

5. ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ГАЛУЗІ

УДК 537.226+537.311/0.1

Доц. М.М. Баран, канд. фіз.-мат. наук;

доц. І.М. Васькович, канд. екон. наук – НУ "Львівська політехніка"

ВПЛИВ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ЕНЕРГІЮ ЗВ'ЯЗКУ ДОМІШКИ З КРАЙОВОЮ ДИСЛОКАЦІЄЮ

Досліджено вплив самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії на енергетичне положення локального рівня донорної домішки, захопленої крайовою дислокацією, дна дислокаційної зони та на енергію зв'язку домішки з крайовою дислокацією залежно від концентрації електронів провідності у напівпровіднику.

Ключові слова: концентрація електронів, провідність, крайова дислокація, енергетичне положення, електрон-деформаційна взаємодія, домішка.

Розуміння фізичної природи та закономірностей структури електронних рівнів у кристалах з дефектами (точковими, плоскими, лінійними) та їх перебудова внаслідок пружної [1] та електростатичної [2] взаємодій між дефектами є важливою вимогою сучасного електронного матеріалознавства та нових технологічних експериментів. Знаючи ці закономірності, можна прогнозовано керувати деградаційними ефектами у мікроелектронних приладах [3].

Автори роботи [4] вважають, що зменшення енергії кристалічної системи у разі захоплення точкового дефекту дислокацією зумовлене частковою релаксацією внутрішніх напруг та зміною електростатичної енергії внаслідок перерозподілу густини заряду. Крім цього, причиною взаємодії між точковими дефектами і дислокаціями є перебудова електронного спектра кристала за неоднорідної деформації ґратки, зумовленої дією лінійного і точкового дефектів.

Однак, крім пружної та електростатичної взаємодій між дефектами є ще третій вид взаємодії – електрон-деформаційна [5, 6], яка впливає на енергетичне положення локального рівня донорної домішки, захопленої крайовою дислокацією, дна дислокаційної зони та на енергію зв'язку домішки з крайовою дислокацією.

Розглянемо легований напівпровідниковий кристал n -типу з крайовими дислокаціями. Припустимо, що поверхнева густина дислокацій N_D та концентрація донорних домішок C задовольняють умови: $\pi R^2 < N_D^{-1}$ (R – радіус рідовського циліндра) і $C \ll \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{\Omega}{r_0^3}$ (Ω – об'єм, що припадає на один атом кристала з

домішками; r_0 – ефективний радіус точкового дефекту). За таких умов у першому наближенні розглядувану задачу можна звести до задачі про взаємодію донорної домішки з одиничною крайовою дислокацією.

Енергетичний спектр електронних станів домішки, захопленої крайовою дислокацією, знаходимо з розв'язку рівняння Шредінгера в наближенні ізотропної параболічної зони з ефективною масою m^*

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (1)$$

де

$$\hat{H} = \nabla^2 + k_D^2(\vec{r}) + k_0^2(\vec{r})$$

$$k_D^2(\vec{r}) = -\frac{2m^*}{\hbar^2} V_D(\rho, \theta), \quad k_0^2(\vec{r}) = -\frac{2m^*}{\hbar^2} V_0(\vec{r}), \quad \chi^2 = -\frac{2m^*}{\hbar^2} E;$$

$\psi(\vec{r})$ – хвильова функція електрона в полі дислокаційного потенціалу $V_D(\rho, \theta)$ та потенціалу точкового дефекту $V_0(\vec{r})$. Дислокаційний потенціал $V_D(\rho, \theta)$ складається з електростатичної потенціальної енергії електрона $V_c(\rho)$ [7] в полі ядра зарядженої дислокації:

$$V_c(\rho) = \frac{2\pi R^2 n_d e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \ln\left(\frac{R}{\rho}\right), \quad 0 \leq \rho \leq \rho_0, \quad (2)$$

де ρ_0 – радіус ядра дислокації;

та електрон-деформаційної потенціальної енергії електрона $V_{el.-def.}(\rho, \theta)$

$$V_{el.-def.}(\rho, \theta) = \frac{2DS}{\rho_0} \cos \theta K_1(g\rho_0) I_1(g\rho), \quad 0 \leq \rho \leq \rho_0, \quad (3)$$

