

Д.М. Фреїк, В.М. Чобанюк, О.Л. Соколов, М.А. Лоп'янюк

## Дислокації невідповідностей та електронні процеси у двошарових епітаксіальних структурах халькогенідів свинцю

*Фізико-хімічний інститут Прикарпатського університету імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76025, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua*

Наведено результати дослідження особливостей процесів утворення і формування крайових дислокацій невідповідностей (КДН) у гетероструктурах PbTe/PbSe, осаджених на (100) KCl. Запропоновано геометричні моделі дислокацій та проаналізовано їх вплив на рухливість носіїв електричного заряду. Розглянуто транспортні процеси і умови реалізації надпровідного стану у двошарових гетероструктурах PbTe/PbS

**Ключові слова:** епітаксіальні гетероструктури, дислокації, халькогеніди свинцю, механізми розсіювання.

*Стаття постуила до редакції 07.07.2008; прийнята до друку 15.12.2008.*

### Зміст

#### Вступ

1. Дислокаційна структура меж розділу гетероструктур.
2. Надпровідність меж розділу гетероструктур.
3. Моделі дислокацій невідповідностей і рухливість носіїв заряду.
4. Транспортні процеси у двошарових гетероструктурах.

#### Висновки

#### Література

### Вступ

Вивчення фізичних процесів у надтонких напівпровідникових структурах, так званих наноструктурах, дало поштовх до появи нового покоління пристроїв електроніки – резонансні тунельні діоди, одноелектронні транзистори, – які володіють високою швидкодією ( $\sim 10^{12}$  Гц) і широким спектром можливостей [1]. У таких системах геометричний рельєф створює для електронів потенціальні бар'єри, що суттєво впливає як на характер їх руху, так і транспорт заряду. Вибором архітектури наноструктури можна спрямувати рух електронного газу у двовимірному напрямку (двошарові гетероструктури – квантові ями), одновимірному (квантові дроти), або ж зосередити їх у невеликому об'ємі (квантові точки). Зауважимо, що наноструктура розміром  $\sim 20$  нм ( $1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$ ) містить біля 100 атомів у діаметрі і, хоча їх внутрішня частина зберігає кристалічну симетрію, всі властивості сильно залежать від стану

поверхні. У зв'язку із цим на порядку денному стало питання про новий агрегатний стан речовини – наноструктури.

Технологічна реалізація наноструктур визвана розвитком техніки молекулярно-променевої і газової епітаксії із металоорганічних сполук [2]. Крім того отримання наноструктур можливе більш простим шляхом – методом самоорганізації, зокрема, на межі розділу напівпровідникових епітаксійних гетероструктур [3].

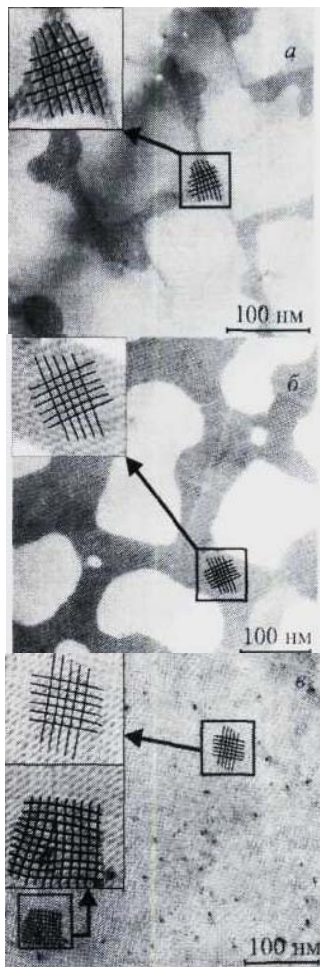
У роботі систематизовано результати досліджень двошарових епітаксіальних структур на основі халькогенідів свинцю.

### I. Дислокаційна структура меж розділу гетероструктур

У роботі [4] для структурного аналізу була виготовлена спеціальна серія зразків PbTe/PbS: в якості першого шару на підкладках (100) KCl для

всіх зразків використовувався PbS товщиною 40 нм. Товщина верхнього шару PbTe змінювалася.

Встановлено, що ріст гетероструктур здійснюється за механізмом Франка Ван-дер-Мерве. На початкових стадіях зростання спостерігається псевдоморфний стан, тобто верхній шар повторює структуру нижнього з тим самим параметром ґратки. Це призводить до накопичення пружної енергії, яка збільшується із зростанням товщини верхнього шару. Релаксація пружних напруг відбувається шляхом утворення регулярної квадратної сітки краєвих дислокацій невідповідностей. Наявність сітки КДН підтверджується результатами електроно-мікроскопічних досліджень «на просвіт» (рис. 1).

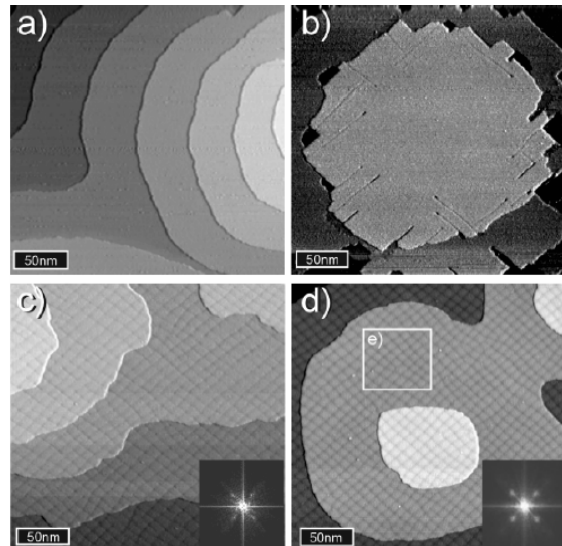


**Рис. 1.** Електронно-мікроскопічне зображення двошарових гетеро структур PbTe/PbS з товщинами шарів PbTe: 1 (а), 3(б), та 30 (в) нм. Товщина шару PbS 40 нм [4].

