

СКОПЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА РАССЕЯНИЕ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Артемьев В. А., Витовский Н. А., Михнович В. В.

В приближении потенциального рассеяния анализируется температурная зависимость подвижности носителей заряда, обусловленная рассеянием на электростатическом потенциале скоплений дефектов, связанном с плотностью заряда, локализованного на дефектах, и деформацией, создаваемой дефектами в скоплении. Показано, что при рассеянии на скоплениях нейтральных дефектов, когда потенциал определяется деформацией, подвижность может уменьшаться с повышением температуры. При рассеянии на скоплениях заряженных центров подвижность увеличивается с ростом температуры. Проанализирована правомерность использования приближения потенциального рассеяния для ряда случаев.

Точечные дефекты в объеме кристаллов часто распределяются неравномерно. При различных технологических операциях, например при термообработках или под действием облучения частицами высоких энергий, могут возникать скопления дефектов. Частным случаем таких скоплений являются области разупорядочения (ОР), выступающие в качестве эффективных центров рассеяния носителей заряда [1]. В дальнейшем мы для краткости будем говорить о рассеянии носителей заряда на ОР, имея в виду то, что все рассмотрение справедливо и для скоплений дефектов нерадиационного происхождения. Теоретическому исследованию подвижности носителей заряда, обусловленной рассеянием на ОР, посвящен ряд работ, в частности работы [2-7]. Существуют два подхода к описанию рассеяния на изолированных ОР:¹ подход, основанный на диффузионном приближении [2-5] (в этом случае электростатическое поле ОР вводят наравне с внешним в выражение для плотности тока носителей),² и подход, основанный на приближении потенциального рассеяния (в этом случае вводят в рассмотрение сечение рассеяния на ОР) [6, 7]. Первый подход оправдан, когда $L > L^*$, а второй, когда $L < L^*$ (L — линейный размер той части потенциала, где осуществляется рассеяние; L^* — длина пробега носителей относительно рассеяния на других, помимо ОР, несовершенствах решетки и фононах). Поскольку условия облучения и измерения, а также исходная степень легирования полупроводника варьируются на практике в довольно широких пределах, могут реализоваться оба случая ($L > L^*$ и $L < L^*$). Если диффузионное приближение проанализировано достаточно полно и строго [2-5], то во всех работах, посвященных исследованию потенциального рассеяния, используются два приближения: а) борновское приближение при определении дифференциального сечения рассеяния σ ; б) приближение Дебая—Хюккеля (полагается, что $L \approx l_D$, где l_D — дебаевская длина экранирования). Использование этих приближений позволяет получить наглядные результаты в виде аналитических формул, только если задана в аналитическом виде зависимость электростати-

¹ В том случае, когда электростатические поля отдельных ОР перекрываются, т. е. крупномасштабный потенциальный рельеф существует во всем объеме полупроводника, для исследования подвижности привлекают результаты теории протекания, как это сделано, например, в работах [8, 9].

² Впервые такой подход был использован в работе [10] при исследовании рассеяния носителей заряда на заряженных точечных дефектах.

ческого потенциала φ ОР от расстояния r до центра ОР ($r=0$ соответствует центру сферически симметричной ОР). Однако в произвольном случае (при различных условиях облучения и измерения) определить $\varphi(r)$ в аналитическом виде невозможно, т. е. потенциал может быть определен только численным интегрированием уравнения Пуассона. В результате борновская амплитуда рассеяния также может быть определена лишь численным интегрированием, что не позволяет получить результаты в виде аналитических формул. Более того, борновское приближение не позволяет определить величину L . Целями настоящей работы являются: 1) точное вычисление $\sigma(\cos \theta, \epsilon)$ (θ — угол рассеяния, ϵ — энергия носителя заряда) без использования борновского приближения; 2) вычисление характерной длины L без использования приближения Дебая—Хюккеля. Полученные результаты используются для расчетов температурной зависимости подвижности в полупроводниках, содержащих скопления дефектов.