тобто
$$V_D(\rho, \theta) = V_c(\rho) + V_{el.-def.}(\rho, \theta). \quad (4)$$

Потенціальна енергія електрона в полі точкового дефекту $V_0(\vec{r})$ знаходиться в межах електростатичної моделі. Таким чином, дислокаційний потенціал $V_D(\rho, \theta)$ зумовлений як розривом валентних зв'язків, так і деформацією ґратки поблизу ядра крайової дислокації. Домішковий потенціал $V_0(\vec{r})$, зумовлений тільки розривом валентних зв'язків. Це значить, що $V_0(\vec{r})$ відрізняється від нуля тільки в об'ємі b^3 , а $V_D(\rho, \theta)$ – всередині трубки радіуса b (b – величина вектора Бюргера). Оскільки на відстані " b " деформаційне поле дислокації є повільно-змінним, у першому наближенні можна знаходити енергетичний спектр електронних станів домішки, захопленої крайовою дислокацією з усередненим дислокаційним потенціалом $\bar{V}_D$.

Знайдемо середнє значення дислокаційного потенціалу $V_D(\rho, \theta)$ (4) всередині циліндричної трубки радіуса b

$$\begin{aligned} \bar{V}_D &= \frac{2\pi R^2 n_d e^2}{\pi b^2 \varepsilon \varepsilon_0} \int_0^b \rho \ln\left(\frac{R}{\rho}\right) d\rho \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta + \frac{1}{\pi b^2} \frac{2DS}{\rho_0} K_1(g\rho_0) \int_0^b \rho I_1(g\rho) d\rho \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \theta d\theta = \\ &= \frac{2e^2 \pi R^2 n_d}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(\frac{1}{2} + \ln\left(\frac{R}{b}\right) \right) + \frac{2b D g S}{3\rho_0 \pi} K_1(g\rho_0) \cdot {}_1F_2\left(\frac{3}{2}; 2, \frac{5}{2}; \frac{b^2 g^2}{4}\right) \end{aligned} \quad (5)$$

де ${}_1F_2\left(\frac{3}{2}; 2, \frac{5}{2}; \frac{b^2 g^2}{4}\right)$ – гіпергеометрична функція [8].

За допомогою функції Гріна $G_E(|r-r'|) = \frac{1}{4\pi|r-r'|} \exp[-\chi|r-r'|]$, оператора

$\chi^2 - \nabla^2$ рівняння (1) можна звести до еквівалентного інтегрального рівняння [9]

$$\psi(r) = \int G_E(|r-r'|) [k_D^2(\vec{r}) + k_0(\vec{r}')] \psi(r') d^3 r'. \quad (6)$$

Спрямуємо вісь Z циліндричної системи координат вздовж дислокації і перейдемо до усередненої за кутовою змінною огибаючої $\bar{\psi}(\rho, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(\rho, \theta, z) d\theta$, взявши до уваги тільки нижню дислокаційну зону. $\bar{\psi}(\rho, z)$ запишемо у вигляді інтегралу Фур'є

$$\bar{\psi}(\rho, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(\rho, k) e^{ikz} dk. \quad (7)$$

Виконавши інтегрування у формулі (6) з врахуванням $V_D(\rho, \theta) = \bar{V}_D$ за $\rho \sim b$ і $V_0(\vec{r}) = \bar{V}_0$ за $r \sim b$, отримаємо

$$\Phi(\rho, k) = [\omega' b \bar{\psi}(b, b) + \omega \Phi(b, k)] K_0(\rho \sqrt{\chi^2 + k^2}), \quad (8)$$

де K_0 – функція Макдональда;

$$\omega = \frac{m^* \bar{V}_D b^2}{2\pi \hbar^2}; \quad \omega' = \frac{m^* (\bar{V}_0 - \bar{V}_D) b^2}{2\pi \hbar^2}.$$

