

## О ВЛИЯНИИ ДЕФОРМАЦИИ НА ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ОБЛАСТЕЙ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Артемьев В. А., Михнович В. В.

В приближении изотропной среды получено выражение для флексоэлектрического потенциала областей разупорядочения (ОР), вводимых в полупроводники облучением тяжелыми частицами. Показано, что для определения полного потенциала ОР необходимо рассматривать уравнение Пуассона с плотностью заряда, отличной от обычно используемой. На примере кремния проиллюстрировано влияние флексоэлектрического потенциала на рекомбинационную эффективность ОР.

Электрофизические свойства областей разупорядочения (ОР) в полупроводниках в значительной мере определяются электростатическим потенциалом ОР и деформацией в ОР [1, 2]. Деформация возникает, в частности, из-за различия в значениях ковалентных радиусов дефектов в ОР и атомов матрицы. Электростатический потенциал обусловлен плотностью заряда, локализованного на дефектах, легирующих примесях и свободных носителях. Известно, однако, что в неоднородно деформированном теле возникает поляризация, пропорциональная градиенту деформации (флексоэлектрический эффект) [3, 4]. В результате возникает дополнительный потенциал в ОР, который в ряде актуальных случаев может доминировать. В данной работе получено выражение для флексоэлектрического потенциала ОР в приближении изотропной среды. На примере кремния показано влияние флексоэлектрического потенциала на рекомбинационную эффективность ОР.

Условие равновесия упругого тела, содержащего области разупорядочения с концентрацией дефектов в ОР  $C(r)$  ( $r=0$  соответствует центру ОР), имеет вид [5]

$$\partial D_i / \partial x_i = 4\pi\rho(r), \quad \partial \sigma_{ik} / \partial x_k = 0. \quad (1)$$

Здесь  $D_i$  — компонента вектора электрической индукции,  $\sigma_{ik}$  — тензор механических напряжений,  $\rho(r)$  — плотность заряда,  $x_i$  — соответствующая координата. Для определения  $D_i$  и  $\sigma_{ik}$  выпишем выражение для плотности свободной энергии  $F$  [5-7] в кристаллографической системе координат (пьеzополупроводники не рассматриваются)

$$F = F_0 + \frac{1}{2} \lambda_{klij} u_{kl} u_{ij} - O_{kl} u_{kl} C(r) - \frac{1}{8\pi} \epsilon_{ij} E_i E_j - \frac{1}{2} E_i (g_{iklm} u_{kl, m} + g_{ilk m} u_{lk, m}) + \frac{1}{2} E_{i, m} (g_{iklm} u_{kl} + g_{ilk m} u_{lk}), \quad (2)$$

где  $\lambda_{klij}$  — тензор упругих модулей,  $u_{kl}$  — тензор деформации,  $\epsilon_{ij}$  — диэлектрический тензор,  $g_{iklm}$  — тензор флексоэлектрических модулей,  $E_i$  — компонента вектора электрического поля,  $O_{kl} = K \Omega_{kl}$  [8],  $K^{-1}$  — коэффициент всестороннего сжатия,  $\Omega_{kl}$  — тензор интенсивности центров дилатации; индексы после запятой означают дифференцирование. Используя соотношение (2), а также связь между  $D_i$ ,  $\sigma_{ik}$  и  $F$  в виде [5]

$$D_i = -4\pi \left( \frac{\partial F}{\partial E_i} \right)_{T, u_{kl}, c}, \quad c_{kl} = \left( \frac{\partial F}{\partial u_{kl}} \right)_{T, E, c}, \quad (3)$$

получим систему уравнений

$$\Delta\varphi = -\frac{4\pi}{\varepsilon} \rho(\mathbf{r}) + \frac{4\pi}{\varepsilon} (G_1 + 2G_2) \Delta \operatorname{div} \mathbf{u}, \quad (4)$$

$$(\lambda + G) \nabla \operatorname{div} \mathbf{u} + G \Delta \mathbf{u} - (G_1 + 2G_2) \nabla \Delta\varphi = K \Omega_0 \nabla C(\mathbf{r}).$$

При получении системы (4) учитывалось, что для изотропной среды [5, 6, 9]

$$\lambda_{iklm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{lm} + G (\delta_{il} \delta_{mk} + \delta_{im} \delta_{kl});$$