Выражение для $\sigma(\theta, \epsilon)$ имеет вид [11]

$$\sigma(\theta, \epsilon) = |f(\theta, \epsilon)|^2, \quad (1)$$

где амплитуда упругого рассеяния $f(\theta, \epsilon)$ определяется следующим образом:³

$$f(\theta, \epsilon) = \frac{1}{2ik(\epsilon)} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l(\epsilon)} - 1) P_l. \quad (2)$$

Здесь P_l — полиномы Лежандра, δ_l — фазы рассеяния, $k(\epsilon)$ — абсолютное значение квазиволнового вектора носителя заряда. Существует ряд эквивалентных методов определения $\delta_l(\epsilon)$. Воспользуемся для определения $\delta_l(\epsilon)$ методом фазовых функций [12] (далее будет пояснено, почему для решения поставленной задачи используется именно этот метод), рассмотрим фазовое уравнение

$$\frac{d}{dr} \delta_l(r, \epsilon) = -\frac{2m}{\hbar^2 k(\epsilon)} \varphi(r) [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)]^2, \quad \delta_l(0, \epsilon) = 0. \quad (3)$$

Здесь $\delta_l(r, \epsilon)$ — фазовая функция, $\varphi(r)$ — потенциал ОР (рассматривается сферически симметричная ОР), $r=0$ соответствует центру ОР, $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$ — функции Риккати—Бесселя, m — масса носителей заряда (принято, что закон дисперсии параболический изотропный). Определив из уравнения (3) $\delta_l(r, \epsilon)$, найдем $\delta_l(\epsilon)$, содержащуюся в формуле (2): $\delta_l(r=\infty, \epsilon) = \delta_l(\epsilon)$, тем самым определим $\sigma(\theta, \epsilon)$. Зная σ , по соотношениям [13]

$$\tau^{-1}(\epsilon) = 2\pi n_{\text{ОР}} \sqrt{\frac{2m^* \epsilon}{m^4}} \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sigma(\theta, \epsilon) \sin \theta d\theta, \quad (4)$$

$$\mu = \frac{4e}{3m(k_0 T)^{3/2} \sqrt{\pi}} \int_0^\infty \epsilon^{3/2} \tau(\epsilon) \exp\left(-\frac{\epsilon}{k_0 T}\right) d\epsilon \quad (5)$$

определим подвижность μ . Здесь m^* — масса плотности состояний, T — температура кристалла, $n_{\text{ОР}}$ — концентрация ОР, e — заряд электрона.

Для определения потенциала ОР (а также скоплений дефектов нерадикационного происхождения) воспользуемся результатами работы [14], где показано, что в неполярных полупроводниках, в частности в Si, Ge, $\varphi(r)$ удовлетворяет уравнению

$$\Delta\varphi = -\frac{4\pi}{\epsilon_0} \left\{ \rho(\varphi) - \left(\frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) k \sum_i \Omega_i \Delta N_i(r) \right\}, \quad \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=0, \infty} = 0. \quad (6)$$

Здесь ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость; ρ — плотность заряда, локализованного на дефектах в ОР, легирующих примесях, электронах и дырках; $G_1, G_2 \approx$

³ Будет рассмотрен случай, когда знаки потенциала скопления и заряда основных носителей совпадают, т. е. имеет место отталкивание, поэтому будем полагать рассеяние упругим (в случае притяжения следовало бы учесть неупругий канал рассеяния — локализация носителей в поле скопления).

$\approx \epsilon/a$ — флексоэлектрические модули [15]; a — постоянная решетки; λ , G — упругие модули; k^{-1} — коэффициент всестороннего сжатия; $N_i(r)$ — концентрация дефектов i -го типа; $\Omega_i = \Delta V_i / (Vn)$; ΔV_i — изменение объема на один дефект i -го типа; $V = 4/3 \pi r^{*3}$; r^* — ковалентный радиус атома матрицы; n — концентрация атомов матрицы. Второе слагаемое в правой части уравнения (6) обусловлено неоднородной деформацией, вводимой в кристалл дефектами (из-за различия объемов дефектов и атомов матрицы), создающей поляризацию (флексоэлектрический эффект) [15, 16].

