

Х. Д. ДИМИТРОВ

**К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В КРЕМНИИ,
СВЯЗАННЫХ С ВИНТОВЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ**

Рассмотрена квантовомеханическая задача о влиянии винтовых дислокаций, параллельных кристаллографическому направлению [110], на энергетический спектр электронов в кремнии с учетом анизотропии тензора эффективных масс и «квазимагнитного» векторного потенциала деформации. В предположении наличия связанных состояний получены приближенные формулы для спектра энергии вблизи основного состояния при движении электронов вокруг разных эллипсоидов зоны проводимости. Результаты показывают, что разные эллипсоиды, вообще говоря, не эквивалентны между собой.

Введение

За последнее время значительно возрос интерес к вопросам квантовомеханической теории электронов в реальных полупроводниках, содержащих протяженные дефекты, в частности, дислокации. Это связано с большим прогрессом в создании экспериментальных методов исследования и развитием теории дислокаций, при помощи которых было установлено их влияние на электрические [1] и другие свойства твердых тел.

Давно известно, что дислокации в кремнии и германии играют роль акцепторов. В рамках классической теории это объясняется посредством представления о «болтающихся» электронных связях [2, 3], которые возникают у дислокации. Однако полученные на этом основании квазиклассические результаты, как это отмечено в работе [4], имеют ограниченную область применимости, определяемую условиями, при которых можно не учитывать квантовые эффекты. В работах [4, 5] рассмотрена общая квантовомеханическая задача о влиянии линейных и винтовых дислокаций на энергетический спектр электронов в полупроводниках. Расчет электронных состояний в них выполнен на уровне известной «водородной» модели в случае точечных дефектов. В предположении о простых зонах и макроскопически однородных дислокациях без примесных атмосфер, получены и исследованы дислокационные зоны. При этом в случае линейной дислокации потенциал деформации не был принят во внимание, а в задаче о винтовой дислокации на основании соображений тензорного характера был введен деформационный потенциал, дополнительный к обычно употребляемому [6, 7].

В настоящей работе мы ограничиваемся рассмотрением только макроскопически однородных чисто винтовых дислокаций в электрон-

ном кремнии, параллельных оси [110] и с плоскостями скольжения (111). Как и в [4, 5], деформацию описываем с помощью континуальной теории упругости, причём предполагаем, что постоянная решетки значительно меньше всех интересующих нас характерных расстояний. Кроме того, будем иметь в виду дислокации без примесных атмосфер.

Известно, что к чисто винтовым дислокациям модель «заряженной линии» неприменима, так как в этом случае не существует незаполненных «болтающихся» связей [8]. Все эффекты взаимодействия носителей тока с дислокацией в таком случае являются результатом только деформации решетки, порожденной дислокацией. Поэтому в принципе мы поступаем так, как это сделано в работе [5]. Однако, в отличие от этой работы, будем учитывать сложную структуру зоны проводимости кремния и еще дополнительный «квазимагнитный» векторный потенциал деформации, возникающий вследствие смещения волнового вектора минимума зоны (для каждого эллипсоида в отдельности) при деформации [9].

Будем работать в координатной системе $OXYZ$ с осями по кристаллографическим направлениям кремния. Считаем, что ось рассматриваемой дислокации проходит через начало координат, параллельно направлению [110], и интересуемся движением электронов только в зоне проводимости (однозонная модель) при наличии дислокации.

Как известно, зона проводимости кремния имеет шесть эквивалентных минимумов, лежащих в направлении [100] и ему эквивалентных. Значения волнового вектора \vec{k} для точек каждого минимума равны около $0,8 \vec{k}_0^*$, где \vec{k}_0^* соответствует границе зоны Бриллюэна в указанных направлениях. Изоэнергетические поверхности зоны проводимости, соответствующие значениям \vec{k} вблизи минимумов, являются эллипсоидами вращения с осями симметрии вдоль направлений $\langle 100 \rangle$. Продольная (m_{\parallel}) и поперечная (m_{\perp}) компоненты тензора эффективной массы имеют значения [10] $0,98 m_0$ и $0,19 m_0$, соответственно (m_0 — масса свободного электрона).

Сначала мы рассматриваем движение электронов вокруг минимума энергии в точке $(0, 0, k_0)$. Получаемое при этом эффективное волновое уравнение решается приближенно вариационным методом и теорией возмущений. Потом аналогичным образом рассматриваем и движение вокруг всех остальных минимумов энергии зоны проводимости.