$g_{iklm}$  имеет аналогичный вид с заменой  $\lambda$  и  $G$  на  $G_1$ ,  $G_2$ ;  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon \delta_{ij}$ ;  $K = \lambda + \frac{2}{3}G$ . Центры дилатации выбираются изотропными, т. е.  $\Omega_{kl} = \Omega_0 \delta_{kl}$ . Связь между  $u_{ik}$  и  $u_i$  имеет вид  $u_{ik} = (\nabla_i u_k + \nabla_k u_i)/2$  ( $u_i$  — компонента вектора смещения). Таким образом, для определения потенциала ОР  $\varphi(\mathbf{r})$  необходимо в общем случае решить систему уравнений (4) с соответствующими граничными условиями. Рассмотрим ситуацию изолированных областей разупорядочения, когда расстояние между ОР существенно превышает линейные размеры действия поля  $\varphi(\mathbf{r})$  и деформации. Для решения системы (4) воспользуемся преобразованием Фурье

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int V_0(\xi) e^{i\xi \mathbf{r}} d\xi, \quad C(\mathbf{r}) = \int S(\xi) e^{i\xi \mathbf{r}} d\xi,$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \int R(\xi) e^{i\xi \mathbf{r}} d\xi, \quad u_l(\mathbf{r}) = \int V_l(\xi) e^{i\xi \mathbf{r}} d\xi; \quad (l=1, 2, 3; x, y, z).$$

Предполагается, что  $C$  и  $\rho$  — известные функции  $\mathbf{r}$ . Тогда получим

$$V_0(\xi) = \frac{4\pi R(\xi)}{\varepsilon \xi^2} + \frac{4\pi}{\varepsilon} \frac{1}{(\lambda + 2G)(1 + \xi^2 \Lambda^2)} \times$$

$$\times \left\{ K \Omega_0 (G_1 + 2G_2) S(\xi) - \frac{4\pi}{\varepsilon} (G_1 + 2G_2)^2 R(\xi) \right\}, \quad (5)$$

$$\Lambda^2 = \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( \frac{(G_1 + 2G_2)^2}{(\lambda + 2G)} \right).$$

Следовательно,  $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_p(\mathbf{r}) + \varphi_f(\mathbf{r})$ , где  $\varphi_p(\mathbf{r})$  — потенциал, обусловленный зарядом, локализованным на дефектах, легирующих примесях и свободных носителях; выражение для флексоэлектрического потенциала  $\varphi_f(\mathbf{r})$  имеет вид

$$\varphi_f(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( \frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) K \Omega_0 \int \frac{S(\xi) e^{i\xi \mathbf{r}}}{1 + \xi^2 \Lambda^2} d\xi - \frac{4\pi}{\varepsilon} \Lambda^2 \int \frac{R(\xi) e^{i\xi \mathbf{r}}}{1 + \xi^2 \Lambda^2} d\xi. \quad (6)$$

Для вычисления  $\varphi_f(\mathbf{r})$  (6) поступим следующим образом. Рассмотрим  $\varphi_f(\mathbf{r})$ , создаваемый точечным центром дилатации. Тогда в (6) появятся интегралы вида

$$I(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\xi \mathbf{r}}}{1 + \xi^2 \Lambda^2} d\xi,$$

$$I(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\xi \mathbf{r}} d\xi - \frac{\Lambda^2}{(2\pi)^3} \int \xi^2 e^{i\xi \mathbf{r}} d\xi + \frac{\Lambda^4}{(2\pi)^3} \int \xi^4 e^{i\xi \mathbf{r}} d\xi + \dots =$$

$$= \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (\Delta \nabla)^{2n} \right\} \delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{1 - \Lambda^2 \nabla^2} \delta(\mathbf{r}).$$

Для скопления дефектов имеем

$$\varphi_f(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( \frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) K \Omega_0 \int_{V'} C(\mathbf{r}') I(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV' - \frac{4\pi}{\varepsilon} \Lambda^2 \int_{V'} \rho(\mathbf{r}') I(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV'. \quad (8)$$

Используя соотношения (7) и

$$\int C(r') \nabla_{r'}^{2n} (r - r') dV' = \nabla^{2n} C(r),$$

из соотношения (8) получим

$$\varphi_f(r) = \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( \frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) K\Omega_0 \frac{1}{1 - \Delta^2 \nabla^2} C(r) - \frac{4\pi}{\varepsilon} \Delta^2 \frac{1}{1 - \Delta^2 \nabla^2} \rho(r). \quad (9)$$

