

Вибір теорії, за якою обчислюються параметри порушеного шару, залежить від форми фону додаткової осциляційної структури. При обчисленні профілів величин, які характеризують порушений шар, потрібно розглядати всі локальні мінімуми функції СКВ, а подальший відбір здійснювати з фізичних міркувань, додаткового експерименту чи можливості “хорошого” наближення експериментальної КДВ теоретичною. Для економії часу отримувати дані мінімумів можна здійснювати за кінематичною теорією, а уточнення проводити за динамічною.

1. Ковальчук М.В., Кон В.Г., Лобанович Э.Ф. Измерение малых деформаций в тонких эпитаксиальных пленках кремния методом фотоэлектронной эмиссии, возбужденной стоячей рентгеновской волной // ФТТ. – 1985. – Т.27. – №11. – С.3379–3387.
2. Kato N. Statistical dynamical theory of crystal diffraction. I. General formalism // Acta crystallogr. A. – 1980. – V.36. – №7. – P.763–769.
3. Кушунен В.А. Статистическая динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах с учетом углового распределения интенсивностей // Кристаллография. – 1989. – Т.34. – Вып.2. – С.279–287.
4. Malvarino G., Lagomarsino S., Milani E., Gerard P., Tucciarone A. Reconstruction mechanism in ion implanted yttrium iron garnet films // J. Appl. Phys. – 1988. – V.63. – №8. – P.2751–2755.
5. Сметирійчук Б.К., Федорів В.Д., Кошобинський В.О., Яремій І.П. Механізми дефектоутворення в монокристалічних плівках залізо-ітрієвого гранату при іонній імплантації легкими іонами // Фізика і хімія твердого тіла. – 2003. – Т.4. – №1. – С.112–117.
6. Яремій І.П. Рентгенодифрактометричне дослідження приповерхневих шарів монокристалічних плівок ЗІГ, імплантованих іонами B^+ // Фізика і хімія твердого тіла. – 2003. – Т.4. – №3. – С.451–455.
7. Афиногеев А.М., Фанченко С.С. О восстановлении профилей нарушенных тонких приповерхностных слоев по рентгенодифракционным данным // Доклады Академии наук СССР. – 1986. – Т.287. – №6. – С.1395–1399.
8. Пустелов В.И. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на непрерывно деформированных по толщине приповерхностных слоях монокристаллов с учетом статистики микродефектов // Поверхность. – 1991. – №3. – С.45–49.
9. Пустелов В.И. Длина корреляции в статистической теории рентгеновской дифракции на одномерно искаженных кристаллах с дефектами. Модель дискретно-слоистой структуры // Кристаллография. – 1996. – Т.41. – №1. – С.23–30.
10. Сметирійчук Б.К., Яремій І.П., Кравець В.І. та ін. Про можливість однозначного визначення профілів відносної зміни металопищинної відстані в приповерхневих шарах монокристалів за даними двокристалічної рентгенівської дифрактометрії // Фізика і хімія твердого тіла. – 2002. – Т.3. – №1. – С.148–153.
11. Кравець В.І., Пилипів В.М. Моделювання профілів деформації поверхневих шарів монокристалів // Вісник Національного університету “Львівська політехніка”. Прикладна математика. – 2000. – №411. – С.192–196.

The comparative analysis of possibilities of parameters determination of the is conducted on the basis of different theoretical approaches (kinematic, dynamic and statistical dynamic theories of X rays scattering). The criteria of their use are set. The method of strange profiles calculation and estimation of one-valuedness degree of their determination is improved.

Key words: ferrit-garnet films, strange profiles, X-ray scattering, kinematic and dynamic theories.

УДК 621.315.592

ББК 22.371.26

Д.М. Фреїк, О.Л. Соколов, Ю.В. Кланічка

ВПЛИВ ДИСЛОКАЦІЙ НЕВІДПОВІДНОСТІ НА РУХЛИВІСТЬ НОСІЇВ ЗАРЯДУ У ДВОШАРОВИХ ЕПІТАКСІЙНИХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ СПОЛУК $A^{IV}B^{VI}$

Розраховано рухливість носіїв заряду для бінарних епітаксієвих структур $PbTe/PbS$, $PbTe/PbSe$, $PbTe/EuTe$, вирошених із парової фази на сколах (111) BaF_2 і (001) KCl , у притупленні рухливістю на дислокаціях невідповідності, що утворюються на гетеромежах. Досліджено залежність рухливості носіїв від їх концентрації та густини дислокацій.