§ 1. Деформационные потенциалы

При наличии однородной деформации в решетке дно зоны проводимости E_0 и соответствующий ему волновой вектор \vec{k}_0 смещаются. Эти смещения определяются тензором деформации ϵ_{ij} и условиями симметрии точки \vec{k}_0 . Компоненты ϵ_{ij} мы будем рассматривать как малые величины. При этом, раскладывая $E_0(\epsilon_{ij})$ и $\vec{k}_0(\epsilon_{ij})$ в ряд по степеням ϵ_{ij} и ограничиваясь членами только первого порядка, получим*

$$\begin{aligned} E_0(\epsilon_{ij}) &= E_0(0) + a_{kl} \epsilon_{lk}, \\ k_0^m(\epsilon_{ij}) &= k_0^m(0) + b_{kl}^m \epsilon_{lk}, \end{aligned} \quad (1)$$

где a_{kl} и b_{kl}^m — симметричные по индексам k и l постоянные коэффициентные тензоры второго и третьего ранга соответственно. Это и есть известная процедура введения деформационных потенциалов в линей-

* Под повторяющимися индексами подразумевается суммирование от 1 до 3.

ном приближении по ϵ_{ij} . Таким образом, кроме обычного скалярного потенциала деформации

$$V_1(\vec{r}) = a_{kl}\epsilon_{lk}(\vec{r})$$

мы учитываем еще дополнительный векторный потенциал

$$B^m(\vec{r}) = b_{kl}^m\epsilon_{lk}(\vec{r}).$$

В настоящем параграфе будем рассматривать движение электронов вблизи точки минимума $(0, 0, k_0)$. В этом случае, как хорошо известно, энергия отдельного электрона в идеальной решетке кремния дается выражением

$$E(\vec{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}}(k_z - k_0)^2. \quad (2)$$

Симметрия кристаллического поля в точке $\vec{k}_0 = (0, 0, k_0)$ характеризуется точечной группой C_{2h} . Отсюда следует, что ненулевые компоненты тензоров a_{kl} и b_{kl}^m следующие:

$$a_{11} = a_{22} = E_1, \quad a_{33} = E_2,$$

$$b_{13}^1 = b_{23}^2 = \alpha_1, \quad b_{11}^3 = b_{22}^3 = \alpha_2, \quad b_{33}^3 = \alpha_3.$$

(Ради удобства мы вводим новые обозначения E_i , $i=1, 2$, и α_i , $i=1, 2, 3$.) Таким образом, потенциалы деформации в данном случае имеют вид

$$V_1 = E_1(\epsilon_{11} + \epsilon_{22}) + E_2\epsilon_{33}, \quad (3)$$

$$\vec{B} = (2\alpha_1\epsilon_{13}, 2\alpha_1\epsilon_{23}, \alpha_2(\epsilon_{11} + \epsilon_{22}) + \alpha_3\epsilon_{33}).$$

При подходящем переобозначении констант E_1 и E_2 выражение V_1 совпадает с формулой (V, 91) в [11] (в случае кремния). Далее, в нашей конкретной задаче, используя известные формулы для компонентов поля деформации винтовой дислокации в изотропной среде [8], из (3) получаем

$$V_1(\vec{r}) = 0, \quad (4)$$

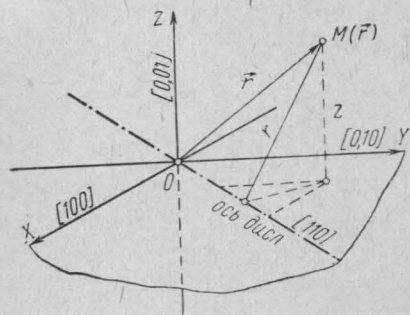
$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{b\alpha_1(y-x)}{4\pi\sigma^2}\vec{n}. \quad (5)$$

Здесь

$$r = \left[\frac{1}{2}(y-x)^2 + z^2 \right]^{1/2}$$

представляет расстояние до оси дислокации, b — абсолютная величина вектора Бюргерса, $\vec{n} = (1, 1, 0)$ — вектор, параллельный оси дислокации (см. рис.).

