ШОТТКОВСКОЕ ЭКРАНИРОВАНИЕ ЗАРЯЖЕННОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТЕНКИ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Ефанов А. В.

Найдено распределение потенциала в слое Шоттки, окружающем стенку из заряженных краевых дислокаций в полупроводнике. Нелинейная задача экранирования сведена к нахождению формы границы слоя. Получены точные решения, описывающие форму границы и распределение потенциала. Рассчитаны зависимости высоты потенциального барьера для протекания тока сквозь границу и заряда дислокаций от периода стенки и концентрации примесей.

С давних пор считается, что потенциальные барьеры на границах зерен в полупроводнике или на границе бикристалла обусловлены захватом электронов на болтающиеся связи краевых дислокаций, образующих границу [1]. Такие представления «навевают» идею [2] моделировать эффекты неоднородностей потенциального рельефа в полупроводниках на примере дислокационной стенки. Дело в том, что на границах зерен дислокации выстраиваются в «гребенку» (дислокационную стенку) с периодом, определяемым углом разориентации кристаллитов. Слой Шоттки вблизи границы оказывается периодически модулированным по толщине. Соответственно неоднородным получается потенциальный рельеф в плоскости стенки.

В работе [3] предпринималась попытка обнаружить такой эффект. В ней проводились эксперименты на образце, содержащем дислокационную стенку с отношением периода a к толщине слоя Шоттки L порядка 0.1. По измерениям вольтамперных характеристик находилась высота барьера для протекания тока сквозь стенку. Анализируя зависимости с помощью одномерной теории проводимости межкристаллитного барьера, авторы [3] пришли к выводу, что с хорошей точностью стенку можно рассматривать как равномерно заряженную плоскость. Ввиду малости отношения a/L гофрировка слоя Шоттки была слишком слабой. Соответственно оказывались малыми поправки к показателю активационной экспоненты, описывающей проводимость барьера [4].

В дальнейшем экспериментальные работы в указанном направлении не велись. Одной из причин этого, вероятно, являлась недостаточная разработанность теории. До последнего времени не удавалось аналитически описывать потенциальный рельеф системы в наиболее интересном случае, когда гофрировка слоя Шоттки достаточно велика.

В данной работе предлагается точное решение задачи о форме слоя Шоттки вблизи дислокационной стенки и распределении потенциала в нем. С помощью полученных результатов находится степень заполнения дислокационных уровней электронами в зависимости от расстояния между дислокациями и концентрации примесей, рассчитывается высота барьера для протекания тока сквозь дислокационную стенку.

1. Метод решения задач о шоттковском экранировании одномерно-протяженных источников заряда в полупроводнике был развит в работах [5, 6]. В нем рассматривался случай односвязанной области пространственного заряда. В интересующей нас ситуации метод оказывается непосредственно непри-

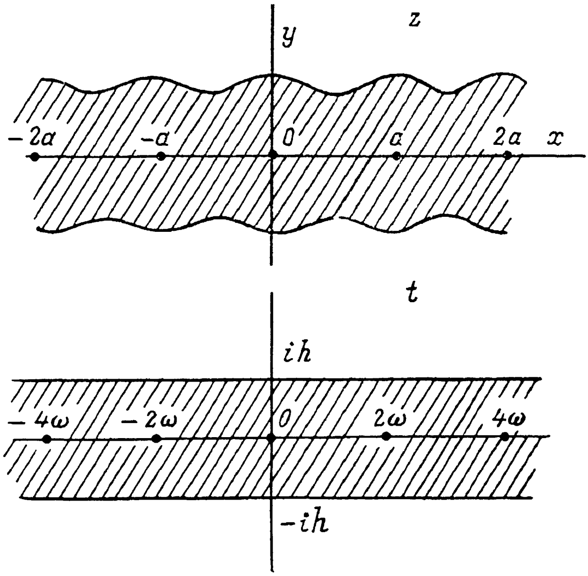
менимым, поскольку слой Шоттки вблизи дислокационной стенки является двухсвязанным. Используем здесь другой подход.

Выберем направления оси x вдоль цепочки дислокаций, а оси y — по нормали к плоскости дислокационной стенки. Введем комплексные величины $z=x+iy$ и $\mathcal{E}=E_x-iE_y$, где $\mathbf{E}$ — электрическое поле. Дислокации будем рассматривать как бесконечно тонкие отрицательно заряженные нити, пересекающие плоскость xy в точках $z_n=an$, где a — период цепочки, $n=0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ (см. рисунок).