Ключові слова: двошарова структура, дислокації невідповідності, просторовий заряд, функціонування носіїв.

Вступ. Епітаксієві плівки на основі сполук $A^{IV}B^{VI}$ інтенсивно вивчаються з можливістю їх використання в приладових структурах, що функціонують в інфрачервоній ділянці оптичного спектра [1, 2]. Зауважимо, що параметри тонкоплівкових активних елементів у

значній мірі визначаються домінуючими механізмами розсіювання [3–5]. Одним із важливих є розсіювання носіїв заряду на дислокаціях невідповідності [6]. У роботі проаналізовано вплив дислокацій невідповідності на рухливість носіїв заряду у двошарових структурах на основі епітаксійних плівок сполук $A^{IV}B^{VI}$, осаджених із парової фази.

I. Геометрична модель дислокацій невідповідності

Як відомо [4, 6], дислокації невідповідності (ДН) утворюються на міжфазній межі “плівка–плівка” чи “плівка–підкладка” за рахунок різних значень параметра ґраток. Експериментальне підтвердження дислокацій невідповідності, які виникають на гетеромежі двошарової структури PbTe/PbSe, показано на рис. 1а, б [7].

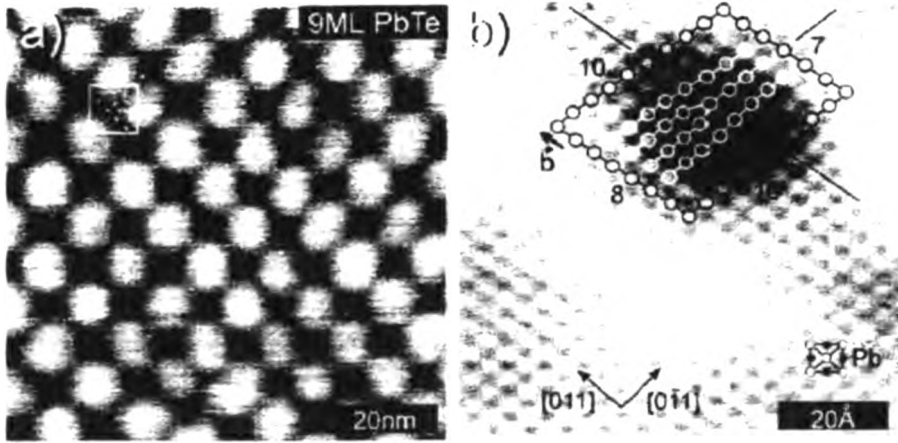


Рис. 1. Дислокації невідповідності, отримані за допомогою скануючого тунельного мікроскопа для двошарової структури PbTe/PbSe з орієнтацією кристалографічних площин у напрямку (100) : а – дислокації невідповідності на гетеромежі плівок; б – опис дислокації невідповідності за допомогою вектора Бюргерса, рівного $\vec{b} = a/2 \langle 011 \rangle$, дислокації, сформовані в напрямку $\langle 0\bar{1}1 \rangle$ [7]

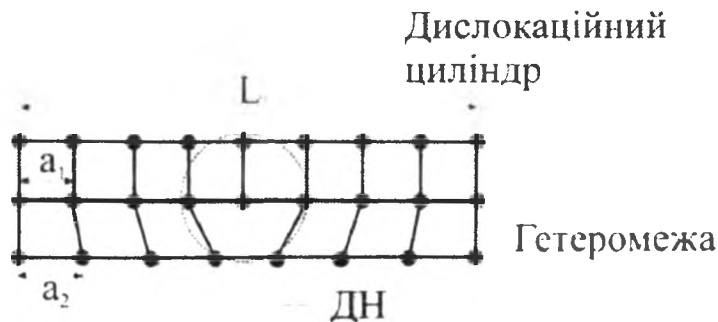


Рис. 2. Геометричне представлення дислокації невідповідності на гетеромежі двох епітаксійних плівок