Во введении мы упоминали, что кроме потенциала V_1 в случае линейных и винтовых дислокаций, согласно [5], можно ввести еще дополнительный потенциал деформации V^I . Этот потенциал вводится на основании наличия псевдовектора у дислокации. Поскольку в нашем случае положение в этом смысле не меняется, для потенциала V^I мы воспользуемся формулой работы [5]



$$V'(\vec{r}) = -\frac{\alpha_0}{r}, \quad (6)$$

где α_0 — феноменологическая константа, аналогичная ранее введенным коэффициентам E_i и α_i . В дальнейшем нас будут интересовать только связанные состояния. Поэтому предполагается, что $\alpha_0 > 0$.

§ 2. Волновое уравнение в приближении эффективной массы

Нас интересует энергетический спектр электронов, связанный с их движением в поле винтовой дислокации. Для его нахождения, как уже было сказано, воспользуемся приближением метода эффективной массы. Волновое уравнение в этом приближении записывается по хорошо известной процедуре [12]. При этом движение мы рассматриваем только в зоне проводимости с пренебрежением влияния всех остальных зон (включительно и валентной).

Следуя работе [9], положим

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\hbar c}{e} \vec{B}(\vec{r}),$$

где $\vec{B}(\vec{r})$ — «векторный потенциал» (5); e — заряд электрона; c — скорость света в пустоте и \hbar — постоянная Планка, деленная на 2π . Тогда $\vec{A}(\vec{r})$ будет играть роль «вектор-потенциала» соответствующего «внешнего статического магнитного поля». Поэтому \vec{A} мы назовем «квази-магнитным векторным потенциалом». Ему соответствует определенное «квазимагнитное поле».

Таким образом, на основании (2), (4)–(6), посредством замены $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'(0) \rightarrow -i\Delta$, получаем искомое уравнение для собственных значений энергии и соответствующих им сглаженных собственных функций

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left[\left(i \frac{\partial}{\partial x} + 2\alpha^* \frac{y-x}{r^2} \right)^2 + \left(i \frac{\partial}{\partial y} + 2\alpha^* \frac{y-x}{r^2} \right)^2 \right] - \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\alpha_0}{v} \right\} \Psi_3 = W^{(3)} \Psi_3, \quad (7)$$

где

$$\alpha^* = \frac{b\alpha_1}{2\pi},$$

а индекс 3 обозначает то, что уравнение относится к рассматриваемому эллипсоиду, находящемуся на (положительной части) оси OZ . В данной работе полагаем $E_0(0) = 0$, т. е. энергию отсчитываем от дна зоны проводимости.

Уравнение (7) не изменяется при операциях инверсии и вращении на угол π вокруг оси OZ , т. е. оно остается инвариантным относительно точечной группы симметрии C_{2h} . Поскольку все неприводимые представления этой группы одномерны, все энергетические уровни не вырождены. По свойствам симметрии решения уравнения (7) делятся на четыре типа в соответствии с четырьмя неприводимыми представлениями группы C_{2h} . Одно из них — основное — будет полносимметричным. Остальные три типа решений ведут себя по отношению к операциям C_{2h} соответственно, как x , xz и z .

Введем вместо x и y новые переменные ξ и η по формулам

$$\left. \begin{aligned} \xi &= \frac{1}{\sqrt{2}}(y-x); \quad \eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(y+x) \\ \Psi_3(\vec{r}) &= e^{ik\eta}\varphi^{(3)}(\xi, z). \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

и положим

Тогда из уравнения (7) получим

$$-\frac{\partial^2 \varphi^{(3)}}{\partial \xi^2} - \gamma \frac{\partial^2 \varphi^{(3)}}{\partial z^2} + \left[A \frac{\xi^2}{r^4} - B(k) \frac{\xi}{r^2} - C \frac{1}{r} \right] \varphi^{(3)} = \lambda^{(3)}(k) \varphi^{(3)}. \quad (9)$$

Здесь

$$\begin{aligned} A &= \alpha^{*2}; \quad B(k) = 2\alpha^*k, \quad C = 2\hbar^{-2}m_{\perp}\alpha_0; \\ \lambda^{(3)}(k) &= \frac{2m_{\perp}}{\hbar^2}W^{(3)} - k^2, \quad \gamma = \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}}, \end{aligned} \quad (10)$$

и, в новых переменных, $r^2 = \xi^2 + z^2$.