Необхідно зазначити, що як потужність дислокаційного потенціалу ω , так і потенціалу точкового дефекту, захопленого дислокацією ω' залежать від концентрації електронів провідності n_0 , константи деформаційного потенціалу зони провідності S , пружних сталих, оскільки всі ці параметри входять у величину $g \left(g^2 = \frac{e^2 R_S}{\varepsilon \varepsilon_0} \right)$, яка є аргументом функцій Макдональда $K_1(g\rho_0)$ та Бесселя $I_1(g\rho)$. Знайшовши $\Phi(b, k)$ із формули (8) і використавши обернене перетворення Фур'є до $\bar{\psi}(b, z)$, запишемо дисперсійне рівняння

$$\omega' \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{K_0(\sqrt{\alpha^2 + \xi^2}) e^{i\xi} d\xi}{1 - \omega K_0(\sqrt{\alpha^2 + \xi^2})} = 1, \quad \alpha = \chi b, \quad (9)$$

з якого знаходимо енергію електрона, локалізованого поблизу дефекту, захопленого дислокацією. З рівності (9) випливає, що для локалізації електрона необхідно, щоб виконувалась умова: $\omega > 0, \omega' > 0$.

Огибаюча $\bar{\psi}(\rho, z)$ має вигляд

$$\bar{\psi}(\rho, z) = (2bC)^{-\frac{1}{2}} \left\{ \frac{e^{-\chi\rho}}{\rho} + \frac{\omega}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{K_0(b\sqrt{\chi^2 + k^2}) K_0(\rho\sqrt{\chi^2 + k^2}) e^{ikz} dk}{1 - \omega K_0(b\sqrt{\chi^2 + k^2})} \right\}, \quad (10)$$

де

$$C = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{(\alpha^2 + \xi^2) \left[1 - \omega K_0(\sqrt{\alpha^2 + \xi^2}) \right]^2}. \quad (11)$$

Рівняння $1 - \omega K_0(b\sqrt{\chi^2 + k^2}) = 0$ визначає закон дисперсії у дислокаційній зоні; $k_{||}$ – хвильовий вектор, який напрямлений вздовж дислокації. Якщо β є

розв'язком рівняння $1 - \omega K_0(\beta) = 0$, то закон дисперсії в дислокаційній зоні набуває вигляду

$$E(k_{II}) = -E_{0d} + \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2m^*}, \quad E_{0d} = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m^* b^2}. \quad (12)$$

Оскільки аналітичний вигляд інтегралів у рівняннях (9-11) невідомий, то обмежимося кількісною оцінкою.

Стану електрона, локалізованого поблизу точкового дефекту, відповідає енергія $E < -E_{0d}$, тобто необхідно розглядати тільки інтервал значень $\alpha > \beta$. За $\beta = 0$, що відповідає $\omega = 0$, притягувальний дислокаційний потенціал $V_D(\rho, \theta)$ відсутній. Тоді інтеграл в рівнянні (9) може бути знайдений

$$\exp[-\chi b \sqrt{2}] = \frac{\sqrt{2}}{\pi \omega'}. \quad (13)$$

Рівняння (13) має розв'язок за $\omega' \geq \frac{\sqrt{2}}{\pi}$, який характерний для локального потенціалу у тривимірному просторі [10]. За $\beta \neq 0$ і $\alpha \rightarrow \beta$ головною визначальною є область малих ξ . Тоді рівняння (9) перетворюється до вигляду

$$\frac{\pi \omega' [K_0(\beta)]^2}{K_1(\beta) \sqrt{\alpha^2 - \beta^2}} = 1. \quad (14)$$

Таким чином, за як завгодно малої потужності потенціалу точкового дефекту ω' від дислокаційної зони відщеплюється локальний рівень. Прояв цієї загальної властивості одновимірних систем [10] зумовлений тим, що локалізована хвильова функція формується здебільшого блохівськими функціями одновимірної дислокаційної зони.

За $\alpha \gg \beta$ дисперсійне рівняння (9) можна представити у вигляді рівності (12). У цьому випадку рівняння (9) має розв'язок тільки за достатньо великих $\frac{\omega'}{\omega} \gg 1$, за яких роль дислокаційного потенціалу неістотна.