Оценим члены ряда в выражении (9). Рассмотрим сферически-симметричную ОР радиуса  $a$  в кремнии и германии. Тогда

$$|\Delta^{2n} \nabla^{2n} C(r)| \sim C(r) \left( \frac{\Delta}{a} \right)^{2n} \sim C(r) (10^{-2})^{2n},$$

$$|\Delta^{2n} \nabla^{2n} \rho(r)| \sim |\rho(r)| (10^{-2})^{2n}.$$

При оценке  $\Delta$  использовали значения  $G_{1,2} \sim e/a^*$  [6, 10], где  $a^*$  — постоянная решетки ( $a^* \simeq 5 \cdot 10^{-8}$  см); для Si  $\lambda \simeq 0.64 \cdot 10^{11}$  Па,  $G \simeq 0.79 \cdot 10^{11}$  Па [11]; для Ge  $\lambda \simeq 0.48 \cdot 10^{11}$  Па,  $G \simeq 0.67 \cdot 10^{11}$  Па [11];  $a \sim 10^{-6}$  см. Таким образом, окончательно имеем

$$\varphi_f(r) \simeq \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( \frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) K\Omega_0 C(r) - \frac{4\pi}{\varepsilon} \Delta^2 \rho(r). \quad (10)$$

При выводе соотношения (10) предполагалось, что плотность заряда  $\rho(r)$  является известной функцией  $r$ . В общем случае, однако, дефекты в ОР имеют спектр зарядовых состояний, что приводит к зависимости  $\rho$  от  $\varphi(r)$ . Тем самым второе слагаемое в правой части выражения (10) в общем случае не известно. Рассмотрим ситуации, когда

$$|\rho(r)| \ll \left| \left( \frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) \frac{K\Omega_0}{\Delta^2} C(r) \right|. \quad (11)$$

В этом случае значение флексоэлектрического потенциала определено однозначно, а знак  $\varphi_f$  определяется знаком  $\Omega_0$  ( $\Omega_0 = \Delta V / V n_a$ ,  $V$  — объем атома матрицы,  $n_a$  — концентрация атомов матрицы,  $\Delta V$  — изменение объема на один дефект). Если  $\Omega_0 < 0$ , то  $\varphi_f$  является притягивающим для электронов, если  $\Omega_0 > 0$  — притягивающим для дырок. При изменении дефектного состава ОР знак  $\varphi_f$  может изменяться.

Можно показать [вывод аналогичен выводу соотношения (10)], что выражение для среднего гидростатического давления  $P(r)$  в ОР имеет вид

$$P(r) \equiv -K \operatorname{div} \mathbf{u} \simeq -\frac{K^2 \Omega_0}{(\lambda + 2G)} C(r) + \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( \frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) K \rho(r). \quad (12)$$

Используя соотношение (12) и первое уравнение системы (4), получим при выполнении условия (11) уравнение для потенциала  $\varphi(r)$

$$\Delta \varphi = -\frac{4\pi}{\varepsilon} \left\{ \rho(\varphi(r)) - \left( \frac{G_1 + 2G_2}{\lambda + 2G} \right) K\Omega_0 \Delta C(r) \right\}, \quad (13)$$

$$d\varphi/dr|_{r=0} = 0, \quad \varphi(r = \infty) = 0.$$

Таким образом, при выполнении условия (11) задача определения полного потенциала, когда плотность заряда является функцией от  $\varphi(r)$ , сводится к численному решению уравнения (13) с плотностью заряда, отличной от обычно используемой  $[\rho(\varphi(r))]$ , вместо системы уравнений (4), что значительно проще, а значения флексоэлектрического потенциала определяются из соотношения (10).