Согласно (8) (и в соответствии с [4]), движение электронов вдоль оси дислокации является инфинитным. Если решения уравнения (9) соответствуют связанным состояниям и, значит, возможные значения $\lambda^{(3)}$ образуют дискретный спектр $\lambda^{(3)} = \lambda_{nl}^{(3)}(k)$, ($n, l = 0, 1, 2, \dots$), тогда из (10) получается совокупность одномерных дислокационных зон

$$W_{nl}^{(3)}(k) = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [k^2 + \lambda_{nl}^{(3)}(k)].$$

§ 3. Основное состояние

Точное решение уравнения (9) в явном виде затруднительно. Поэтому будем искать приближенное решение этого уравнения, причем ограничимся только основным состоянием. Другими словами, будем интересоваться только нижней дислокационной зоной. Для этой цели воспользуемся вариационным методом и теорией возмущений.

Очевидно, уравнение (9) можно рассматривать как двумерное уравнение Шредингера с потенциалом

$$U(\xi, z) = \frac{\hbar^2}{m_{\perp}} \left[A \frac{\xi^2}{r^4} - B(k) \frac{\xi}{r^2} - C \frac{1}{r} \right]. \quad (11)$$

Необходимо отметить, что все члены этого выражения надо рассматривать как относительно малые и плавно меняющиеся величины (так как предполагается справедливость линейной теории упругости и приближения метода эффективной массы). При этом, интересуясь состояниями, близкими к основному, мы можем считать волновое число k достаточно малым. Поэтому, хотя второй член в (11) содержит деформацию в первой степени, поскольку коэффициент $B(k)$ пропорционален k , его вклад в интересующих нас состояниях можно считать пренебрежимо малым. Далее ясно, что выражение (11) несправедливо при слишком малых значениях расстояния r до оси дислокации. Это будем иметь в виду всегда, когда сингулярность (11) приводит к расходящимся величинам. Как и в континуальной теории дислокации [13], в таких случаях следует оборвать потенциал на некотором расстоянии от оси дислокации r_0 (имеющем порядок постоянной решетки). С этим мы обрезаем «ядро»

дислокации — цилиндра с радиусом r_0 — характеристики которого определяют граничное условие на поверхности обрезания.

Для оценки энергии электрона в нижней дислокационной зоне (при малых k) решим сначала уравнение (9) вариационным методом при $U \rightarrow U_0 = \frac{\hbar^2 C}{m_{\perp} r}$. Получаемые при этом решение $\varphi_0^{(3)}(\vec{r})$ и соответствующее ему собственное значение $\tilde{\lambda}_0^{(3)}$ отвечают отсутствию «квазимагнитного» поля. Величина $U - U_0$ целиком определяется квазимагнитным векторным потенциалом. Если мы будем рассматривать как возмущение и вычислим поправку $\Delta\lambda_0^{(3)}$ к «невозмущенному» значению $\tilde{\lambda}_0^{(3)}$. Пробную функцию возьмем в простейшем виде (точном при $\gamma=1$)

$$\varphi_0^{(3)}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\beta r}. \quad (12)$$

Варьируя по параметру β , после элементарных вычислений получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_0^{(3)} &= -\frac{2C^2}{1+\gamma}, \quad \Delta\lambda_0^{(3)} = \frac{8\pi^2 AC^2}{(1+\gamma)^2} \mu^{(3)}(\beta), \\ \mu^{(3)}(\beta) &= \pi^{-2} E_i(-2\beta r_0), \quad \beta = \frac{2C}{1+\gamma}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $E_i(x)$ — интегральная показательная функция. Величину $\mu^{(3)}$ можно рассматривать как «параметр обрезания» — вместо радиуса r_0 . Ее следует определить из опыта, так же, как и константы деформационных потенциалов.

Отметим, что данное решение соответствует граничному условию

$$\frac{d\varphi_0^{(3)}}{dr} \Big|_{\varphi_0^{(3)}} = -\beta \text{ при } r = r_0.$$

Из (10) и (13) для энергии электрона в нижней дислокационной зоне получаем выражение

$$W_0^{(3)}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\perp}} - W_0^{(3)}(0), \quad (14)$$

где

$$W_0^{(3)}(0) = \frac{4m_{\perp} \alpha_0^2}{\hbar^2 (1+\gamma)} \left(1 + \frac{b^2 \alpha_1^2 \mu^{(3)}}{1+\gamma} \right).$$

Разумеется, в случае $\alpha_1=0$ и $\gamma=1$ оно совпадает с точным результатом работы [5].