При досягненні деякої критичної товщини  $d_c$  (для системи PbTe/PbS величина  $d_c \sim 1$  нм) виникають перші одиночні острівці регулярної сітки дислокацій невідповідностей (рис. 1 а). Подальше збільшення товщини призводить до укрупнення острівців (рис. 1 б) і подальшого їх злиття в суцільну сітку дислокацій невідповідностей. При ще більшій товщині суцільна квадратна сітка КДН покриває весь інтерфейс, у якій можуть бути деякі локальні дефекти, наприклад нерегулярності періодичності

(рис. 1 в).

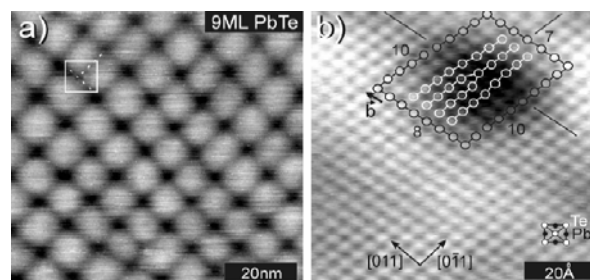
Утворення дислокаційної сітки на межі розділу епітаксійних шарів PbTe/PbSe підтверджується також результатами досліджень на скануючому тунельному мікроскопі (СТМ) [5]: із збільшенням товщини епітаксійно нарощеної плівки PbTe на PbSe/(100) KCl ширина темнопольних ліній зменшується (рис. 2 а-д). При цьому критичною товщиною шару у якому починає формуватися дислокаційна сітка складає 0,4 моношару. При товщині плівки PbTe вже більше як 4



**Рис. 2.** Зображення скануючого електронного мікроскопа шарів PbTe осаджених на поверхню (100) PbSe при різній товщині: (а) – 0,3; (б) – 0,8; (с) – 4,5; (д) – 9 моношарів [5].

моношарів має місце регулярна сітка дислокацій невідповідностей із періодом  $\sim 10$  нм. Повністю релаксація напруг у гетероструктурі завершується при товщинах плівки у 9 моношарів

На рис. 3 зображено розміщення атомів у площині, в якій утворюється крайова дислокація невідповідностей. Її можна описати за допомогою вектора Бюргерса  $b = a/2[011]$ , який відповідає



**Рис. 3.** Зображення скануючого електронного мікроскопа 9 моношарів PbTe осаджених на поверхню (100) PbSe [5].

кристалічній ґратці типу NaCl, що кристалізуються халькогеніди свинцю. Так як вектор Бюргерса направлений паралельно до межі розділу у гетероструктурі, тому дислокації невідповідностей не можуть утворюватися в азимутальному напрямку.

Вони формуються нормально до межі розділу гетероструктури і сприяє цьому збільшення товщини епітаксialного шару. Крім того вектор Бюргера перпендикулярний до ліній дислокацій невідповідностей, які розміщені по чотирьох напрямках  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ . Це є причиною утворення граней із красивих дислокацій невідповідностей. Утворена таким чином сітка дислокацій невідповідностей визначається доброю регулярністю за рахунок наявності сил відштовхування між дислокаціями та високою дислокаційною рухливістю в області межі розділу. Це підтверджується гістограмами розподілу величини періоду дислокаційної сітки від товщини епітаксialного шару (рис. 4). Видно, що при збільшенні товщини шару величина дисперсії

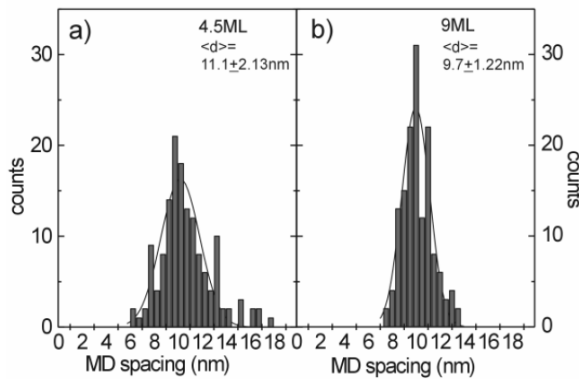


Рис. 4. Гістограма розподілу величини періоду дислокаційної сітки від товщини PbTe: а) 4,5 і б) 9 моношарів[5].

періоду сітки дислокацій зменшується.

Густину дислокацій можна розрахувати із геометричних міркувань згідно схеми, представленій на рис. 5. 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 невідповідностей:

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

Формула (1) справедлива для випадку орієнтації площин у напрямку (100) для структури NaCl, у якій кристалізуються досліджувані сполуки. Тут періоди шарів на межі плівок рівні сталим ґраток цих епітаксialних структур. У випадку орієнтації площин у напрямку (111) періоди шарів відповідно будуть

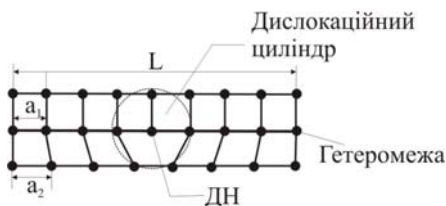


Рис. 5. Геометричне представлення дислокації невідповідності на гетеромежі двох епітаксialних плівок[6].