У бездислокаційній області ($\omega = 0$) залежність енергетичної глибини локального рівня домішки від потужності ω' потенціалу точкового дефекту має вигляд

$$E_{0i}^d = -\frac{\hbar^2}{4m^* b^2} \left[\ln \left(\frac{\pi \omega''}{\sqrt{2}} \right) \right]^2, \quad \omega'' \geq \frac{\sqrt{2}}{\pi}. \quad (15)$$

Тоді, енергія локального рівня домішки, яка захоплена крайовою дислокацією, аналогічно (15) $\left(\frac{E_{0i}^d - E_{0d}}{E_{0d}} \ll 1 \right)$ буде визначатись так:

$$\tilde{E}_i^d(n_0) = -E_{0d} \left[1 + \left(\frac{\pi (K_0(\beta))^2}{K_1(\beta)} \omega'(n_0) \right)^2 \right], \quad \omega' > 0. \quad (16)$$

Конкретний розрахунок енергії електрона, локалізованого на домішці, який захоплений крайовою дислокацією з врахуванням електрон-деформаційної

взаємодії проводився для монокристалів CdTe, легованих домішками хлору ($n_d = 10^{17} \text{ см}^{-3} \div 10^{19} \text{ см}^{-3}$).

На рис. 1 наведено залежність енергії ($\tilde{E}_i^d < 0$) електрона, локалізованого на домішці хлору (Cl), яка взаємодіє з крайовою дислокацією від концентрації електронів провідності $n_0 = (10^{17} \div 10^{19}) \text{ см}^{-3}$, а на рис. 2 – залежність енергії дислокаційного рівня від n_0 . Як видно з рис. 1, 2, зі збільшенням концентрації електронів провідності n_0 як енергія зв'язаного електронного стану ($\tilde{E}_i^d$) при захопленні домішки крайовою дислокацією (рис. 1), так і енергія дислокаційного рівня (E_{0d}) (рис. 2) монотонно зростає, тобто локальний електронний рівень зсувається в бік дна зони провідності (рис. 3). Зокрема, із збільшенням концентрації електронів провідності на порядок (10^{17} см^{-3} до 10^{19} см^{-3}) енергія електронного локального рівня зростає на $\sim 13 \text{ меВ}$.

На рис. 3 наведено зонну схему напівпровідника телуриду кадмію (CdTe), легованого домішкою Cl з дислокаційною зоною та домішковим рівнем у забороненій зоні (відлік енергії ведеться від дна зони провідності) за різних значень концентрації електронів провідності $n_0 = (10^{17} \div 10^{19}) \text{ см}^{-3}$. Якщо, згідно з [11], енергія іонізації домішки E_{oi}^d , яка знаходиться поза областю дислокаційної

взаємодії, визначається емпіричним співвідношенням $E_{oi}^d = \tilde{E}_{oi} - a(N_D^+)^{\frac{1}{3}}$ (де $\tilde{E}_{oi}$ – енергія іонізації ізольованих донорів; $a = 4.3 \cdot 10^{18} \text{ еВ} \cdot \text{см}$; N_D^+ – концентрація іонізованих донорів), то, згідно з нашими результатами – співвідношення (16). Як видно із зонної схеми, енергія іонізації домішки E_{oi}^d , яка не взаємодіє з дислокацією становить $\sim 30 \text{ меВ}$, тоді як енергія іонізації взаємодіючої домішки $\tilde{E}_i^d$ є меншою за E_{oi}^d і енергію дислокаційного рівня E_{0d} і є функцією від концентрації електронів провідності. Зокрема, за $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ становить $\sim -628 \text{ меВ}$, за $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ – $\sim -615 \text{ меВ}$, за $n_0 = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ – $\sim -607 \text{ меВ}$. Без врахування електрон-деформаційної складової електростатичного потенціалу ($\varphi_{el.-def.} = 0$) енергія домішкового рівня становить -533 меВ . Енергія зв'язку домішки з дислокацією $E_{int.} = |\tilde{E}_i^d| - E_{0d}$ за $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ становить близько 152 меВ , за $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ – 153 меВ , $n_0 = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ – $\sim 154 \text{ меВ}$. Внесок електрон-деформаційної складової електростатичного потенціалу в енергію зв'язку домішки з крайовою дислокацією за $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ становить $\sim 94 \text{ меВ}$, за $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ – $\sim 81 \text{ меВ}$, за $n_0 = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ – $\sim 73 \text{ меВ}$.