В заключение обратим внимание на то, что, по всей видимости, формула (14) дает довольно грубое приближение к точному решению. Она отвечает решению уравнения (9) приближенным методом после усреднения потенциала (11) по азимутальному углу (полярная ось совпадает с осью дислокации). Кроме того, выражение (14) содержит, очевидно, только квадратичный эффект квазимагнитного поля.

§ 4. Движение электронов вокруг остальных минимумов энергии в зоне Бриллюэна

До сих пор мы рассматривали состояния электронов вблизи минимума энергии в точке $(0, 0, k_0)$ зоны Бриллюэна. Состояния вблизи других минимумов рассматриваются вполне аналогичным образом. При этом получается, что для каждого двух эллипсоидов, находящихся на

одной координатной оси, скалярные деформационные потенциалы одинаковы, а векторные потенциалы (как это отмечено и в работе [9]) одинаковы по абсолютной величине, но противоположны по знаку. Из этого следует, что все результаты для движения электронов вокруг минимума энергии в точке $(0, 0, -k_0)$ получаются непосредственно из уже полученных результатов посредством замены α_1 на $-\alpha_1$. Поэтому нужно рассмотреть только движение вокруг минимумов в точках $(k_0, 0, 0)$ и $(0, k_0, 0)$. На основании симметрии кристаллического поля в этих точках и формулы для поля деформации винтовой дислокации, получаем (как и раньше, в линейном приближении по деформации) следующие выражения для скалярных деформационных потенциалов (без дополнительного члена (6)):

$$V_1^{(1)}(\vec{r}) = -V_1^{(2)}(\vec{r}) = \frac{b E_3}{4\pi} \frac{z}{r^2}, \quad (15)$$

и выражения для векторных потенциалов деформации:

$$\begin{aligned} \vec{B}^{(1)}(\vec{r}) &= \frac{b}{4\pi r^2} (\beta_1 z, 0, \alpha_1 (y-x)), \\ \vec{B}^{(2)}(\vec{r}) &= \frac{b}{4\pi r^2} (0, -\beta_1 z, \alpha_1 (y-x)). \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь α_1 , β_1 и E_3 — феноменологические константы, которые мы считаем одинаковыми для всех эллипсоидов энергии из-за соображения эквивалентности трех главных кристаллографических направлений кремния. Индексы 1 и 2 сверху обозначают, что соответствующая величина относится к эллипсоиду, находящемуся на (положительной части) первой и второй оси координат соответственно. Заметим, что E_3 и β_1 представляют собой разности двух диагональных элементов коэффициентных тензоров (аналогичных a_{kl} и b_{kl}^m в (1)) в разложении $E_0(\epsilon_{ij})$ и $\vec{k}_0(\epsilon_{ij})$ по деформации ϵ_{ij} . Очевидно, они будут равны нулю в случае изотропного тензора эффективной массы.

Потенциалам (16) соответствуют определенные квазимагнитные поля. Заметим, что эти поля получаются друг из друга посредством перестановки координат (y, x, z) , причем это относится и к индексам, обозначающим компоненты.

Мы видим, что обычно вводимые потенциалы деформации на этот раз не равны нулю. Из (15) видно, что они имеют дипольный характер. Появление этих потенциалов, как хорошо известно, является результатом анизотропии изоэнергетических поверхностей.

Таким образом, имея в виду (6), (15) и (16), мы приходим к эффективному волновому уравнению для движения электронов вблизи минимума энергии в точке $(k_0, 0, 0)$:

$$\begin{aligned} &\left\{ \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \left(i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{b\beta_1}{4\pi} \frac{z}{r^2} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \right. \right. \\ &\left. \left. + \left(i \frac{\partial}{\partial z} + \frac{b\alpha_1}{4\pi} \frac{y-x}{r^2} \right)^2 \right] + \frac{bE_3}{4\pi} \frac{z}{r^2} - \frac{\alpha_0}{r} \right\} \Psi_1 = W^{(1)} \Psi_1. \end{aligned} \quad (17)$$