Густину дислокацій можна розрахувати з геометричних міркувань згідно зі схемою, представленою на рис. 2. Для крайової дислокації характерне “ноніусне” розташування атомних площин: зверху n атомних площин, знизу на тому самому відрізку довжини L $(n-1)$ площин. Знаючи параметри ґраток плівок a_1 і a_2 , можна знайти відстань L , на якій утворюється одна дислокація невідповідності:

$$L = na_2 = \frac{a_2}{a_2 - a_1}. \quad (1)$$

Формула (1) справедлива при орієнтації площин у напрямку (100) для структури NaCl, в якій кристалізуються досліджувані сполуки. Тут періоди шарів на межі плівок рівні сталим граток цих епітаксійних структур. При орієнтації площин у напрямку (111) періоди шарів відповідно будуть становити $\sqrt{2}a_1$, $\sqrt{2}a_2$. Тоді вираз (1) набуде вигляду:

$$L = na_2 = \frac{\sqrt{2}a_2a_1}{a_2 - a_1} \quad (2)$$

Знаючи відстань, на яку припадає одна дислокація невідповідності, можна розрахувати, скільки дислокацій міститься на одиницю довжини і на одиницю площі відповідно:

$$N_l = \frac{1}{L}, \quad N_s = \frac{1}{L^2} \quad (3)$$

Розраховані значення лінійної та поверхневої густин дислокацій невідповідності для двошарових структур із різною кристалографічною орієнтацією площин подано в таблиці.

II. Дислокації невідповідності та розсіювання носіїв

Межі у двофазних епітаксійних структурах можна розглядати як заряджені включення – мікроділянки електростатичного поля, які призводять до зменшення рухливості носіїв

Таблиця

Значення сталих граток (a), відстані, на якій утворюється одна дислокація (L), лінійної (N_l) та поверхневої (N_s) густин дислокацій для епітаксійних двошарових структур на основі сполук $A^{IV}B^{VI}$ із різною кристалографічною орієнтацією

№ п/п	Сполука	Стала гратки, a , Å	L , Å	Лінійна густина, N_l , см ⁻¹	Поверхнева густина, N_s , см ⁻²
1	PbTe/PbS (111)	$a_{PbTe} = 6,452$ $a_{PbS} = 5,935$	104,02	$9,6 \cdot 10^5$	$9,0 \cdot 10^{11}$
2	PbTe/PbS (001)	$a_{PbTe} = 6,452$ $a_{PbS} = 5,935$	73,55	$1,4 \cdot 10^6$	$1,8 \cdot 10^{12}$
3	PbTe/PbSe (111)	$a_{PbTe} = 6,452$ $a_{PbSe} = 6,122$	170,25	$5,9 \cdot 10^5$	$3,4 \cdot 10^{11}$
4	PbTe/PbSe (001)	$a_{PbTe} = 6,452$ $a_{PbSe} = 6,122$	120,38	$8,3 \cdot 10^5$	$6,8 \cdot 10^{11}$
5	PbTe/EuTe (111)	$a_{PbTe} = 6,452$ $a_{EuTe} = 6,583$	461,69	$2,2 \cdot 10^5$	$4,6 \cdot 10^{10}$
6	PbTe/EuTe (001)	$a_{PbTe} = 6,452$ $a_{EuTe} = 6,583$	326,46	$3,1 \cdot 10^5$	$9,3 \cdot 10^{10}$

заряду. Так, зосереджена дислокація в кристалі n-типу є не що інше, як лінійний негативний заряд, навколо якого скупчений позитивний і вже об'ємний заряд. Носій заряду – електрон, який рухається в електростатичному полі дислокації, зазнає розсіювання [8]. Якщо носії заряду рухаються паралельно до дислокацій, то вони будуть захоплюватися акцепторними рівнями, і провідність цих носіїв здійснюється через об'єм дислокацій. При русі носіїв перпендикулярно до лінійних дефектів вони будуть розсіюватись циліндрами просторового заряду. Тому необхідно врахувати їхній вплив на транспорт носіїв. За умови, що дислокації невідповідності формують двовимірну сітку циліндрів (рис.3, а, б), провідність носіїв заряду вздовж ліній дислокацій рівна провідності, яка перпендикулярна до циліндра просторового заряду, і присутній випадковий розподіл дислокацій невідповідності, рухливість носіїв буде визначатись