Таким чином, з ростом концентрації електронів провідності в цьому інтервалі концентрацій цей внесок зменшується на $\sim 20 \text{ меВ}$.

Така зміна енергетичного положення домішкового та дислокаційного рівнів залежно від концентрації електронів провідності n_0 повинна спостерігатися на експерименті з вимірювання температурної залежності електропровідності монокристалів CdTe, легованих хлором Cl [12-15] та на зсуві спектрального максимуму кривої фотолюмінесценції [16].

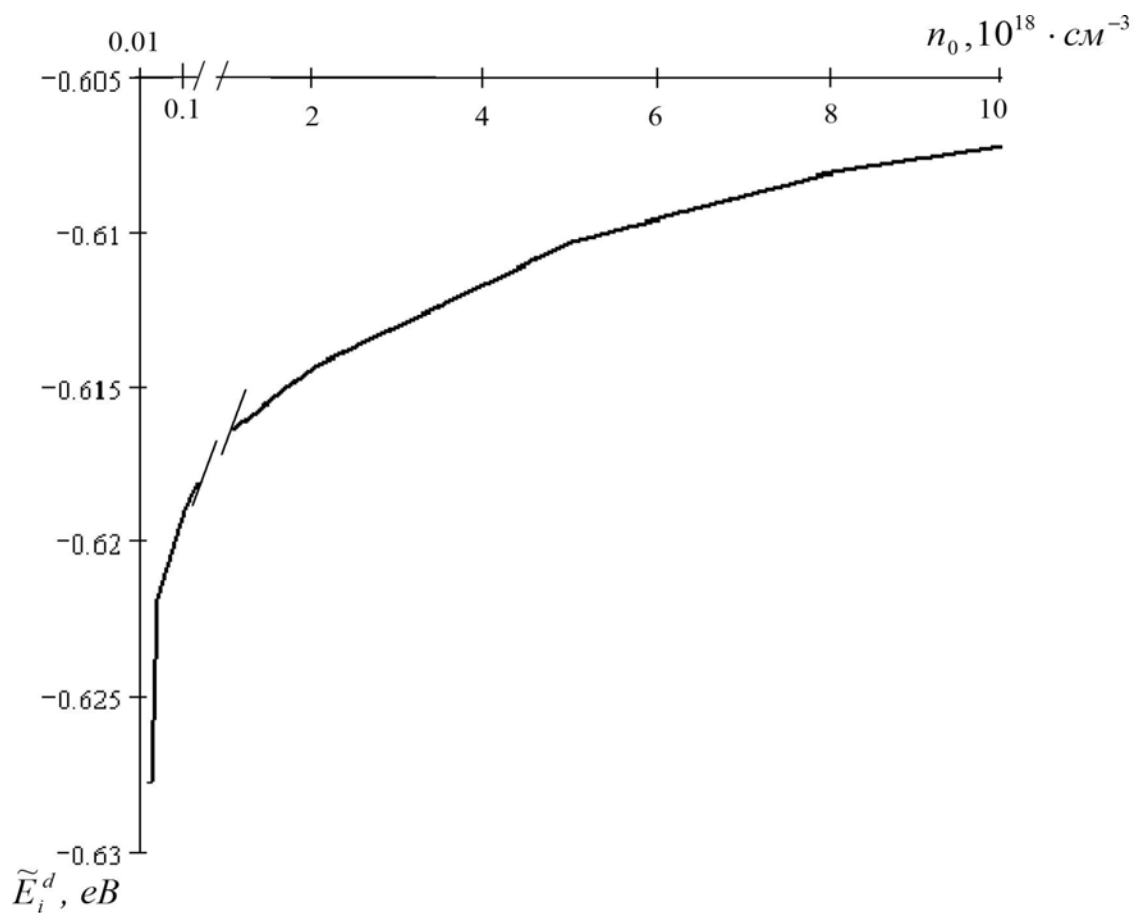


Рис. 1. Залежність енергії електрона, локалізованого на домішці, від концентрації електронів провідності n_0