становити  $\sqrt{2}a_1, \sqrt{2}a_2$ . Тоді вираз (1) прийме вигляд:

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

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

$$N_1 = \frac{1}{L}, \quad N_s = \frac{1}{L^2} \quad (3)$$

Розраховані значення лінійної та поверхневої густин дислокацій невідповідностей для двошарових структур з різною кристалографічною орієнтацією площин подано в табл. 1.

## II. Надпровідність меж розділу гетероструктур

У роботі [4] проведено експериментальне дослідження і виконаний порівняльний аналіз надпровідних властивостей двошарових гетеросистем і надґраток (НГ) PbTe/PbS різної товщини напівпровідникових шарів. На рис. 6 представлені температурні залежності опору для двошарової гетероструктури PbTe/PbS ( $d_{1,2} = 100 \text{ nm}$ ) і поодиноких плівок PbTe (200 нм), PbS (85 нм), виготовлених за тих же умов, що і двошарові системи.

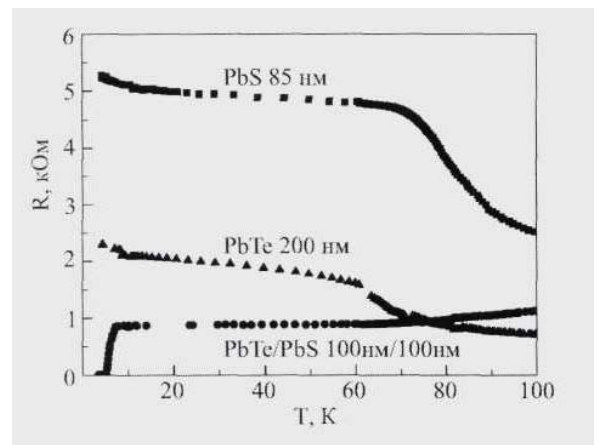


Рис.6. Температурні залежності опору плівок PbTe, PbS і двошарової гетероструктури PbTe/PbS  $d_{1,2} = 100 \text{ nm}$  в розширеному діапазоні температур у нульовому магнітному полі [4].

Плівки не проявляють надпровідності вище 0,3 К, тоді як двошарова структура з одним інтерфейсом демонструє перехід в надпровідний стан з  $T_c = 5,8 \text{ K}$  і металічний хід опору у нормальному стані. Така радикальна відмінність у поведінці поодиноких плівок і двошарових гетероструктур вказує на те, що саме наявність межі розділу між напівпровідниковими плівками веде до металізації зразка (з'являється характерний для металів хід опору) і виникнення надпровідності.

На рис. 7 представлені резистивні переходи для двошарових гетероструктур з різною товщиною

Таблиця 1

Значення сталих ґраток (а), відстані на якій утворюється одна дислокація (L), лінійної ( $N_l$ ) і поверхневої ( $N_s$ ) густини дислокацій для епітаксійних двошарових структур на основі сполук  $A^{IV}B^{VI}$  із різною кристалографічною орієнтацією [6].

№ п/п	Сполука	Стала ґратки а, Å	L, Å	Лінійна густина, $N_l$ , см <sup>-1</sup>	Поверхнева густина $N_s$ , см <sup>-2</sup>
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	$3,1 \cdot 10^5$	$9,3 \cdot 10^{10}$

напівпровідникових шарів і одну НГ з товщиною шарів  $d_{1,2} = 120$  нм. Як видно, резистивні переходи двошарових систем відрізняються від звичайних, які спостерігаються для надґраток. Тоді як для НГ має місце різкий перехід в надпровідний стан ( $\sim 0,1$  К), для всіх двошарових зразків перехід значно розширений (ширина переходу може бути більше 2 К). Можливо, більше розширення резистивного переходу в двошарових структурах пов'язано з низькою розмірністю надпровідного шару.

На рис. 8 представлені залежності температур надпровідного переходу від товщини напівпровідникового шару  $d_{PbS}$  для симетричних ( $d_{PbS} = d_{PbTe}$ ) двошарових гетероструктур, тришарових структур і надґраток PbTe/PbS різного типу як симетричних, так і несиметричних ( $d_{PbS} \neq d_{PbTe}$ ). Для НГ із збільшенням товщини від 7,5 до 20 нм значення  $T_c$  швидко збільшуються. При  $d_{PbS} \approx 50$  нм критична температура проявляє тенденцію до виходу на

насичення. Значення  $T_c$  для тришарових структур укладаються в той самий коридор, в якому знаходяться величини критичної температури для багатошарових зразків. Розкид експериментальних даних для двошарових гетероструктур значно більший, ніж у разі НГ, хоча спостерігається та ж сама тенденція зростання критичної температури із збільшенням товщини напівпровідникових шарів і вихід на насичення. Слід зазначити, що величини  $T_c$  двошарових структур при великій товщині, як правило, нижче, ніж такі для НГ. Зустрічаються, однак, і окремі двошарові структури з такими ж  $T_c$ , як такі для НГ. Істотною ж відмінністю властивостей двошарових систем від НГ є відмінність в мінімальній товщині шару, при якій з'являється надпровідність. У разі НГ повний перехід в надпровідний стан спостерігається для зразків з  $d \geq 10$  нм, тоді як для двошарових гетероструктур -