Согласно [6], поле внутри области пространственного заряда записывается в виде

$$\mathcal{E}=2\pi\sigma\left[\bar{z}-w(z)\right], \tag{1}$$

где $\sigma=eN_i/\varepsilon$, N_i — концентрация ионизованных примесей, ε — диэлектрическая проницаемость, e — абсолютная величина заряда электрона, $\bar{z}$ — комплекс-



но-сопряженное значение z. Функция $w(z)$ имеет в точках z_n простые полюсы, отвечающие полю линейного заряда,

$$\mathcal{E}_n=-\frac{2q}{\varepsilon}\frac{1}{z-z_n}, \tag{2}$$

где q — абсолютная величина линейной плотности заряда на дислокации. Задача состоит в нахождении как функции $w(z)$, так и неизвестной границы, где обращается в нуль электрическое поле.

Как показано в [5, 6], проблема в конечном счете сводится к построению определенного конформного отображения некоторой стандартной области (например, единичного круга) на искомую область. Все остальные величины — поля и потенциалы — выражаются через функцию отображения. Для обобщения метода [5] на случай двухсвязанных областей нам необходимо установить общий вид отображения.

Начнем с построения функции

$$p(z)=w(z)-z. \tag{3}$$

Последняя имеет те же особенности, что и $w(z)$. На границе слоя Шоттки она удовлетворяет соотношению

$$p(z)=z-\bar{z}=2iy, \tag{4}$$

т. е. является чисто мнимой. Пусть некоторая функция $z=f(t)$ осуществляет конформное отображение полосы $|\operatorname{Im} t| \leqslant h$ в комплексной плоскости вспомогательной переменной t на искомую область (рисунок). Функция $p(t)=p[f(t)]$ тогда удовлетворяет условию

$$\operatorname{Re} p(t)=0, \quad \operatorname{Im} t=\pm h. \tag{5}$$

В силу конформности отображения функция $p(t)$, так же как и $p(z)$, имеет внутри области только простые полюсы в точках, определяемых отображением $z_n=f(t_n)$. Вычеты в них даются выражением (2)

$$\operatorname{Res} p(t_n)=q/[\pi\sigma\varepsilon f'(t_n)]. \tag{6}$$

Рассмотрим задачу о построении функции $p(t)$ по заданному распределению ее полюсов и значениям вычетов при условии ограниченности регулярной части функции внутри полосы. Разместим полюсы в равноотстоящих точках вещественной оси $t_n=2\omega n$, где ω — некоторый положительный параметр. Такой выбор зафиксирует нам вид функции $f(t)$. Вычет (6) будем считать заданным числом.

Поставленная задача оказывается линейной. Решение ее имеет простой физический смысл. Если рассматривать величину $\psi=\operatorname{Re} p(t)$ как электрический потенциал, то сингулярные части $p(t)$ представляют собой потенциалы точечных диполей. Определение функции $p(t)$ означает нахождение потенциала периодической цепочки диполей, расположенных между двумя заземленными пластинами конденсатора. Действительно, комплексное поле одного диполя имеет вид

$$p_n(t)=c/(t-t_n),$$

где c — значение вычета (6) (вещественное, как показывает конечный результат). Краевое условие (5) обеспечивается при добавлении к источнику потенциалов изображений [7]

$$p_{n,\,m}=(-1)^{|m|}c/(t-t_{n,\,m}), \tag{7}$$

где $t_{n,m}=t_n+\omega' m$, $\omega'=2ih$, $m=\pm1,\ \pm2,\ \ldots$

Полученная функция $p(t)$ оказывается двоякопериодической с периодом по вещественной оси 2ω, по мнимой — $2\omega'$. Единственными ее особенностями являются простые полюсы. Согласно общей классификации [8], функция $p(t)$ относится к эллиптическим функциям второго порядка. Она выражается через ζ-функцию Вейерштрасса $\zeta(t)=\zeta(t/\omega,\ \omega')$ [8]

$$p(t)=c[\zeta(t)-\zeta(t+\omega')]+b, \tag{8}$$

где b — произвольная мнимая постоянная (решение определено с точностью до такой постоянной). Величина b находится из физических соображений. Электрическое поле $\mathcal{E}$ должно обращаться в нуль в точке посередине между дислокациями. Это накладывает требование $p(t)=0$ при $t=\omega$. Из него следует, что $b=c\eta'$, где $\eta'=\zeta(\omega')$ — чисто мнимая величина.