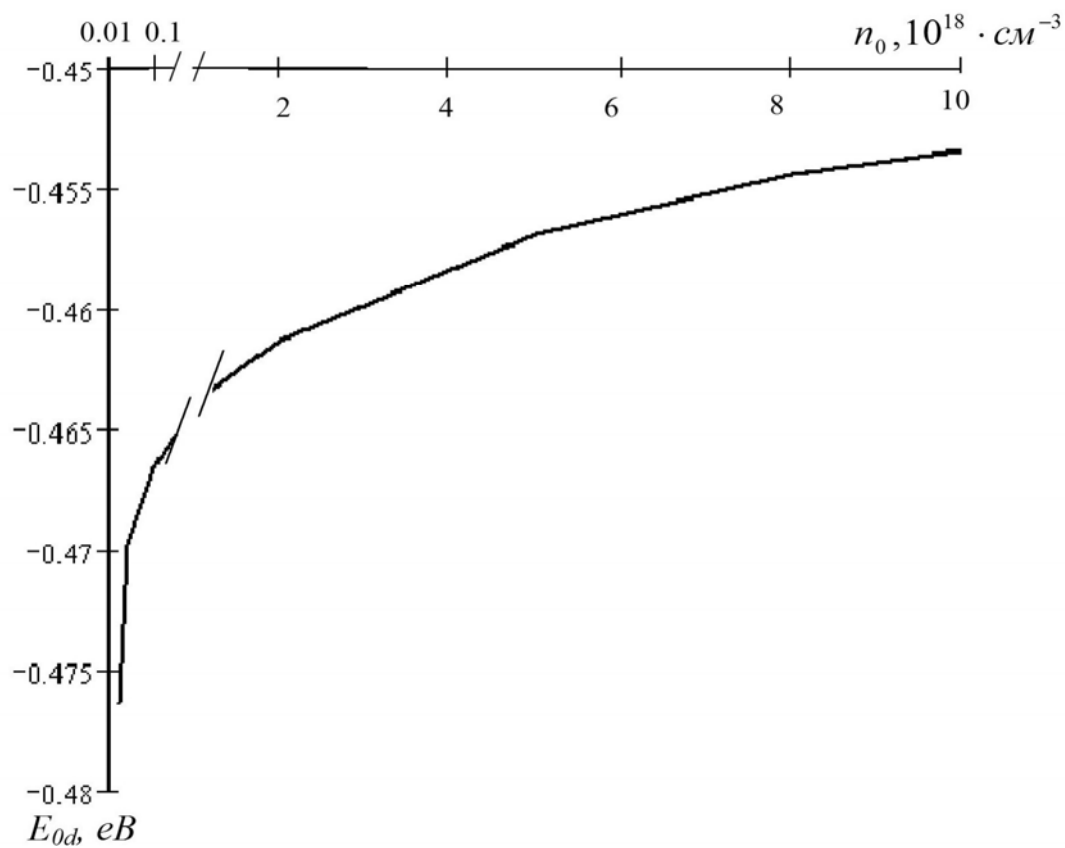


Рис. 2. Залежність енергії дислокаційного рівня E_{0d} від концентрації електронів провідності n_0