Аналогичное уравнение получается и для волновой функции Ψ_2 , описывающей движение электронов вокруг точки минимума $(0, k_0, 0)$. Это уравнение мы не будем писать явно, так как решение его получается из (17) посредством указанной выше перестановки координат (y, x, z) и дополнительных замен

$$\alpha_1 \rightarrow -\alpha_1, \quad \beta_1 \rightarrow -\beta_1, \quad E_3 \rightarrow -E_3. \quad (18)$$

(При этом потенциалы $\vec{B}^{(1)}(\vec{r})$ и $\vec{B}^{(2)}(\vec{r})$ переходят друг в друга.) В отличие от (7) уравнение (17) не обладает никакой симметрией. Непосредственно можно убедиться, что если положить

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(y-x); \quad \eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma y+x), \quad (19)$$

то уравнение (17) допускает решение следующего вида:

$$\Psi_1(\vec{r}) = e^{i k \eta} \varphi^{(1)}(\xi, z). \quad (20)$$

Функция $\varphi^{(1)}$ удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} & -\frac{1+\gamma}{2} \frac{\partial^2 \varphi^{(1)}}{\partial \xi^2} - \frac{\partial^2 \varphi^{(1)}}{\partial z^2} - \frac{i}{r^2} \left(A_1 z \frac{\partial \varphi^{(1)}}{\partial \xi} - B_1 \xi \frac{\partial \varphi^{(1)}}{\partial z} \right) + \\ & + \left[D(k) \frac{z}{r^2} - C \frac{1}{r} + F \frac{\xi^2}{r^4} + G \frac{z^2}{r^4} + i(A_1 - B_1) \frac{\xi z}{r^4} \right] \varphi^{(1)} = \lambda^{(1)}(k) \varphi^{(1)}, \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{\gamma b \beta_1}{2\pi \sqrt{2}}, \quad B_1 = \frac{b a_1}{\pi \sqrt{2}}, \quad C = 2\hbar^{-2} m_{\perp} \alpha_0, \\ D(k) &= \frac{b}{2\pi \sqrt{2}} (\gamma \beta_1 k + \sqrt{2} \hbar^{-2} m_{\perp} E_3), \quad F = \frac{1}{2} \left(\frac{b a_1}{2\pi} \right)^2, \\ G &= \gamma \left(\frac{b \beta_1}{4\pi} \right)^2, \quad \lambda^{(1)}(k) = \frac{2m_{\perp}}{\hbar^2} W^{(1)} - \frac{1}{2} \gamma (\gamma + 1) k^2. \end{aligned} \quad (22)$$

Из (19) и (20) следует, что движение электронов в направлении вектора $(1, \gamma, 0)$ является инфинитным. Из этого сразу заключаем, что движение вблизи точки $(0, k_0, 0)$ вдоль направления вектора $(\gamma, 1, 0)$ также будет инфинитным. Обратим внимание, что в этих двух случаях из-за анизотропии инфинитное движение происходит не параллельно оси дислокации, а под некоторым углом к ней:

$$\omega = \arccos \frac{1+\gamma}{\sqrt{2(1+\gamma^2)}}.$$

Кроме того, ясно, что в случае дискретного спектра уравнения (21) всегда получаются одномерные дислокационные зоны. Таким образом, факт наличия одномерных дислокационных зон оказывается общим для всех эллипсоидов зоны Бриллюэна.

Видно, что полученное уравнение (21) для функции $\varphi^{(1)}$ гораздо сложнее уравнения (9). Получить его точное решение в явном виде, конечно, не удастся. Фаза точного решения уравнения (21), очевидно, должна быть отлична от нуля, т. е. точная функция $\varphi^{(1)}(\vec{r})$ существенно комплексна. В настоящей работе, однако, мы ограничиваемся состояниями электрона вблизи дна нижней дислокационной зоны и довольно грубым чисто вещественным приближением для функции $\varphi^{(1)}$. Как и при решении уравнения (9), мы рассматриваем (21) как двумерное уравнение Шредингера, причем оператор кинетической энергии и член с дополнительным потенциалом $V' \sim -\frac{C}{r}$ рассматриваем как невозмущенную часть гамильтониана, а остальную часть — как возмущение. При решении применяем вариационный метод и теорию возмущения — точно так же, как это делалось в случае уравнения (9). Пробную функцию опять