Проанализируем условие (11). Для определенности рассмотрим кремний. Здесь основными дефектами являются дивакансии (комплекс вакансия + вакансия). Тогда условие (11) имеет вид  $|\rho(r)| \ll 0.3 \cdot 10^2 |e| C(r)$  (полагалось, что ковалентный радиус дивакансий равен двум ковалентным радиусам вакансии:  $r_V^* \simeq 0.95 r_{Si}^*$  [12],  $r_{Si}^* \simeq 1.17 \text{ \AA}$  [13];  $r_V^*$ ,  $r_{Si}^*$  — ковалентные радиусы вакансии,

атома кремния). Представим плотность заряда  $\rho(r)$  в виде  $\rho(r) = \rho^*(r) + \tilde{\rho}(r)$ , где  $\rho^*(r)$ ,  $\tilde{\rho}(r)$  — плотности заряда на дефектах и свободных носителях соответственно. Так как  $|\rho^*| \ll |e|C(r)$ , то для плотности заряда на дефектах условие (11) выполняется. Таким образом, условие (11) накладывает ограничение на концентрацию электронов  $n(r)$  и дырок  $p(r)$ :

$$n(r), p(r) \ll 0.3 \cdot 10^{22} C(r), \quad (14)$$

что реализуется в реальных условиях эксперимента. Покажем влияние флексоэлектрического потенциала на время жизни носителей заряда  $\tau$ , обусловленное рекомбинацией на ОР в кремнии. При этом желательно выбрать условия, когда потенциал, обусловленный зарядом на дефектах и свободных носителях,

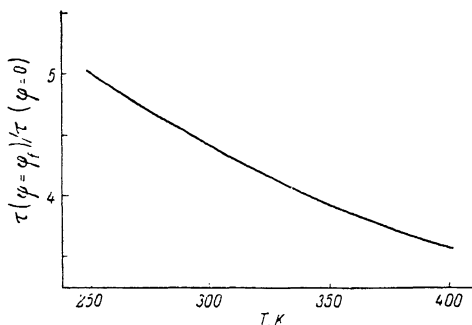


Рис. 1. Зависимость  $\tau(\varphi = \varphi_f)/\tau(\varphi = 0)$  от температуры кристалла  $T$ .

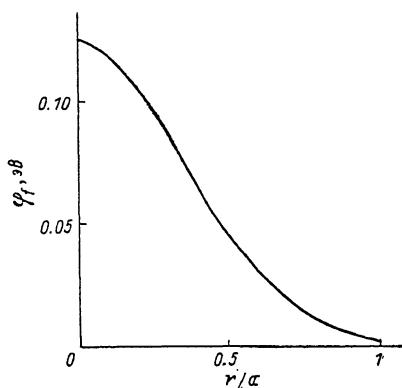


Рис. 2. Зависимость флексоэлектрического потенциала  $\varphi_f$  от расстояния  $r$  до центра ОР.

был бы малым по сравнению с флексоэлектрическим потенциалом. Для этого необходимо, исходя из уравнения (13), выполнить условие

$$|p(r)| \ll \left| \left( \frac{G_1 + 2G_2}{i + 2G} \right) K \Omega_0 \Delta C(r) \right| \sim \left| \left( \frac{G_1 + 2G_2}{i + 2G} \right) \frac{K \Omega_0 C(r)}{a^2} \right|. \quad (15)$$

Заметим, что (15) подобно (11) с заменой  $\Lambda$  на радиус области разупорядочения  $a$ . Рассмотрим ОР с модельным профилем концентрации дефектов  $C(r)$  в виде

$$C(r) = \frac{N}{(2\pi z)^{3/2}} e^{-r^2/2z}, \quad (16)$$

где  $N$  — полное число дефектов;  $2\sqrt{2z} = a$ . Для энергий ядер отдачи  $\approx 20$  кэВ, что соответствует облучению Si нейтронами с энергией  $\approx 1$  МэВ (характерная ситуация),  $a \approx 10^{-6}$  см,  $N \approx 150$  [14, 15]. Тогда (15) примет вид

$$|p(r)| \ll 10^{18} |e| e^{-r^2/2z} \text{ см}^{-3}. \quad (17)$$

Это неравенство выполняется, в частности, при высоких уровнях инжекции  $J \gg 1$  с одновременным выполнением условия  $n(r), p(r) \ll 10^{18} e^{-r^2/2z}$  (расчеты по методу, изложенному в работе [16], показывают, что при  $J \gg 1$  условие (17) выполняется для плотности заряда, локализованного на дефектах). С учетом экспоненциальной зависимости  $n(r), p(r)$  от потенциала (в данном случае флексоэлектрического потенциала) последнее неравенство приобретает вид  $n(\infty), p(\infty) \ll 10^{16} \text{ см}^{-3}$  [температура кристалла  $T \geq 250$  К,  $n(\infty), p(\infty)$  — концентрация электронов (дырок) в неповрежденной матрице]. Таким образом, окончательно (15) выполняется, в частности, для  $J \gg 1$  при одновременном выполнении условия  $n(\infty), p(\infty) \ll 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . При увеличении  $n(\infty), p(\infty)$ , когда нарушается приведенное выше условие, потенциал  $\varphi(r)$  стремится к нулю. Оценим величину  $\eta = \tau(\varphi = \varphi_f)/\tau(\varphi = 0)$ , которая характеризует перепад  $\tau$  в образцах с равновесной концентрацией носителей заряда в неповрежденной матрице  $\ll 10^{16} \text{ см}^{-3}$  при изменении уровня инжекции в интервале  $J \approx 1 \div J^*$  ( $J^* \gg 1$ ).