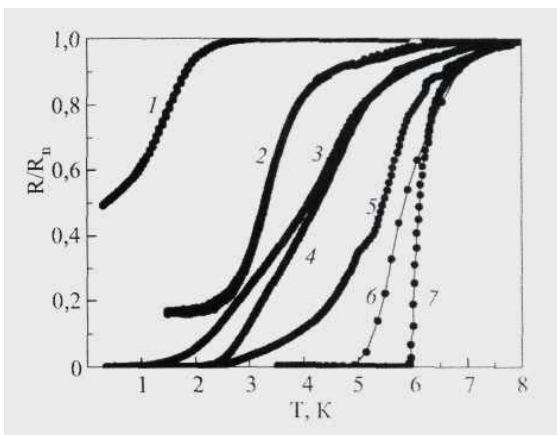


Рис. 7. Резистивні переходи двошарових гетероструктур PbTe/PbS:  $d_1 = 30$  нм,  $d_2 = 40$  нм (1);  $d_{1,2} = 60$  нм (2);  $d_{1,2} = 70$  нм (3);  $d_{1,2} = 80$  нм (4);  $d_{1,2} = 80$  нм (5);  $d_{1,2} = 100$  нм (6) і однієї надґратки з  $d_{1,2} = 120$  нм.  $n = 8$  (7) у нульовому магнітному полі [4].

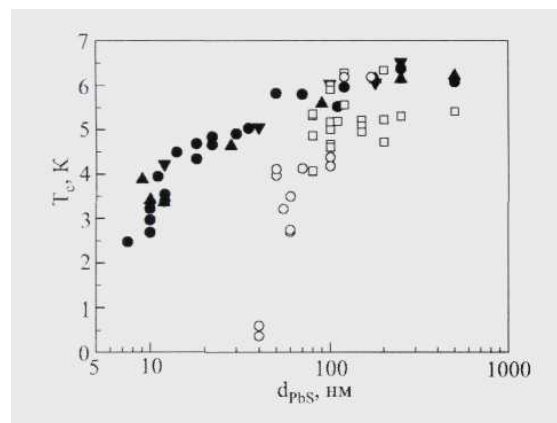
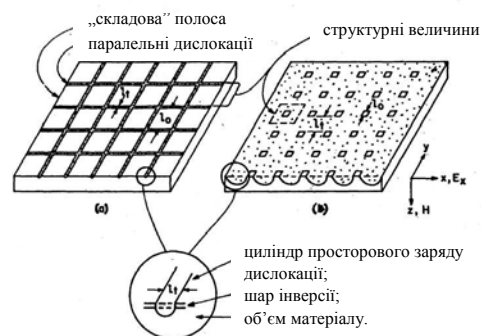


Рис. 8. Залежності критичних температур від товщини напівпровідникового шару  $d_{PbS}$ : двошарові гетероструктури з неповним переходом у надпровідний стан (○), двошарові гетероструктури з повним переходом у надпровідний стан (□), тришарові структури (▼), симетричні  $d_{PbS} = d_{PbTe}$  (●) і несиметричні  $d_{PbS} = d_{PbTe}$  надґратки PbTe/PbS (■)[4].

тільки при товщині шарів більш ніж 70 нм. В всіх двошарових структурах з товщиною  $d < 30$  нм присутності надпровідності не виявлено. Таким чином повний перехід в надпровідний стан і металічний хід опору у разі двошарових гетероструктур завжди спостерігається тільки при такій товщині напівпровідникових шарів, починаючи з якої сітка дислокацій невідповідності стає достатньо досконалою і покриває весь інтерфейс.

### III. Моделі дислокацій невідповідностей і рухливість носіїв заряду

Межі у двофазних епітаксійних структурах можна розглядати як заряджені включення – деякі мікрообласті електростатичного поля, які призводять до зменшення рухливості носіїв заряду. Так, зосереджена дислокація у 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 у електростатичному полі дислокації зазнає розсіювання [7]. Якщо носії заряду рухаються паралельно до дислокацій, то вони будуть захоплюватися акцепторними рівнями і провідність цих носіїв здійснюється через об'єм дислокацій. У випадку руху 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. 9,а,б) а також, що 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. У роботі [8]



**Рис. 9.** 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 [8].

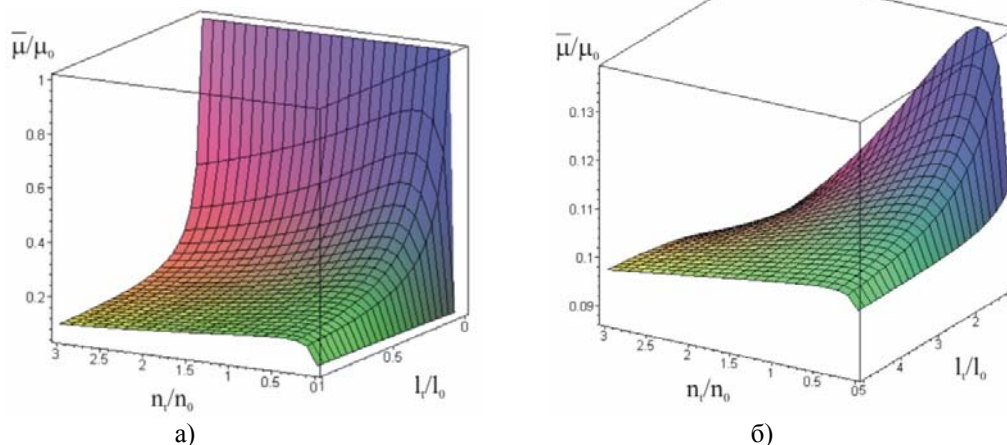
розглянуто два випадки розподілу дислокацій: незначна густина дислокацій (рис. 9,а), велика густина дислокацій (рис. 9,б). За умови, що кількісну характеристику густини дислокацій описує величина