выбираем в виде (12). После выполнения уже использованной процедуры находим

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_0^{(1)} &= -\frac{4C^2}{3+\gamma}, \quad \Delta\lambda_0^{(1)} = -\frac{16\pi^2 C^2}{(3+\gamma)^2} (F+G)\mu^{(1)}(\beta). \\ \mu^{(1)}(\beta) &= \pi^{-2} E_i(-2\beta r_0), \quad \beta = \frac{4C}{3+\gamma}. \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь, как и раньше, вместо r_0 в качестве «параметра обрезания» можно рассматривать величину $\mu^{(1)}$. Вполне ясным является и граничное условие, накладываемое на поверхности обрезания $r=r_0$. Окончательно для искомой энергии из (22) и (23) получаем:

$$W_0^{(1)}(k) = \gamma(\gamma+1) \frac{\hbar^2 k^2}{4m_{\perp}} - W_0^{(1)}(0),$$

где

$$W_0^{(1)}(0) = \frac{8m_{\perp}\alpha_0^2}{\hbar^2(3+\gamma)} \left[1 + \frac{b^2\mu^{(1)}}{2(3+\gamma)} \left(\alpha_1^2 + \frac{1}{2}\gamma\beta_1^2 \right) \right]. \quad (24)$$

Выражение (24) не изменяется при заменах (18), и, следовательно, в принятом приближении оно совпадает с соответствующим выражением для энергии электрона $W_0^{(2)}(k)$ при его движении вблизи минимума в точке $(0, k_0, 0)$. Разумеется, это, вообще говоря, не будет иметь места в случае более точных решений. Кроме того, сравнение (24) и (14) показывает, что для электронов в анизотропном случае и особенно в присутствии квазимагнитного поля разные эллипсоиды зоны проводимости не являются эквивалентными.

В заключение этого параграфа отметим, что формула (24) является результатом очень грубого решения уравнения (21). Как и при получении формулы (14), и в этом случае в процессе приближенного решения фактически делается полное усреднение гамильтониана взаимодействия по азимутальному углу (полярная ось направлена вдоль оси дислокации). Конечный результат включает в себя только квадратичный эффект квазимагнитного поля, а действие обычного скалярного потенциала (дипольного характера) исключается.

§ 5. Плотность электронов на дислокациях при низких температурах

Полученные нами конечные формулы являются грубоприближенными и справедливыми только при очень малых значениях волнового числа k (для всех эллипсоидов). Они относятся к состояниям, близким к основному в первой дислокационной зоне. Относительно более возбужденных состояний, включающих в себя и следующие дислокационные зоны, мы пока ничего не знаем.

В настоящем параграфе мы предполагаем, что температура рассматриваемого образца достаточно мала, причем практически заселен электронами будет только нижайший уровень связанных состояний. Так как вносимые дислокациями уровни внутри запрещенной зоны могут быть довольно глубокими и близкими к уровню Ферми, в случае низких температур мы будем рассматривать «электронный газ» на дислокациях как вырожденный. Таким образом, химический потенциал для электронов проводимости мы считаем заданным и, кроме того, допускаем, что энергии основных состояний для всех эллипсоидов находятся незначительно ниже уровня Ферми. Из этих предположений следует, что вклад в плотность электронов проводимости n , движущихся

вокруг ν -го эллипсоида, будут давать только те состояния, к которым фактически относятся наши формулы (14) и (24). Следовательно (с учетом спинового вырождения), мы будем иметь

$$n_\nu = \frac{N_d}{\pi L_0} \int dk f^{(0)}(W_0^{(\nu)}(k)), \quad (25)$$

где N_d — средняя плотность дислокаций (см^{-2}); L_0 — длина образца вдоль дислокаций и $f^{(0)}(W)$ — равновесная функция распределения Ферми—Дирака:

$$f^{(0)}(W) = \frac{1}{1 + \exp \frac{W - \eta}{\kappa T}}$$

(η — химический потенциал; κ — константа Больцмана; T — температура). При этом вблизи основного состояния (при малых k) плотность состояний $N_\nu(W)$ дается формулой

$$N_\nu(W) = \frac{N_d}{\pi \hbar L_0} \sqrt{\frac{m_\perp}{c^{(\nu)}}} W^{-1/2},$$

где $c^{(1)} = c^{(2)} = \gamma(\gamma + 1)$; $c^{(3)} = 2$.