густиною дислокацій, відношенням концентрації носіїв в об'ємі структури до концентрації всередині циліндра просторового заряду [6]. Згідно з роботою [6], розглянемо два випадки розподілу дислокацій: незначна густина дислокацій (рис.3, а), велика густина дислокацій (рис.3, б). За умови, що кількісну характеристику густини дислокацій описує величина

$$\gamma \equiv l_1/l_0, \quad (4)$$

відношення площі поверхні дислокацій до площі поверхні гетеромежі буде визначатися так:

$$\varepsilon = (1 + \gamma)^2. \quad (5)$$

При $\gamma \ll 1$ і $1/2 \leq \varepsilon < 1$ (рис.3, а) врахуємо паралельні дислокації та смужку, яка складається з острівків об'ємного матеріалу та перпендикулярних дислокацій у напрямку x . Коли $\gamma > 1$ і $\varepsilon \gg 1$ (рис.3, б), використаємо величину квадрата зі стороною $(l_0 + l_1)$, який складається з однієї об'ємної комірки й половини ширини дислокації на кожному боці. Замінюючи квадратний профіль кругами рівної площі й беручи до уваги те, що взаємодії між блоками немає, можна використати підхід для непровідних ділянок [6].

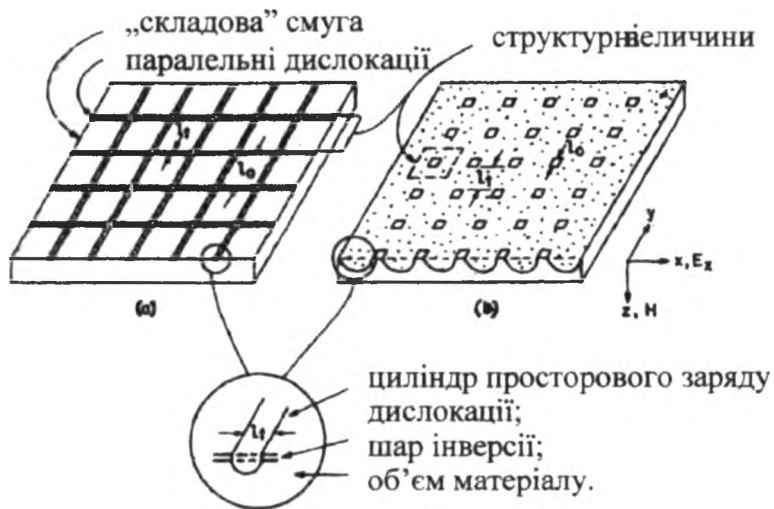


Рис.3. Геометрична модель дислокацій невідповідності: а – для малої площі зарядженого просторового циліндра дислокацій; б – площа дислокацій є великою. l_1 – ширина області просторового заряду дислокацій, l_0 – міждислокаційна відстань [6]

III. Розрахунок рухливості носіїв

Для розрахунку рухливості носіїв заряду використаємо три набори величин: n_1, μ_1, σ_1 – значення в об'ємі дислокаційних циліндрів; n_0, μ_0, σ_0 – в об'ємі плівки; $\bar{n}, \bar{\mu}, \bar{\sigma}$ – середні значення по цілому зразку. Тоді відносна рухливість, що визначає вплив дислокацій, буде:

$$\beta \equiv \mu_1/\mu_0, \quad (6)$$

де μ – рухливість носіїв, n – концентрація носіїв, σ – питома електропровідність відповідно.