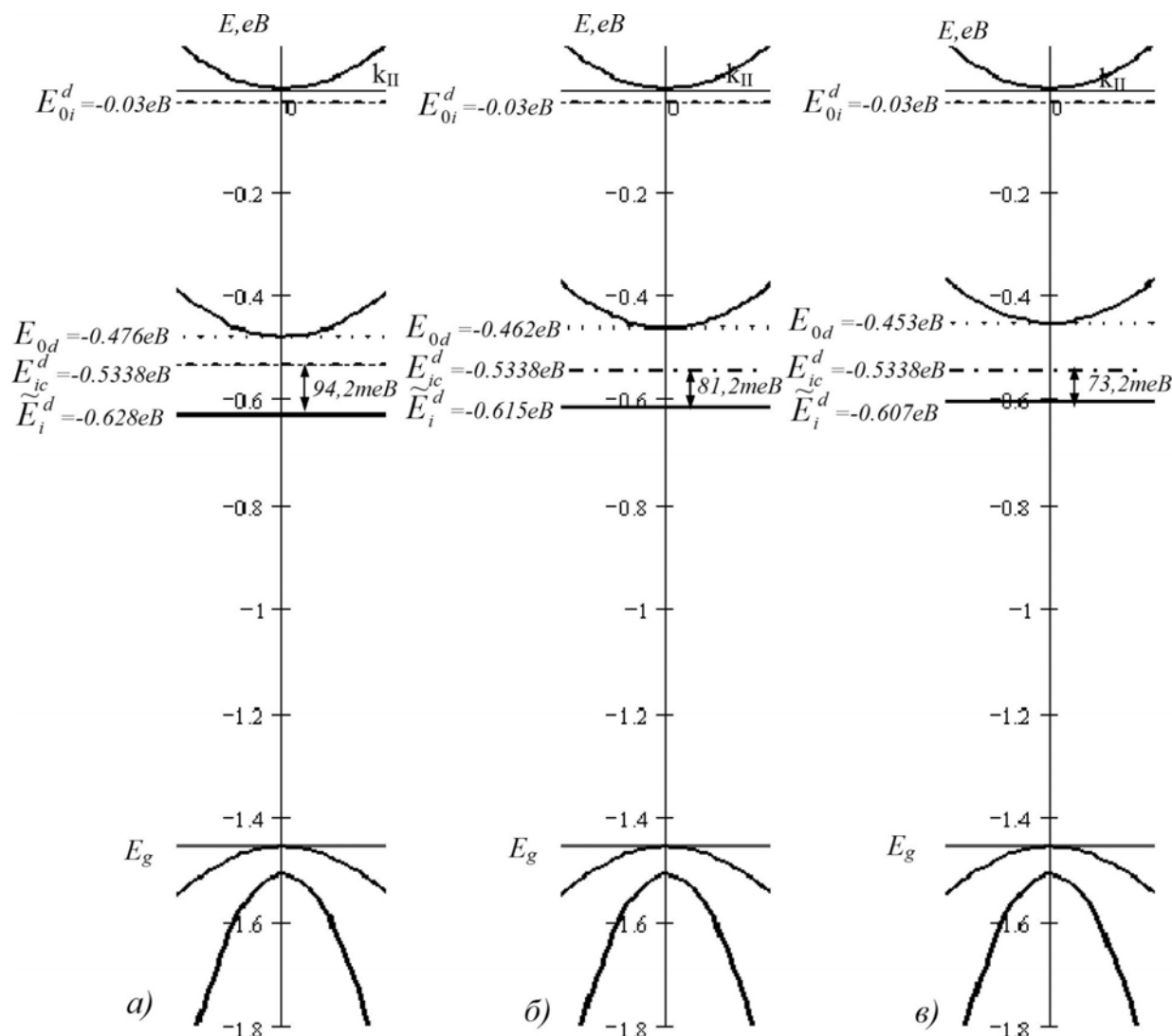


Рис. 3. Зонна схема напівпровідника телуриду кадмію (CdTe) з крайовою дислокацією легованого хлором (Cl) з урахуванням електрон-деформаційної взаємодії:

а) $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$; б) $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$; в) $n_0 = 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

E_{0i}^d – енергія іонізації домішки, яка не взаємодіє з крайовою дислокацією;
 E_{0d} – енергія дислокаційного рівня; E_{ic}^d – енергія домішкового рівня без врахування електрон-деформаційної складової електростатичного потенціалу; $\tilde{E}_i^d$ – енергія іонізації домішки.

Література

1. Гуткин М.Ю. Равновесные конфигурации частичных дислокаций несоответствия в тонкоплёночных гетеросистемах / М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, И.А. Овидько // ФТТ. – 1998. – Т. 40, № 11. – С. 2059-2064.
2. Белявский В.И. Взаимодействие дислокации с точечным дефектом, образующим связанное электронное состояние / В.И. Белявский, Б.М. Даринский, В.В. Шалимов // Сборник Тульского политехнического ин-та ("Взаимодействие дефектов кристаллической решетки и свойства металлов"). – 1980. – С. 3-7.
3. Сидоров В.Г. Влияние внутренних механических напряжений на характеристики светодиодов из арсенида галлия / В.Г. Сидоров, Д.В. Сидоров, В.П. Соколов // ФТП. – 1998. – Т. 32, № 11. – С. 1393-1398.
4. Cottrell A.H. Theory of brittle fracture in steel and similar metals / A.H. Cottrell, S.C. Hunter, F.R.N. Nabarro // Phil. Mag. – 1953. – Vol. 44. – P. 1064-1067.