В случае, когда хорошо выполняются выше сделанные предположения, формально мы можем брать интеграл в (25) по всем возможным значениям k (т. е. по всем возможным энергиям). Тогда получаем

$$n_\nu = \frac{2N_d}{\pi \hbar L_0} \left(\frac{m_\perp \kappa T}{c^{(\nu)}} \right)^{1/2} F_{-1/2} \left(\frac{W_0^{(\nu)}(0) + \eta}{\kappa T} \right),$$

где $F_{-1/2}(x)$ — функция Ферми—Дирака порядка $-1/2$. Отсюда плотность электронов проводимости за счет всех эллипсоидов будет:

$$n = 2 \sum_{\nu=1}^3 n_\nu.$$

В заключение из всех полученных результатов мы можем сделать следующие выводы:

а) Движение электронов вблизи минимумов энергии в точках $(0, 0, \pm k_0)$ зоны Бриллюэна является инфинитным вдоль оси дислокации, а движение вблизи минимумов в точках $(\pm k_0, 0, 0)$ и $(0, \pm k_0, 0)$ является инфинитным в направлениях векторов $(1, \gamma, 0)$ и $(\gamma, 1, 0)$ соответственно. Из-за сильной анизотропии поверхностей постоянной энергии в кремнии ($\gamma=0,19$), эти два последние направления составляют с осью дислокации угол величиной примерно $\omega=34,3^\circ$. Таким образом, в случае связанных состояний движение всегда происходит в одномерных дислокационных зонах.

б) Благодаря анизотропии изоэнергетических поверхностей и наличию «квазимагнитного» поля, вызываемого винтовой дислокацией, глубина дислокационных уровней в запрещенной зоне неодинакова для движения вокруг разных эллипсоидов зоны Бриллюэна. Для нижайших дислокационных зон эта глубина примерно одинакова для эллипсоидов, находящихся на кристаллографических направлениях $[100]$ и $[010]$.

в) Относительно электрического сопротивления кремния с рассмотренными винтовыми дислокациями (параллельными направлению $[110]$), хотя и в качественном порядке, можно сказать, что оно будет обладать

довольно сильной анизотропией. В зависимости от направления, сопротивление (за счет рассеяния на дислокациях) должно проходить через минимальные (нулевые) значения в направлении дислокаций и в направлениях векторов $(1, \gamma, 0)$ и $(\gamma, 1, 0)$. Конечно, для получения более конкретных количественных результатов нужно решить соответствующую задачу для рассеяния носителей тока на винтовых дислокациях.

Не лишне отметить, что введенные нами «параметры обрезания» $\mu^{(v)}$ в (13) и (23), по-видимому, будут отрицательными. Так получается, если, например, положить радиус «ядра» дислокации $r_0 = \frac{1}{2}b$, где b — величина вектора Бюргерса, и для константы α_0 принять сделанную в работе [5] оценку (в изотропном случае). В принципе это следует ожидать, поскольку «квазимагнитное» поле в нашем случае может влиять на электроны только рассеивающим образом.

Наконец автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю и глубокую благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за предложенную тему и руководство работой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bardsley W. Progr. in semicond., **4**, 155, 1960.
2. Shockley W. Phys. Rev., **91**, 228, 1953.
3. Read W. T. Phil. Mag., **45**, 775, 1954.
4. Бонч-Бруевич В. Л., Гласко В. Б. «Физика тверд. тела», **3**, 36, 1961.
5. Бонч-Бруевич В. Л. «Физика тверд. тела», **3**, 47, 1961.
6. Vardeen J., Shockley W. Phys. Rev., **80**, 72, 1950.
7. Пекар С. И., Дейген М. Ф. ЖЭТФ, **21**, 803, 1951.
8. Рид В. Т. Дислокации в кристаллах. М., ИЛ, 1957.
9. Кгоетег Н. RCA Rev., **18**, No. 3, 332, 1957.
10. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М., Физматгиз, 1962.
11. Блатт Ф. Д. Теория подвижности электронов в твердых телах. М., Физматгиз, 1963.
12. Slater J. C. Phys. Rev., **76**, 1592, 1949.
13. R. de Wit. Solid State Physics., **10**, 249, 1960.

Поступила в редакцию
30. 12 1964 г.

Кафедра
полупроводников