Якщо $\beta \ll 1$, тоді середнє значення концентрації носіїв заряду, тобто кількість вільних та захоплених носіїв, можна представити виразом:

$$\bar{n} = [n_0 + \gamma(2 + \gamma)n_1]/(1 + \gamma)^2, \quad (7a)$$

або

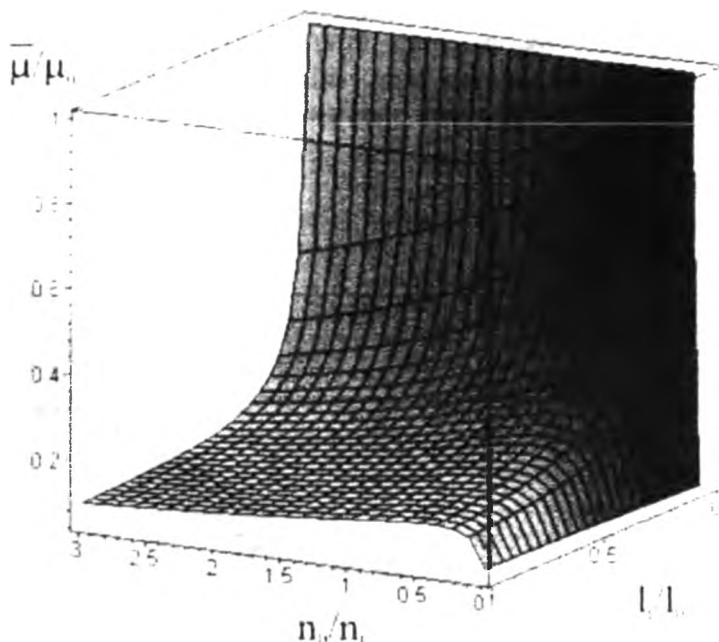


Рис. 4. Залежність відносної рухливості $\bar{\mu}/\mu_0$ плівки PbTe/EuTe від значень відносних концентрацій n_0/n_i та густини дислокації γ ($0 < \gamma < 1$) – мала густина дислокацій

$$\bar{n} = \epsilon n_0 + (1 - \epsilon) n_i. \tag{76}$$

При малій величині γ середня провідність дається:

$$\bar{\sigma} = (l_0 + l_i)^{-1} (l_0 \sigma_0 + l_i \sigma_i). \tag{8a}$$

Провідність в об'ємі матеріалу можна записати так:

$$\sigma_0 = (l_0 + l_i) \sigma_0 \sigma_i / (l_0 \sigma_i + l_i \sigma_0). \tag{9}$$

Майже на увазі (8a) і (9), відношення середнього значення рухливості носіїв до об'ємної рухливості в плівці можна подати виразом

$$\bar{\mu} / \mu_0 = \bar{\sigma} n_0 / \sigma_0 \bar{n}. \tag{10}$$

Виконавши математичні перетворення та використавши попередні рівняння (4), (6), (7a), (8a), отримаємо співвідношення для обчислення відносної рухливості при малих значеннях γ (див. док. а):

$$\frac{\bar{\mu}}{\mu_0} = \left[\frac{1}{\beta(n_i/n_0) + \gamma} + \frac{\gamma}{1 + \gamma} \right] \left[\frac{(1 + \gamma)^2 \beta}{(n_0/n_i) + \gamma(2 + \gamma)} \right]. \tag{11a}$$

На основі рівнянь (6), (76), (10) відносна рухливість для великої густини дислокацій невідповідності ($\gamma > 1$) буде:

$$\frac{\bar{\mu}}{\mu_0} = \beta \left\{ 1 - \epsilon \left[\frac{\beta - (n_0/n_i)}{\beta + (\beta + (n_0/n_i))} \right] \right\}^{-1} \left[1 - \epsilon \left(1 - \frac{n_0}{n_i} \right) \right]^{-1}. \tag{11b}$$

IV. Експеримент. Аналіз результатів

Тонкі плівки PbTe/PbS, PbTe/PbSe, PbTe/EuTe отримували методом гарячої стінки згідно з [9]. Як підкладки використовували свіжі сколи (111) монокристалів BaF₂ і (001) монокристалів KCl. Температурні режими процесу вирощування такі: температура

