}

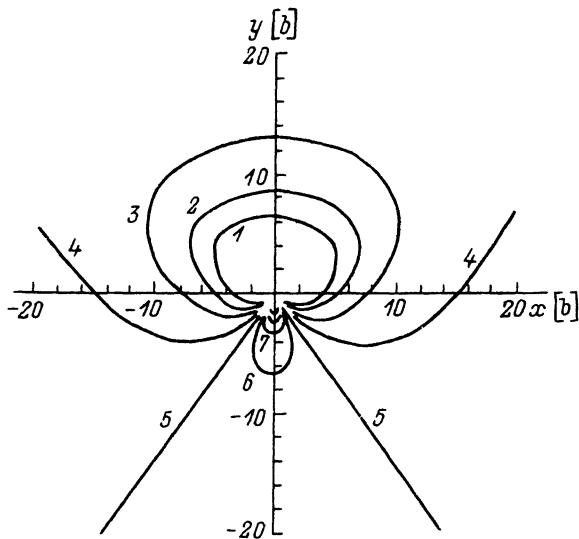


Рис. 3. Изолинии деформационного потенциала валентной зоны германия, определяемые полем упругих напряжений 60-градусной дислокации в соответствии с формулой (5) и знаком «+» в ней.

Кривые с номерами от 1 до 9 соответствуют ΔE_V от 0.1 до -0.1 эВ с шагом 0.025 эВ; ϵ — величина вектора Бюргерса 60-градусной дислокации (нумерация линий идентична рис. 2).

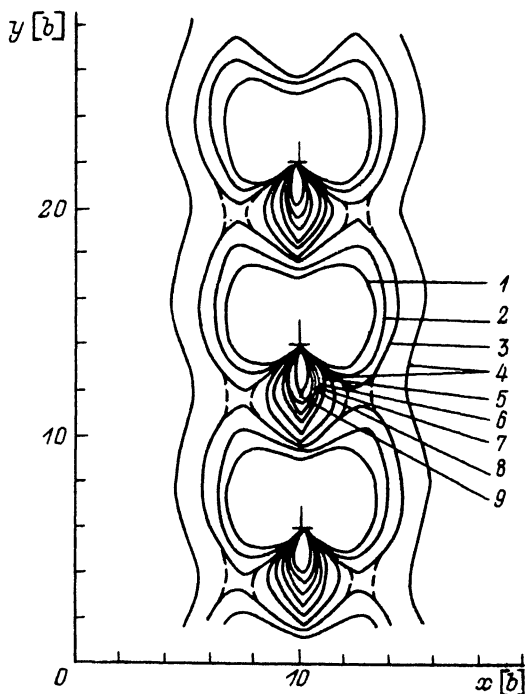


Рис. 4. Изолинии деформационного потенциала валентной зоны германия, определяемые путем упругих напряжений границы бикристалла, состоящей из одного ряда 90-градусных дислокаций.

Нумерация кривых идентична рис. 2, направление дислокационной линии $\langle 100 \rangle$, вектор Бюргерса $\langle 011 \rangle$.

(3), (4) имеют расходящийся вид. Учитывая, что размер ядра дислокации $r_0 = 3 - 5b$ [9], расчет по формулам (3)—(5), по-видимому, будет иметь смысл при $r > r_0$. На рис. 3 показана структура изолиний, рассчитанных по (5), для отдельной 60-градусной дислокации в германии. Очевидно, что область, отвечающая повышенной плотности дырок, занимает сектор с раствором 286° , большим 180° , что имеет место в гидростатическом приближении, $\Delta E_V = A \text{Sp} \epsilon_{ij}$ (рис. 2). При этом для $\Delta E_V > 0$ площадь, ограниченная изолинией, определяемой формулой (5), в 10 раз превышает соответствующую площадь в гидростатическом приближении.

В заключение остановимся на результатах, представленных на рис. 4. Здесь показана структура изолиний валентной зоны германия, искаженной полем упругих напряжений границы бикристалла, состоящей из одного ряда 90-градусных дислокаций. Расчет проводился по формуле (5) для случая знака «+» и значений тензора относительных деформаций, определенных в [10, 11]. При уменьшении расстояния d между дислокациями сначала возникает пара гофрированных поверхностей 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 5 (рис. 4), локализованную между дислокациями, сжимая изолинии с отрицательными энергиями (линии 6—9). На рис. 4 сплошными линиями показано решение при $d = 8b$. При $d = 7b$ изолинии 0.05 эВ трансформируются по схеме, показанной штрихом, и возникает дополнительная пара гофрированных поверхностей. 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 гофрированных поверхностей при $d = 5.5b$, что по формуле (1) соответствует углу разориентации бикристалла 10° . Экспериментальные исследования [5] показали, что металлическая проводимость границы бикристалла германия появляется при $\theta \geq 8^\circ$, что свидетельствует в пользу применимости предлагаемой модели металлической проводимости по состояниям деформационного потенциала дислокаций.

Список литературы

- [1] Schröter W. // Phys. Stat. Sol. 1967. V. 21. P. 211.
- [2] Осиньян Ю. А., Шевченко С. А. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 698—704.
- [3] Kolubakin A. I., Shevchenko S. A. // Phys. Stat. Sol. 1981. V. A63. P. 677.
- [4] Grazhulis V., Kveder V., Mukhina V. // Phys. Stat. Sol. 1977. V. 43a. P. 407.
- [5] Вул Б. М., Заварицкая Э. И. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. С. 1089—1099; Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 37. С. 571—575.
- [6] Заварицкая Э. И. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 40. С. 116—119; 1985. Т. 41. С. 231—233.
- [7] Landwehr G., Handler P. // J. Phys. Chem. Sol. 1982. V. 23. P. 891.
- [8] Гергель В. А., Сурис Р. А. // ФТП. 1982. Т. 16. С. 1925—1929.
- [9] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
- [10] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. С. 394, 597.
- [11] Baranskii P. I., Kolomoets V. V. // Phys. Stat. Sol. (b). 1970. V. 45. P. K55.

Институт физики твердого тела
РАН
Черноголовка
Московская обл.

Поступило в Редакцию
14 августа 1991 г.