Остановимся на анализе приемлемости приближения потенциального рассеяния. Обозначим через ϵ_1 и ϵ_2 границы интервала энергий ($\epsilon_1 \leq \epsilon \leq \epsilon_2$), дающих основной вклад в интеграл (5), а через l_1 и l_2 — границы интервала значений l ($l_1 \leq l \leq l_2$), вносящих основной вклад в $|f(\theta, \epsilon)|^2$, т. е. в значения $\sigma(\theta, \epsilon)$ и тем самым — в значение интеграла (4). Далее, обозначим через $\Lambda_l(\epsilon)$ интервал r , на котором в основном набирается значение $\delta_l(r, \epsilon)$. Тогда $L = \max \{ \Lambda_l(\epsilon) : \epsilon_1 \leq \epsilon \leq \epsilon_2, l_1 \leq l \leq l_2 \}$. Величина L находится путем численных расчетов $\Lambda_l(\epsilon)$. В данной работе применяется метод фазовых функций для определения $\sigma(\theta, \epsilon)$ по той причине, что он позволяет определить также значение L .

Рассмотрим сначала важный случай, когда плотность заряда ОР мала, в частности практически не исследованные до настоящего времени условия рассеяния носителей заряда скоплениями нейтральных или электрически не активных центров. В этом случае справедливо

$$|p| \ll \left| \left(\frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) k \sum_i \Omega_i \Delta N_i(r) \right|. \quad (7)$$

При выполнении условия (7) потенциал ОР определяется поляризацией, создаваемой неоднородной деформацией:

$$\varphi(r) = \frac{4\pi}{\epsilon_0} \left\{ \left(\frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) k \sum_i \Omega_i N_i(r) \right\}. \quad (8)$$

На рисунке, *a* представлены расчетные зависимости μ , обусловленной рассеянием на областях разупорядочения, в n -Si от температуры кристалла. Для примера выбраны профиль концентрации дефектов (дивакансий) в ОР, соответствующий [17] (кривая 1), и модельный профиль (кривая 2):⁴

$$N(r) = N(r=0) [1 - (r/R)^2]. \quad (9)$$

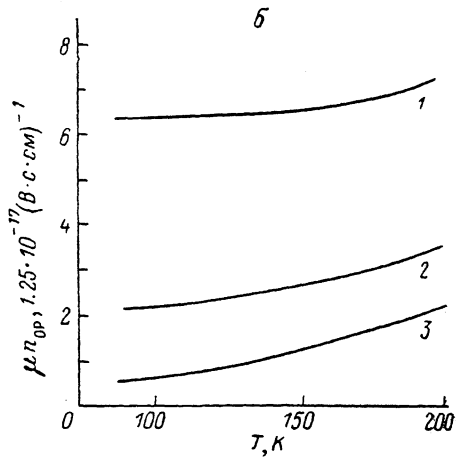
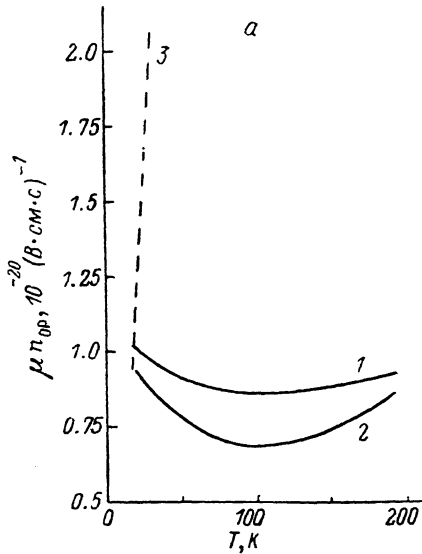
Различие между кривыми 1 и 2 демонстрирует степень влияния профиля концентрации дефектов на зависимость $\mu(T)$. Важно подчеркнуть, что зависимость $\mu(T)$ существует [формула Эргинсоа, обычно используемая при рассмотрении вопроса о рассеянии на скоплениях нейтральных центров, зависимости $\mu(T)$ не дает]. Кроме того, существует интервал T , где μ уменьшается с ростом температуры.⁵ Роль этого механизма рассеяния по сравнению с другими может быть легко оценена, например, для условий реакторного облучения, поскольку на рисунке представлены абсолютные величины $\mu_{\text{ОР}}$. Например, сравнение с рассеянием на ионах (рис. 1, *a*, кривая 3) показывает, что нейтральные скопления рассматриваемых размеров оказываются значительно более сильными рассеивающими центрами, чем одиночные ионы практически при температурах $T > 50$ К. Лишь при $T = 20$ К сечение рассеяния на ионах (в расчете на один ион) сравнивается с сечением на нейтральных скоплениях (в расчете на одно скопление). Количественные расчеты показывают, что для рассмотренных ситуаций $\max \{ \Lambda_l(\epsilon) \} < 10^{-6}$ см. Оценка величины L^* в случае, когда рассеяние на фонах является доминирующим, показывает, что $L^* \geq 3 \cdot 10^{-6}$ см, т. е. приближение потенциального рассеяния оправдано. Косвенным подтверждением по-