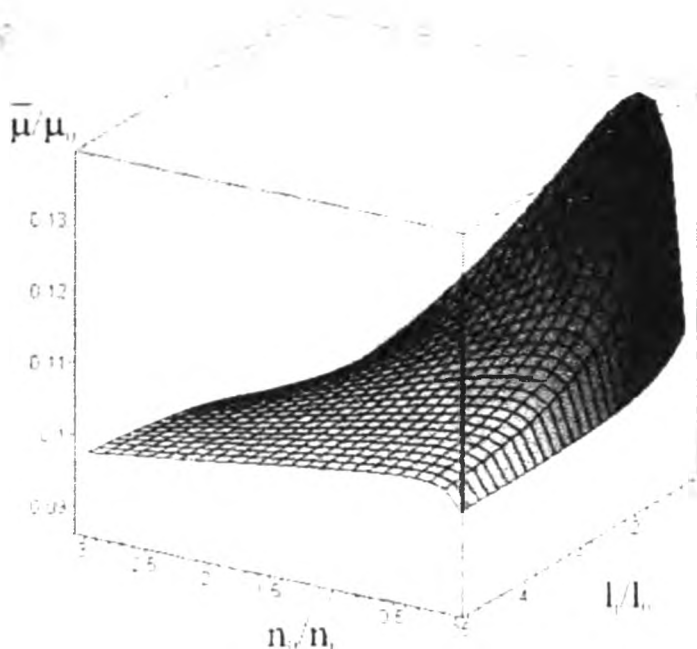


Рис.5. Залежність відносної рухливості $\bar{\mu}/\mu_0$ плівок PbTe/PbS і PbTe/PbSe від відносних значень концентрації n_0/n_1 та густини дислокацій γ ($1 < \gamma < 5$) – велика густина дислокацій

вирощування – $T_c = 820$ К; температура стінок камери – $T_w = 850$ К; температура підкладки – $T_s = (420 - 700)$ К. Швидкість росту плівок складала $1 - 3$ нмс⁻¹, а їх товщина – $0,1 - 2,0$ мкм. Сандвіч структури вирощували по черговим осадженням телуриду свинцю на попередньо нанесений підшар PbS, PbSe, EuTe відповідно.

Структура плівок досліджувалася методами електронграфії та рентгенографії. Установлено, що плівки являють собою епітаксійні структури із збереженням паралельної орієнтації відносно площин сколу монокристалічних підкладок.

Маючи на увазі те, що просторовий заряд циліндричної дислокації згідно з [10] складає в середньому біля 200 \AA , і використовуючи розраховані дані (таблиця), величина γ (4) для двошарових структур PbTe/PbS, PbTe/PbSe є більшою за одиницю ($\gamma > 1$), що відповідає випадку на рис.3, б, тобто великій густині дислокацій. Для структури PbTe/EuTe величина γ (4) є меншою за одиницю, що відповідає малій густині дислокацій (рис.3, а). Це зрозуміло, оскільки в першому випадку відносна зміна постійної ґратки $\delta = \frac{|a_2 - a_1|}{a_1}$ складає значну

величину ($\delta = 8,6\%$ для PbTe/PbS; $\delta = 5,3\%$ для PbTe/PbSe), а в другому, для гетеросистеми PbTe/EuTe, – тільки $\delta = 1,5\%$. Це дає підставу стверджувати, що вирази (11а) повинні описувати залежності рухливості для гетеросистеми PbTe/EuTe (рис.4), а (11б) для PbTe/PbS і PbTe/PbSe (рис.5) відповідно.

Аналіз одержаних співвідношень (11,а) та (11,б), а також їх просторових діаграм (рис.4 і рис.5) однозначно вказує на зменшення величини рухливості носіїв заряду зі збільшенням густини дислокацій: $\bar{\mu}/\mu_0$ спадає зі зростанням γ . Останнє зумовлене збільшенням внеску розсіювання на дислокаціях невідповідності. При $\gamma = 0$ рухливість в об'ємі плівок і на гетеромежі збігається ($\bar{\mu}/\mu_0 = 1$) (рис.4), що відповідає відсутності дислокацій невідповідності. Зауважимо, що це можливо тільки при ідеальному збігові значень параметрів ґраток

гетероепітаксійних структур. Рухливість носіїв зі збільшенням концентрації вільних носіїв (n_0/n_i – зростає) зменшується (рис.4, 5), що є характерним для напівпровідників узагалі [11]. У нашому випадку за рахунок обмеженої провідності непровідної дислокаційної ділянки вільні носії переважно будуть міститися в об'ємі гетероструктури. Це й зумовлює зростання розсіювання носіїв між собою і, відповідно, зменшення спостережуваної рухливості.