Таким образом, получается искомое выражение для $p(t)$. Вид функции конформного отображения $z=f(t)$ восстанавливается по ее краевому значению (4) [9]. Аналитическая внутри полосы функция удовлетворяет на границе условию

$$\operatorname{Im} f(t)=-\frac{t}{2}p(t), \quad \operatorname{Im} t=\pm h. \tag{9}$$

Решение краевой задачи дается функциями

$$f(t)=w(t+\omega'),$$
$$w(t)=c\left[\zeta(t)-\frac{\eta'}{\omega'}t\right], \tag{10}$$

где $f(0)=0$.

Приведенные выражения представляют собой искомый результат. «Нелинейная» часть задачи переносится на определение введенных выше параметров c, $\omega'=2ih$, ω. Первое уравнение для их нахождения получается из условия периодичности системы. При трансляции $t \to t+2\omega$ координата z должна получать приращение на период цепочки a. Из (10) имеем

$$w(t+2\omega) = w(t) + 2c(\eta\omega' - \eta'\omega)/\omega', \tag{11}$$

где $\eta = \zeta(\omega)$. С помощью тождества Лежандра $\eta\omega' - \eta'\omega = \pi i/2$ находим

$$w(t+2\omega) - w(t) = \pi i c/\omega' = a. \tag{12}$$

Другое уравнение получается из условия на вычеты (6)

$$c = q/(\pi\sigma\varepsilon f'(t_n)). \tag{13}$$

Подставляя сюда выражение (10) для функции $f(t)$, находим

$$c^2 = -q/(\pi\sigma)(\wp(\omega') + \eta'/\omega')^{-1},$$

где $\wp(t) = -\zeta'(t)$ — функция Вейерштрасса [8]. Исключив отсюда постоянную c с помощью равенства (12), получаем уравнение для определения параметра ω'

$$(\omega')^2(\wp(\omega') + \eta'/\omega') = \pi q/(\sigma\varepsilon a^2). \tag{14}$$

Константа ω в этом уравнении остается произвольной. Выберем $\omega = 1$.

2. Приведем в этом пункте сводку основных результатов. Выражения (10) удобны для демонстрации аналитической структуры решений. Для практических целей более предпочтительна их запись через эллиптические функции Вейерштрасса [8]

$$\begin{aligned} z &= f(t) = c\mathrm{K}\,[E(\mathrm{K}t) + (\pi/2 - \mathrm{K}'\mathrm{E})/\mathrm{K}' \cdot t], \\ w(t) &= f(t) + c\mathrm{K}\,\mathrm{cn}(\mathrm{K}t)\,\mathrm{dn}(\mathrm{K}t)/\mathrm{sn}(\mathrm{K}t), \end{aligned} \tag{15}$$

где модуль эллиптических интегралов k определяется с помощью уравнения (14), принимающего вид

$$\mathrm{E}'\mathrm{K}' = \pi q/(\sigma\varepsilon a^2), \tag{16}$$

где $\mathrm{E}' = \mathrm{E}(k')$, $\mathrm{K}' = \mathrm{K}(k')$, $k' = \sqrt{1-k^2}$. Параметры ω' и c определяются равенствами

$$\omega' = i\mathrm{K}'/\mathrm{K}, \quad c = a\mathrm{K}'/(\pi\mathrm{K}). \tag{17}$$

Параметрическое уравнение верхней границы слоя Шоттки получается из (15) при $t = u + \omega'/2$, где $-\infty < u < \infty$,

$$z = (a/\pi)\,\mathrm{K}'\,[E(u\mathrm{K}) + (\pi/2 - \mathrm{K}'\mathrm{E})/\mathrm{K}' \cdot u + i\,\mathrm{dn}(u\mathrm{K})]. \tag{18}$$

Здесь в отличие от предыдущих формул все функции берутся по модулю $k_1 = 2\sqrt{k}/(1+k)$. Исключив параметр u в выражении (18), получаем явную зависимость

$$x(y) = (a/\pi)\,[(\mathrm{E}' - \mathrm{K}')\,F(\alpha, k_1) + \mathrm{K}'E(\alpha, k_1)], \tag{19}$$

где $\alpha = \arcsin\{[1 - (\pi y/a\mathrm{K}')^2]^{1/2}/k_1\}$, $F(\alpha, k_1)$ — неполный эллиптический интеграл первого рода. Координата y в этом выражении меняется в пределах $k_1'\mathrm{K}' \leqslant \pi y/a \leqslant \mathrm{K}'$.