⁴ Рассматриваются ОР, создаваемые реакторными нейтронами: $R \approx 10^{-6}$ см, полное число дефектов в скоплении ≈ 150 [18, 19].

⁵ Если выбрать профиль концентрации дефектов в виде ступеньки, то можно получить $\mu \sim T^{-1/2}$ во всем рассмотренном здесь интервале T .

лученных (вше) результаты являются, в частности, экспериментальные зависимости μ (T) при исследовании рассеяния носителей на ОР в кремнии [18] и в германии [19] в условиях высокого и низкого уровней инжекции носителей заряда. Вывод о том, что в определенных условиях подвижность, обусловленная рассеянием на скоплениях дефектов, может уменьшаться с повышением температуры, справедлив, по-видимому, не только для полупроводников с центром симметрии, но и для пьезополупроводников [для них необходимо в правой части уравнения (6) учесть также слагаемое, обусловленное пьезоэффектом]. Так, авторы работ [20-23] пришли к выводу в результате анализа своих экспериментальных данных, что парциальная подвижность, обусловленная рассеянием на скоплениях дефектов в GaAs и InP, падает с повышением температуры.

Рассмотрим ситуацию, когда условие (7) не выполняется, т. е. плотность заряда скопления велика. В этом случае потенциал ОР будет существенно бо-



Расчетная зависимость парциальной подвижности μ_{OP} , определяемой рассеянием носителей заряда на ОР (1, 2) и рассеянием носителей заряда на ионах примеси μ_T (3), от температуры при выполнении (а) и при нарушении (б) условия (7).

n_0 , см $^{-3}$: а) $5 \cdot 10^{15}$; б) 1 — 10^{16} , 2 — 10^{15} , 3 — $5 \cdot 10^{15}$; а) расчет: 1 — для ОР, создаваемых при нейтронном облучении [17], 2 — с модельным профилем (9) концентрации дефектов в ОР, 3 — $\mu_T(T)$.

лее плавным, чем потенциал, определяемый соотношением (8). Чисто электростатическая задача (без учета деформаций) о расчете потенциала ОР неоднократно рассматривалась в литературе, в частности в работах [24, 25]. Количественные расчеты свидетельствуют о том, что при нарушении условия (7) в рассмотренном здесь интервале температур (20—200 К) для уровней легирования $n_0 \geq 10^{15}$ см $^{-3}$ приближение потенциального рассеяния оправдано. На рис. 1, б представлены расчетные зависимости $\mu(T)$, обусловленной рассеянием носителей заряда на ОР, после облучения реакторными нейтронами n -Si с различным уровнем легирования.

Сопоставление а и б (см. рисунок) показывает, что нарушение условия (7) приводит к резкому (на несколько порядков величины) уменьшению парциальной подвижности электронов, поскольку при большой плотности заряда скопления радиус рассеивающей области определяется размерами области пространственного заряда, которые существенно превосходят размеры скопления.

При увеличении концентрации n_0 (и соответствующем уменьшении радиуса экранирования) подвижность возрастает. Это, естественно, объясняется уменьшением эффективного радиуса рассеивающих областей.

⁶ Уравнение (6) линеаризовали методом Ньютона—Канторовича, разностная схема получена интегроинтерполяционным методом и реализована методом подгонки [26]. Уравнение (3) решалось методом Рунге—Кутты четвертого порядка [27].