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

то відношення площі поверхні дислокацій до площі поверхні гетерограниці буде визначатись

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

У випадку  $\gamma \ll 1$  і  $1/2 \leq \varepsilon < 1$  (рис. 9 а), необхідно врахувати паралельні дислокації і полосу, яка складається з островків об'ємного матеріалу та перпендикулярних дислокацій в напрямку  $x$ . Коли  $\gamma > 1$  і  $\varepsilon \gg 1$  (рис. 9 б) використано величину квадрата зі стороною  $(l_0 + l_1)$ , який складається з однієї об'ємної комірки і половини ширини дислокації на кожній стороні. Замінюючи квадратний профіль кругами рівної площі і приймаючи до уваги, що взаємодії між блоками немає можна використати



**Рис. 10.** Залежність відносної рухливості  $\bar{\mu}/\mu_0$  від значень відносних концентрацій  $n_0/n_i$  та густини дислокацій  $\gamma$  для гетероструктур: а – PbTe/EuTe (мала густина дислокацій); б – PbTe/PbS і PbTe/PbSe (велика густина дислокацій) [6].

підхід для непровідних областей [8].

Для розрахунку рухливості носіїв заряду використано три набори величин:  $n_t$ ,  $\mu_t$ , і  $\sigma_t$  – значення в об'ємі дислокаційних циліндрів;  $n_0$ ,  $\mu_0$ , і  $\sigma_0$  – в об'ємі плівки;  $\bar{n}$ ,  $\bar{\mu}$ ,  $\bar{\sigma}$  – середні значення по цілому зразку. Тоді відносна рухливість, що визначає вплив дислокацій буде

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

де  $\mu$  – рухливість носіїв,  $n$  – концентрація носіїв,  $\sigma$  – питома електропровідність відповідно.

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

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

або

$$\bar{n} = \epsilon n_0 + (1 - \epsilon)n_t. \quad (7б)$$

Для випадку малої величини  $\gamma$ , середня провідність дається

$$\bar{\sigma} = (1_0 + 1_t)^{-1} (1_0 \sigma_0 + 1_t \sigma_t). \quad (8a)$$

Провідність в об'ємі матеріалу можна записати як:

$$\sigma_0 = (1_0 + 1_t) \sigma_0 \sigma_t / (1_0 \sigma_t + 1_t \sigma_0). \quad (9)$$

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

$$\bar{\mu} / \mu_0 = \bar{\sigma} n_0 / \sigma_0 \bar{n}. \quad (10)$$

Виконавши математичні перетворення та використавши попередні рівняння (4), (6), (7a), (8a) отримаємо співвідношення для обчислення відносної рухливості при малих значеннях  $\gamma$  (випадок а):

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

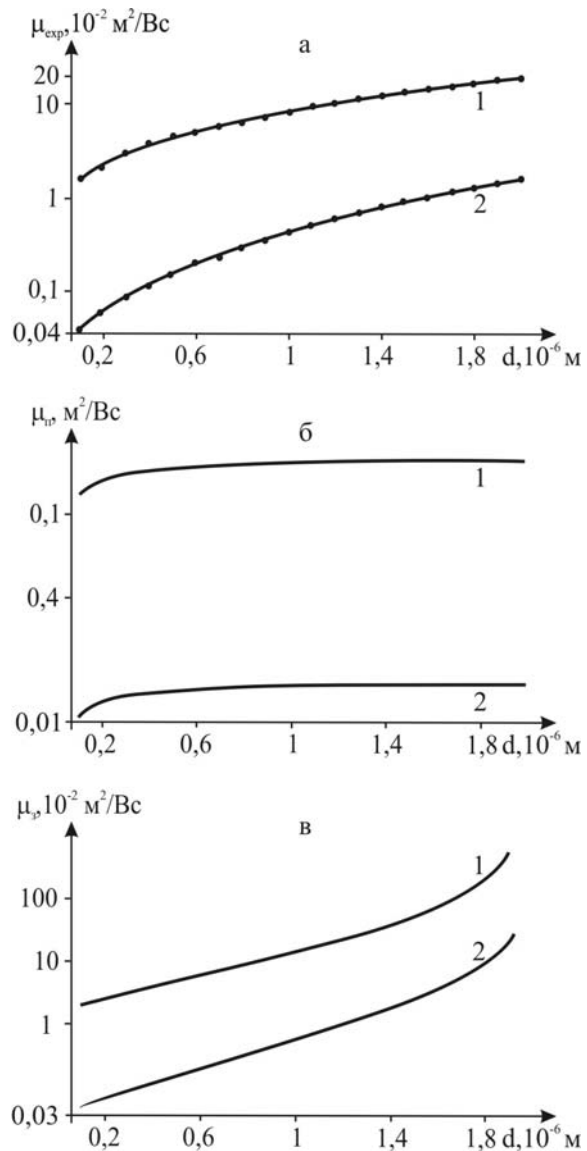
На основі рівнянь (6), (7б), (10) відносна рухливість для великої густини дислокацій невідповідності ( $\gamma > 1$ ) буде:

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

Аналіз одержаних співвідношень (11,a) і (11,б), а також їх просторових діаграм (рис. 10 а,б) однозначно вказують на зменшення величини рухливості носіїв заряду із збільшенням густини дислокацій:  $\bar{\mu}/\mu_0$  спадає із зростанням  $\gamma$ . Останнє обумовлено збільшенням внеску розсіювання на дислокаціях невідповідностей. При  $\gamma = 0$  рухливість в об'ємі плівок і на гетероємі співпадають ( $\bar{\mu}/\mu_0 = 1$ , рис. 10,а), що відповідає відсутності дислокацій невідповідності. Зауважимо, що це можливо тільки при ідеальному співпаданні значень параметрів ґраток гетероепітаксійних структур. Рухливість носіїв із збільшенням концентрації вільних носіїв ( $n_0/n_t$  – зростає) зменшується (рис. 10 а,б), що є характерним для напівпровідників взагалі [9]. У нашому випадку за рахунок обмеженої провідності непровідної дислокаційної області, вільні носії переважно будуть знаходитись в об'ємі

гетероструктури. Це і обумовлює зростання розсіювання носіїв між собою і, відповідно, зменшення спостережуваної рухливості.

Встановлені вище загальні закономірності мають деякі відхилення для області малих ( $n_0/n_t < 0,5$ ) і великих ( $n_0/n_t > 2$ ) значення відносної концентрації вільних носіїв (рис. 10 а, б). У першому випадку  $\bar{\mu}/\mu_0$  при подальшому зменшенні концентрації вільних носіїв в об'ємі ( $n_0$ ) починає спадати (рис. 10 а, б). Це може бути обумовлено переважання провідності на заряджених дислокаційних циліндрах, по відношенню до об'ємної, що є причиною зменшення величини рухливості і більш ефективного впливу дислокацій невідповідності на механізми розсіювання. При великих ж концентраціях носіїв їх рухливість стає не чутливою до густини дислокацій і тому рухливість має тенденцію до насичення (рис. 10,б) внаслідок переважання об'ємної



**Рис. 11.** Залежність експериментально визначеної  $\mu_{\text{exp}}$  (а), поверхневої  $\mu_n$  (б) та залишкової  $\mu_s$  (в) рухливості плівок n-PbTe (1) і n-PbS (2) від товщини d [15].

провідності.

#### IV. Транспортні процеси у двошарових гетероструктурах

Плівки отримували з парової фази методом гарячої стінки на свіжих сколах (111) монокристалів  $\text{BaF}_2$  [10]. Температурні режими процесу вирощування становили: температура вирощування  $T_c = 820$  К; температура стінок камери  $T_w = 850$  К; температура підкладки  $T_s = (420 - 700)$  К. Швидкість росту плівок складала  $1-3 \text{ нмс}^{-1}$ , а їх товщина –  $0,1-2,0$  мкм.

Для досліджень були приготовлені як плівки  $n\text{-PbTe}$  і  $n\text{-PbS}$ , так і гетероструктури із рівними значеннями товщин окремих шарів і різною загальною товщиною, а також із однаковою загальною товщиною і різним співвідношенням товщин окремих шарів.

Для одношарових плівок залежність експериментальних значень рухливостей  $\mu_{\text{exp}}$  від товщини (рис. 11,а) можна представити у вигляді поліномів четвертого степеня:

$$\mu_{\text{exp}} = a_0 x^4 + a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4,$$

де  $a_i$  – розмірні коефіцієнти, а  $x$  відповідає за розмірністю товщині плівок  $d$  (м). Для досліджуваних плівок  $n\text{-PbS}$  (2) і  $n\text{-PbTe}$  (1) цими поліномами будуть вирази відповідно

$$\mu_{\text{exp}_1} = -0,45 \cdot 10^{22} d^4 + 0,179 \cdot 10^{17} d^3 - 0,614 \cdot 10^{10} d^2 + 66115,36 d + 0,0092, \quad (12)$$

$$\mu_{\text{exp}_2} = 0,184 \cdot 10^{21} d^4 - 0,266 \cdot 10^{15} d^3 + 0,303 \cdot 10^{10} d^2 + 1072 d + 0,00027. \quad (13)$$

Характерною особливістю залежностей  $\mu_{\text{exp}}(d)$  є значне зменшення рухливості носіїв заряду для області малих значень товщин  $d < 1,0$  мкм (рис. 11,а).

Для двошарових структур, що включають неоднорідності концентрації і рухливості носіїв заряду вираз для ефективної рухливості у загальному випадку  $\mu_{\text{eff}}$  має вигляд [11]:

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_{\text{exp}_1} (1 + \beta)^{-1} + \mu_{\text{exp}_2} (1 + \beta^{-1})^{-1}, \quad (14)$$

де  $\beta = \sigma_2 d_2 / \sigma_1 d_1$ ,  $\sigma_1 d_1$  і  $\sigma_2 d_2$  – питомі електропровідності і товщини шарів  $n\text{-PbS}$  (2) і  $n\text{-PbTe}$  (1) відповідно.