При этом для расчета времени жизни использовали известную модель рекомбинации на ОР [17] с учетом неоднородности в распределении дефектов в ОР (16) и экспоненциальной зависимости концентрации носителей заряда от потенциала ОР. Из расчетов следует (рис. 1), что  $\eta$  достигает заметной величины, что соответствует экспериментальным данным, в частности [18]. Если не учитывать флексоэлектрического потенциала, то для  $J > 1$   $\eta \approx 1$ , т. е.  $\tau \approx \text{const}$  (это следует из количественных расчетов [16]), что противоречит данным эксперимента.

В заключение отметим, что флексоэлектрический потенциал составляет заметную величину (рис. 2) и оказывает сравнимое с потенциалом  $\phi$ , влияние на электрофизические свойства ОР, а в некоторых случаях (как показано выше) всецело определяет свойства ОР.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Физические процессы в облученных полупроводниках / Под ред. Л. С. Смирнова. Новосибирск, 1977. 256 с.
- [2] Винецкий В. Л., Холодарь Г. А. Радиационная физика полупроводников. Киев, 1979. 335 с.
- [3] Машкевич В. С., Толпыго К. Б. Электрические, оптические и упругие свойства кристаллов типа алмаза. — ЖЭТФ, 1957, т. 32, в. 3, с. 520—525.
- [4] Толпыго К. Б. Исследование длинноволновых колебаний кристаллов типа алмаза с учетом дальнедействующих сил. — ФТТ, 1962, т. 4, в. 7, с. 1765—1777.
- [5] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М., 1982. 624 с.
- [6] Коган Ш. М. Пьезоэлектрический эффект при неоднородной деформации и акустическое рассеяние носителей тока в кристаллах. — ФТТ, 1963, т. 5, в. 10, с. 2829—2831.
- [7] Любов Б. Я. Диффузионные процессы в неоднородных твердых средах. М., 1981. 296 с.
- [8] Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М., 1972. 280 с.
- [9] Лифшиц И. М., Розенцвейг Л. Н. О построении тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упруго-анизотропной среды. — ЖЭТФ, 1947, т. 17, в. 9, с. 783—791.
- [10] Инденбом В. Л., Логинов Е. Б., Осипов М. А. Флексоэлектрический эффект и строение кристаллов. — Кристаллография, 1981, т. 26, в. 6, с. 1157—1162.
- [11] Акустические кристаллы / Под ред. М. П. Шаскольской. М., 1982. 632 с.
- [12] Окуляч В. И. Основные энергетические характеристики дефектов вакансионного типа в Si и Ge. — Автореф. канд. дис. Горький, 1976.
- [13] Киттель И. Введение в физику твердого тела. М., 1978. 791 с.
- [14] Акилов Ю. З. Каскады последовательных атом-атомных столкновений в твердых телах. — Автореф. канд. дис. Ташкент, 1974.
- [15] Lindhard J., Nielson V., Scharff M. — Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd., 1963, v. 33, N 10, p. 1—42.
- [16] Кожевников В. П., Михнович В. В. Модель зарядовой зависимости реакций формирования скоплений радиационных дефектов в полупроводниках. — ЖТФ, 1983, т. 53, в. 7, с. 1361—1367.
- [17] Коноплева Р. Ф., Юферев А. А. О рекомбинации на областях разупорядочения. — ФТП, 1975, т. 9, в. 3, с. 413—419.
- [18] Ухин Н. А. Влияние сложных структурных повреждений на свойства полупроводников. — В кн.: Радиационная физика неметаллических кристаллов. Киев, 1971, т. 3, ч. 1, с. 66—93.

Получена 9.03.1987  
Принята к печати 16.06.1987