Значения констант, использованных в расчетах: $\lambda = 0.64 \cdot 10^{11}$ Па, $G = 0.79 \cdot 10^{11}$ Па, $k = 0.98 \cdot 10^{11}$ Па [28], $m = 0.3 m_0$, $m^* = 1.09 m_0$ [13], m_0 — масса электрона. Для оценки Ω_i [см. уравнение (6)] принимали, что ковалентный радиус дивакансий равен двум ковалентным радиусам вакансий (r_V^*), а $r_V^* \simeq 0.95 r_{Si}^*$ [29]; ковалентный радиус атома кремния $r_{Si}^* = 1.17 \text{ \AA}$ [30].

Таким образом, в данной работе предложен метод расчета парциальной подвижности носителей заряда, связанной с рассеянием на скоплениях дефектов; показано, что температурная зависимость подвижности, определяемой рассеянием на скоплениях, качественно различна для скоплений с малой и большой плотностью заряда; установлено, что при расчете подвижности, обусловленной рассеянием на скоплениях нейтральных дефектов, нельзя применять обычно используемую формулу Эргинсона.

Список литературы

- [1] Физические процессы в облученных полупроводниках / Под. ред. Л. С. Смирнова. Новосибирск, 1977. 256 с.
- [2] Шаховцов В. И., Шаховцова С. И., Шпинар Л. И., Ясковец И. И. // ФТП. 1975. Т. 9. В. 11. С. 2200—2202.
- [3] Шаховцов В. И., Шаховцова С. И., Шпинар Л. И., Ясковец И. И. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 10. С. 1967—1971.
- [4] Шпинар Л. И., Ясковец И. И. // Радиационные эффекты в твердых телах. Киев, 1977. С. 139—149.
- [5] Шпинар Л. И., Ясковец И. И. // ФТТ. 1984. Т. 26. В. 6. С. 1725—1730.
- [6] Flanagan T. M. // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1968. V. NS-15. N 6. P. 42—45.
- [7] Джандиери М. Ш., Церпвадзе А. А. // ФТП. 1974. Т. 8. В. 4. С. 781—782.
- [8] Шик А. Я. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 9. С. 1758—1764.
- [9] Безлюдный С. В., Колесников Н. В., Шик А. Я. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 10. С. 1906—1908.
- [10] Пекар С. И. // ФТТ. 1966. Т. 8. В. 4. С. 1115—1121.
- [11] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. // Квантовая механика. М., 1963. 702 с.
- [12] Бабинов В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М., 1976. 287 с.
- [13] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М., 1977. 672 с.
- [14] Артемьев В. А., Михнович В. В. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 2. С. 243—247.
- [15] Иденбом В. Л., Логинов Е. Б., Осипов М. А. // Кристаллография. 1981. Т. 25. В. 6. С. 1157—1162.
- [16] Машкевич В. С., Голыго К. Б. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. В. 3. С. 520—525.
- [17] Артемьев В. А., Михнович В. В., Титаренко С. Г. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 4. С. 750—753.
- [18] Акилов Ю. З. // Автореф. канд. дис. Ташкент, 1974.
- [19] Lindhard J., Nielson V., Scharff M. // Dan. Vid Selsk. Mat. Fys. Medd. 1963. V. 33. N 10. P. 1—42.
- [20] Кузнецов В. И., Лугаков П. Ф., Шуша В. В. // Деп. ВИНТИ АН СССР. М., 1978. № 2627.
- [21] Weisberg L. R. // J. Appl. Phys. 1962. V. 33. N 5. P. 1817—1821.
- [22] Витовский Н. А., Лагунова Т. С., Машовец Т. В., Рахимов О. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 9. С. 1593—1596.
- [23] Витовский Н. А., Лагунова Т. С., Рахимов О. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 9. С. 1624—1628.
- [24] Крамер-Агеев Е. М., Миронов Ю. А. // ФТП. 1975. Т. 9. В. 12. С. 2266—2271.
- [25] Зянченко В. Ф., Карпин Ю. В. // ЖТФ. 1982. Т. 52. В. 8. С. 1618—1622.
- [26] Самарский А. А. // Теория разностных схем. М., 1977. 656 с.
- [27] Корн Г., Корн Т. // Справочник по математике. М., 1978. 831 с.
- [28] Акустические кристаллы / Под ред. М. П. Шаскольской. М., 1982. 632 с.
- [29] Окулич В. И. // Автореф. канд. дис. Горький, 1976.
- [30] Киттель Ч. // Введение в физику твердого тела. М., 1978. 791 с.