Установлені вище загальні закономірності мають деякі відхилення для ділянки малих ($n_0/n_i < 0,5$) і великих ($n_0/n_i > 2$) значень відносної концентрації вільних носіїв (рис.4, 5). У першому випадку $\bar{\mu}/\mu_0$ при подальшому зменшенні концентрації вільних носіїв в об'ємі (n_0) починає спадати (рис.4, 5). Це може бути зумовлене переважанням провідності на заряджених дислокаційних циліндрах відносно об'ємної, що є причиною зменшення величини рухливості та більш ефективного впливу дислокацій невідповідності на механізми розсіювання. При великих же концентраціях носіїв їх рухливість стає нечутливою до густини дислокацій, і тому рухливість має тенденцію до насичення (рис.5) внаслідок переважання об'ємної провідності.

Висновки

1. Проаналізовано геометричні моделі дислокацій невідповідності для двошарових гетероструктур на основі епітаксійних плівок сполук $A^{IV}B^{VI}$. Визначено лінійні та поверхневі густини крайових дислокацій.

2. Подано вирази для визначення рухливості носіїв заряду при малих і значних густинах дислокацій невідповідностей.

3. Побудовані просторові діаграми залежності рухливості носіїв заряду від концентрації вільних носіїв і величини, що характеризує густину дислокацій.

4. Установлено, що із збільшенням як густини дислокацій, так і концентрації вільних носіїв величина рухливості гетероструктур має чітко виражену тенденцію до зменшення.

1. Сизов Ф.Ф. Твёрдые растворы халькогенидов свинца и олова и фотоприёмники на их основе // Зарубежная электронная техника. – 1977. – Т.24. – С.31–48.
2. Holloway H. Thin Films IV–VI semiconductor photodiodes // Physics thin films, New York. – 1980. – V.11. – P.105–203.
3. Vaya P.R., Majht J., Gopalam B.S.V., Dattatrepan C. Thickness Dependence of Hall Mobility of HWE Grown PbTe Films // Phys. Stat. Sol. (a). – 1985. – V.87. – N.341. – P.341–350.
4. Александрова О.А., Бондоков Р.Ц., Саунин Н.В., Таиров Ю.М. Подвижность носителей заряда в двухслойных структурах PbTe/PbS // Физика и техника полупроводников. – 1998. – Т.32. – №9. – С.1064–1068.
5. Фреїк Д.М., Пасічняк В.Ф., Соколов О.Л., Дзундза Б.С. Особливості розсіювання носіїв заряду в епітаксійних структурах на основі халькогенідів свинцю // Фізика і хімія твердого тіла. – 2004. – Т.5. – №3. – С.455–459.
6. Neumark G.F. Theory of the Influence of Misfit Dislocations on Interfacial Mobility and Hall Effect // Phys. Rev. (b). – 1970. – V.1. – N.6. – P.2613–2622.
7. Wiesauer K., Springholz G. Nano-Scale Dislocation Patterning in PbTe on PbSe (100) Heteroepitaxy Studied by Scanning Tunneling Microscopy // Proceedings GMe Forum 2001. – 2001. – P.209–212.
8. Матарє Г. Електроника дефектов в полупроводниках. – М.: Мир, 1974.
9. Фреїк Д.М., Галушак М.А., Межиловская Л.И. Физика и технология полупроводниковых пленок. – Львів: Вища школа, 1988. – 152 с.
10. Фреїк Д.М., Соколов О.Л., Матеїк Г.Д. Розсіювання носіїв заряду в двошаровій гетероструктурі n-PbTe/p-PbS // Фізика і хімія твердого тіла. – 2004. – Т.5. – №4. – С.709–715.
11. Шалимова К.В. Физика полупроводников. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.

It is calculated of the charge carrier mobility for the binary epitaxial structures, PbTe/PbS, PbTe/Se, PbTe/EuTe grown from the vapour phase on (111) BaF₂ and (001) KCl on the approximation that there is carrier scattering on dislocations that were generated by interface. The dependence of mobility carrier from the concentration and density are obtained.

Key words: binary structures, misfit dislocations, the space charge, carrier scattering.