5. Коваленко А.В. Электрические свойства гетероструктур ZnSe/GaAs (100), выращенных методом фотостимулированной газофазной эпитаксии / А.В. Коваленко // ФТП. – 1997. – Т. 31, вып. 1. – С. 11-14.
6. Давидов А.С. Теория твердого тела / А.С. Давидов. – М. : Изд-во "Наука", 1978. – Т. 1. – 478 с.
7. Бонч-Бруевич В.Л. К теории электронных состояний, связанных с дислокациями / В.Л. Бонч-Бруевич, В.Б. Гласко // ФТТ. – 1961. – Т. 3, вып. 1. – С. 36-52.
8. Стиган И. Справочник по специальным функциям / И. Стиган. – М. : Изд-во "Наука", 1979. – 81 с.
9. Ястребов Л.И. Основы одноэлектронной теории твердого тела / Л.И. Ястребов, А.А. Кацнельсон. – М. : Изд-во "Наука", 1981. – 320 с.
10. Ландау Л.Д. Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М. : Изд-во "Наука", 1974. – 225 с.
11. Debye P.P. Electrical Properties of N-Type Germanium / P.P. Debye, E.M. Conwell. – 1954. – Vol. 93, № 4. – P. 693-706.
12. Zanio K.R. Cadmium Telluride. Semiconductor and semimetals / K.R. Zanio. – New-York : San Francisco, 1978. – Vol. XVI. – 236 p.
13. Акимов Ю.К. Полупроводниковые детекторы в экспериментальной физике / Ю.К. Акимов, О.В. Игнатьев, А.И. Калинин, В.Ф. Кушнирук. – М. : Изд-во "Наука", 1989. – 344 с.
14. Матвеев О.А. Антиструктурные дефекты Te_{Cd} в кристаллах CdTe / Матвеев О.А., Терентьев А.И. // Письма в ЖТФ. – 1997. – Т. 23, № 4. – С. 30-34.
15. Матлак В.В. Электропроводность полуизолирующего CdTe / Матлак В.В., Илашук М.И., Парфенюк О.А., Павлин П.А., Савицкий А.В. // ФТП. – 1977. – Т. 11, вып. 12. – С. 2287-2291.
16. Song S.H. Photoluminescence study on compensating defects in CdTe: Al / Song S.H., Wong J., Ishikawa I., Seto S., Isshiki M. // Journal of Crystal Growth. – 2002. – P. 1726-1730.

Баран М.М., Васькович И.М. Влияние электрон-деформационного взаимодействия на энергию связи примеси с краевой дислокацией

Исследовано влияние самосогласованного электрон-деформационного взаимодействия на энергетическое положение локального уровня донорной примеси, захваченной краевой дислокацией, дна дислокационной зоны и на энергию связи примеси с краевой дислокацией в зависимости от концентрации электронов проводимости в полупроводнике.

Ключевые слова: концентрация электронов, проводимость, краевая дислокация, энергетическое положение, электрон-деформационное взаимодействие, примесь.

Baran M.M., Vaskovich I.M. Influence of electron-deformational interaction on energy of impurity connection with edge dislocation

The article explores the impact of self-consistent electron deformational interaction on the energy location of local level donor impurity, seized by the edge dislocation, the bottom of dislocation area and on energy of impurity connection with edge dislocation, depending on the concentration of conduction electrons in semiconductor.

Keywords: electron concentration, conductance, edge dislocation, energy location, electron-deformational interaction, impurity.

УДК 338.2.001.573 (075.8)

Доц. Л.М. Буяк-Басараба, канд. екон. наук;
викл. В.К. Паучок – Тернопільський НЕУ

**ДИНАМІЧНА МОДЕЛЬ СТРУКТУРУВАННЯ СІЛЬСЬКОГО
ГОСПОДАРСТВА ЗА ВЕЛИЧИНОЮ КАПІТАЛУ,
ФОНДІВ Й УГІДЬ**

Для дослідження процесів структурування сільського господарства за величиною капіталу, фондів й угідь розроблено динамічну модель взаємодії учасників аграрного виробництва й виробників сільськогосподарської техніки, які діють в умовах