Рухливість плівок, виміряна на експерименті  $\mu_{\text{exp}}$  можна представити згідно правила Маттіссена як:

$$\frac{1}{\mu_{\text{exp}}} = \frac{1}{\mu_n} + \frac{1}{\mu_3} + \frac{1}{\mu_v}, \quad (15)$$

тут  $\mu_n$  – рухливість носіїв заряду, обумовлена розсіюванням на поверхні (поверхнева);  $\mu_3$  – залишкова рухливість, яка враховує розсіювання на дислокаціях невідповідності гетеромежі, міжзеренне розсіювання, дефектах росту;  $\mu_v$  – рухливість монокристалу (об'ємна).

Рухливість, пов'язана із розсіюванням на поверхні можна розрахувати згідно [12,13]:

$$\mu_n = \mu_v (1 + \lambda / d)^{-1}, \quad (16)$$

де  $\lambda$  – середня довжина вільного пробігу вільних носіїв заряду.

Об'ємну рухливість  $\mu_v$ , характерну для монокристалів визначили з врахуванням розсіювання на екранованому кулонівському потенціалі вакансій, деформаційних потенціалах акустичних і оптичних фононів, поляризаційному потенціалі оптичних фононів і взаємодії між носіями (табл. 2) [13].

З іншого боку, розсіювання на дислокаціях можна представити у наближенні часу релаксації  $\langle \tau \rangle$ :

$$\mu_d = \frac{e \langle \tau \rangle}{m^*},$$

де  $m^*$  – ефективна маса носіїв заряду;  $e$  – заряд електрона. Так як час релаксації визначається співвідношенням [14]

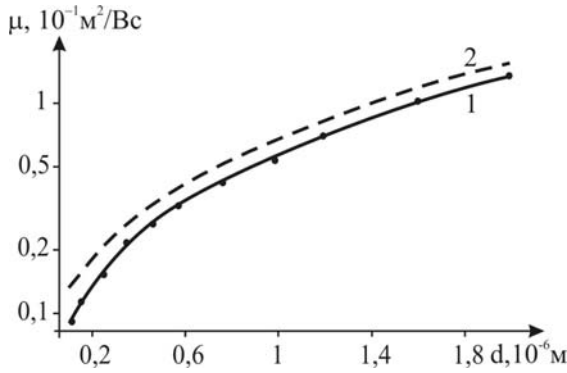
$$\langle \tau \rangle = \frac{3}{8RN_n v},$$

вираз для рухливості буде

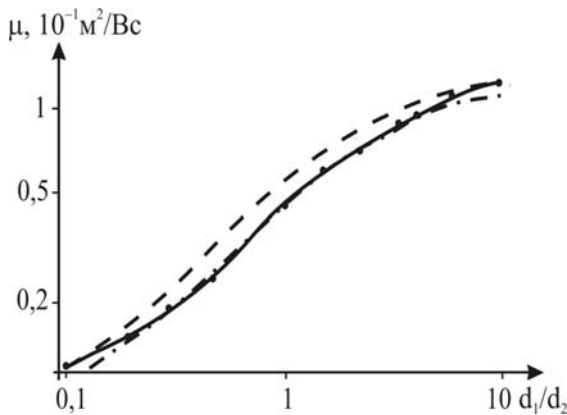
Таблиця 2

Значення основних величин, які використовувались при розрахунках рухливостей

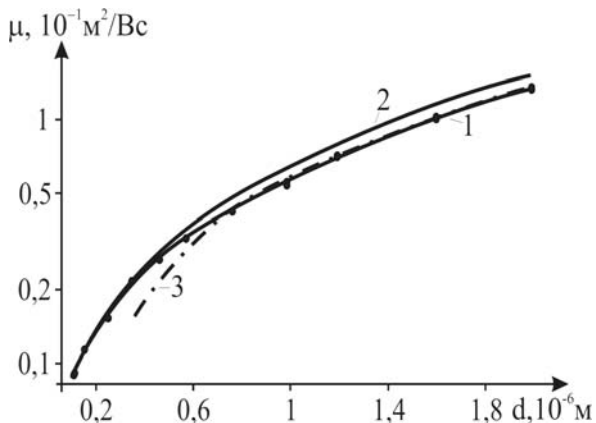
Величина	Позначення і розмірність	Значення
Об'ємна рухливість (при максимальній товщині)	$\mu_v, \text{ м}^2/\text{Вс}$ (PbTe-n)	0,19
	$\mu_v, \text{ м}^2/\text{Вс}$ (PbS-n)	0,015
Довжина вільного пробігу	$\lambda, \text{ м}$	$5 \cdot 10^{-8}$
Швидкість електрона	$v, \text{ м/с}$	$1 \cdot 10^5$
Концентрація носіїв	$n, \text{ м}^{-3}$	$10^{24}$
Заряд електрона	$e, \text{ Кл}$	$1,6 \cdot 10^{-19}$
Стала Планка	$\hbar, \text{ Дж}\cdot\text{с}$	$1,05 \cdot 10^{-34}$
Ефективна маса	$m^*, \text{ Кг}$ (PbTe-n)	$1,72 \cdot 10^{-30}$
	$m^*, \text{ Кг}$ (PbS-n)	$0,112 \cdot 10^{-30}$
Провідність при 300 К	$\sigma_1, \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ (PbTe-n)	350
	$\sigma_2, \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ (PbS-n)	73



**Рис. 12.** Залежність ефективної рухливості гетероструктури n-PbTe/n-PbS від товщини  $d$  за умови рівності товщин ( $d_1 = d_2$ ) одношарових плівок: 1 – експеримент; 2 – розрахунок згідно (14) [15].