Комплексное электрическое поле $\mathscr{E}$ в области пространственного заряда как функция вспомогательной переменной t определяется формулами (1) и (15). Явную зависимость $\mathscr{E}(x, y)$ получить не удается, так как переменная t через z аналитически не выражается.

Потенциал в слое Шоттки находится по заданному электрическому полю простым контурным интегрированием [5]

$$\begin{aligned} \varphi = 2\pi\sigma\Biggl\{-y^2 + \left(\frac{a\mathrm{K}'}{\pi}\right)^2 \Biggl\{\frac{1+k^2}{4} + \frac{\mathrm{E}'\ln k}{2\mathrm{K}'} + \\ + \mathrm{Re}\left[\frac{\mathrm{E}'}{\mathrm{K}'}\ln\mathrm{sn}(\mathrm{K}t) - \frac{k^2}{2}\mathrm{sn}^2(\mathrm{K}t)\right]\Biggr\}\Biggr\}. \end{aligned} \tag{20}$$

Выражение для него также получается неявным по отношению к переменной z.

В общем случае координатные зависимости полей определяются лишь численными методами. Асимптотическое значение потенциала на малых расстояниях $r \ll a$ от оси дислокации можно получить в аналитическом виде. Для этого достаточно разложить правую часть (15) по малости $|t| \ll 1$ вблизи точки $t=0$ и выразить t через z. Подстановка результата в (20) дает

$$\varphi(\mathbf{r}) \approx \frac{2q}{\varepsilon}\left[\ln\left(\frac{r}{a}\right)+\ln\left(\frac{\pi\sqrt{k}}{\mathrm{E}'}\right)+\frac{(1+k^2)\,\mathrm{K}'}{4\mathrm{E}'}\right]. \tag{21}$$

3. Найдем зависимость заряда дислокаций от расстояния между ними и концентрации примесей. При заданном положении уровня электрона на дислокации степень его заполнения определяется условием [4]

$$e\,|\varphi(r_0)| = E_F - E_d = \Delta E, \tag{22}$$

где E_d — глубина уровня, отсчитанная от дна зоны проводимости, E_F — положение уровня Ферми, $\varphi(r_0)$ — значение кулоновского потенциала (20) вблизи линии дислокации на расстояниях r_0 порядка размера волновой функции связанного состояния.

В случае, когда заряд электронов, захваченных на болтающиеся связи, достаточно велик, вблизи ядра дислокации возникает инверсия типа проводимости. Помимо локализованного отрицательного заряда вблизи линии дислокации образуется цилиндр из зонных дырок с радиусом r_0 порядка боровского. Описание такой ситуации в модели Томаса—Ферми [10] также дает условие вида (22), где вместо энергии ΔE выступает ширина запрещенной зоны.

Используя асимптотику потенциала (21) в области $r_0 \ll a$, из формулы (22) получаем искомое уравнение на заряд q

$$\frac{2q}{\varepsilon}\left\{\frac{\pi(1+k^2)}{4(\mathrm{E}')^2}\frac{q}{\sigma\varepsilon a^2}+\ln\left(\frac{a\mathrm{E}'}{2\pi r_0}\right)+\frac{1}{2}\left[\ln\left(\frac{4}{k}\right)-\frac{(1+k^2)\,\mathrm{K}'}{\mathrm{E}'}\right]\right\}=\frac{\Delta E}{e}. \tag{23}$$

Вспомогательный параметр k исключается из него с помощью формулы (16), рассматриваемой как уравнение для определения k.

Уравнение (23) является трансцендентным и разрешить его можно только численно. В случае сильной гофрировки слоя Шоттки удается тем не менее получить приближенную формулу. В этом пределе $k \to 1$. Имеют место следующие оценки. Во всей области $0 \leqslant k \leqslant 1$ численный коэффициент в первом слагаемом в фигурных скобках изменяется в пределах от 0.64 до 0.78. Не совершая большой ошибки, можно подставить в него $k=1$. То же самое можно сделать в аргументе «большого» логарифма в следующем члене. Слагаемое в квадратных скобках не превышает 0.33. Взяв его значение при $k=1$, в результате получаем квадратное уравнение для определения заряда. Оно дает

$$q=\frac{\pi\sigma\varepsilon a^2}{4}\left\{\left[\ln^2\left(\frac{a}{2e_{\text{н}}r_0}\right)+\frac{4\Delta E}{\pi e\sigma a^2}\right]^{1/2}-\ln\left(\frac{a}{2e_{\text{н}}r_0}\right)\right\}, \tag{24}$$

где $e_{\text{н}}$ — основание натурального логарифма.

Формула (24) оказывается точной в случае, когда период a достигает своего максимального значения, равного удвоенному радиусу цилиндра Рида $R=(q/\pi\sigma\varepsilon)^{1/2}$. В области $R \leqslant a \leqslant 2R$ сравнение результатов, даваемых этой приближенной формулой для кремния при $r_0/R=10^{-3}$, с данными численных расчетов по точным формулам (23) и (16) показывает, что различие между ними не превышает нескольких процентов. Хорошее согласие обусловливается тем, что при достаточно большой величине логарифма под радикалом в (24) заряд q зависит от расстояния a лишь логарифмически.

С помощью полученных результатов можно рассчитать высоту потенциального барьера для протекания слабого тока через границу кристаллитов. Его величина определяется кулоновским потенциалом φ_0 в точке посередине между соседними дислокациями. Из формулы (20) при $t=1$ для него находим

$$\varphi_0=\frac{q}{\varepsilon}\left[\frac{(1-k^2)\,\mathrm{K}'}{2\mathrm{E}'}+\ln k\right], \tag{25}$$

где k дается уравнением (16). Совместно с (23) это выражение описывает зависимости высоты барьера от контролируемых в эксперименте параметров. Эти зависимости можно найти лишь численными методами.

Рассмотрим предельные случаи. В работе [4] исследовался случай $a \ll L$, где L — толщина слоя Шоттки. В этом пределе можно было пренебречь гофрировкой слоя пространственного заряда. Результаты [4], естественно, воспроизводятся с помощью формул (25) и (16). В ситуации, когда слой Шоттки вырождается в совокупность цилиндров Рида, высота барьера стремится к нулю по закону

$$\varphi_0 \approx -\frac{16\sqrt{2}}{3}\frac{q_0}{\varepsilon}\left(\frac{q-q_0}{q_0}\right)^{3/2} \tag{26}$$

при $q \geqslant q_0 = \pi e N_i a^2/4$. Зависимость (26) демонстрирует неаналитическое поведение высоты барьера при малом изменении заряда дислокации q вблизи порогового значения q_0, когда канал для проводимости сквозь границу полностью открывается.

В заключение отметим, что результаты работы могут быть использованы не только для решения физических задач, но и для практических целей. Полученные выражения позволяют аналитически рассчитывать слой Шоттки в полупроводнике, на поверхности которого имеется периодическая система узких металлических электродов (в приближении, обсуждаемом в [6]).

Автор благодарит М. В. Энтина за обсуждения.

Список литературы

[1] Матаре К. Электроника дефектов в полупроводниках. М., 1974. 463 с.
[2] Дощанов К. М., Шамирзаев С. М. // ФТП. 1978. Т. 12. В. 12. С. 2328—2331.
[3] Еременко В. Г., Фарбер Б. Я., Якимов Е. Б. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 7. С. 1313—1315.
[4] Велиев З. А., Шикин В. Б. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 5. С. 858—863.
[5] Ефанов А. В., Энтин М. В. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. В. 4. С. 1299—1303.
[6] Ефанов А. В., Энтин М. В. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 11. С. 2013—2017.
[7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М., 1982. 624 с.
[8] Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции: эллиптические и автоморфные функции. М., 1967. 300 с.
[9] Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. М., 1965. 716 с.
[10] Гергель В. А., Сурис Р. А. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 11. С. 1925—1929.

Институт физики полупроводников СО АН СССР
Новосибирск

Получена 26.04.1989
Принята к печати 23.01.1990