**Рис. 13.** Залежність ефективних рухливостей гетероструктури n-PbTe/n-PbS від відношення товщин  $d_1/d_2$  окремих шарів за умови сталого значення загальної товщини: • – експеримент; --- розрахунок згідно (3); -.- розрахунок для розсіювання на дислокаціях згідно (17) [15].



**Рис. 14.** Залежність ефективних рухливостей гетероструктури n-PbTe/n-PbS від товщини  $d$  за умови рівності товщин ( $d_1 = d_2$ ) одношарових плівок: 1 – експеримент; 2 – розрахунок для поверхневого розсіювання згідно (5); 3 – розрахунок для розсіювання на дислокаціях згідно (17) [15].

$$\mu_d = \frac{3e}{8RN_n v m^*} \quad (17)$$

Тут  $v$  – дрейфова швидкість розсіювання електронів.

Вираз (17) за умови рівності дають можливість зробити оцінку зміни радіуса  $R$  і поверхневої густини  $N_n$  дислокацій від товщини плівки. Необхідні дані, використані при розрахунках, наведено у таблиці.

Розраховані значення поверхневої рухливості  $\mu_n$  згідно (16) наведені на рис. 11,б. Зауважимо, що для тонких плівок можна чекати різних ефектів як на середній довжині вільного пробігу носіїв заряду так і на дебаївській довжині екранування. У нашому випадку максимальне значення для цих двох товщин складає  $\lambda = 50 \text{ нм}$  [11] (табл. 2), що набагато менше за мінімальні значення товщини ( $\approx 100 \text{ нм}$ ) досліджуваних плівок. У зв'язку із цим поява розмірних ефектів малоймовірна.

Залишкову рухливість  $\mu_s$ , розраховано із співвідношення (15) за відомими значеннями  $\mu_{\text{exp}}$  (рис. 11,а),  $\mu_n$  (рис. 11,б) та  $\mu_v$  (табл. 2), зображено на рис. 11,в. Видно, що із збільшенням товщини плівок у зазначеному інтервалі, вона зростає.

На рис. 12 – крива 1 подано експериментальну залежність ефективної рухливості для гетероструктур n-PbTe/n-PbS від загальної товщини за умови рівності товщин одношарових плівок ( $d_1 = d_2$ ). Крива 2, показана пунктиром на рис. 12, розрахована шляхом підстановки значень рухливостей  $\mu_{\text{exp}_1}$  (1) і  $\mu_{\text{exp}_2}$  (2) окремих шарів у вираз (14). Видно, що розраховані значення рухливості носіїв заряду гетероструктури завжди більші за визначені експериментально. Це означає, що при аналізованих товщинах плівок існують ще додаткові механізми розсіювання носіїв заряду, відмінні від розсіювання на поверхні.

Експериментальна крива, що визначає залежність ефективної рухливості носіїв заряду в гетероструктурі від співвідношення товщин  $d_1/d_2$  окремих одношарових плівок зображена на рис. 13. Характерний вигин для співвідношення товщин  $d_1/d_2 = 0,3 - 0,6$  пояснюється різними значеннями швидкостей зміни рухливостей для окремих одношарових плівок за товщиною (рис. 11,а). Крива (рис. 13 – пунктир), що відповідає розрахованим значенням згідно (14), як у попередньому випадку (рис. 12), йде вище за експериментальну (рис. 13 – суцільна лінія). Отриманий результат підтверджує вище зроблений висновок про наявність додаткового механізму розсіювання.

Додаткове розсіювання носіїв заряду в гетероструктурі n-PbTe/n-PbS обумовлене утворенням сітки дислокацій невідповідностей. Рухливість розраховану згідно (17), що враховує розсіювання на дислокаціях невідповідностей показано на рис. 13 і рис. 14 (штрихпунктирні лінії). У якості об'ємної рухливості  $\mu_v$  використовували  $\mu_{\text{eff}}(d)$ , розраховану із співвідношення (14). У якості параметра  $d = 1,6 \mu\text{м}$  при обчисленні залежності рухливості від відношення  $d_1/d_2$  (рис. 13) вибирали дійсні значення товщини плівки PbTe для інтервалу  $0,5 \leq d_1/d_2 \leq 10$  і PbS для інтервалу  $0,1 \leq d_1/d_2 \leq 2$ . Із



наведених залежностей видно, що значення  $\mu_d$  поблизу  $d_1/d_2 = 0,1$  і  $10$  менші від експериментальних. Цю відмінність за умови малої товщини одного із шарів гетероструктури можна пояснити переважанням розсіювання на поверхні. Добра відповідність між розрахунками і експериментом має місце для значень  $0,5 < d_1/d_2 < 2$  (рис. 13). З рис. 14 видно, що розсіювання на дислокаціях є домінуючим для гетероструктури із загальною товщиною більшою за  $d > 0,7$  мкм. Для області менших товщин  $d < 0,5$  мкм переважає розсіювання на поверхні (рис. 14 – крива 2).

## Висновки

Представлений огляд робіт дає можливість зробити наступні узагальнення:

1. Крайові дислокації невідповідностей на межі розділу епітаксialьних гетероструктур може бути матрицею для отримання самоорганізованих впорядкованих наноструктур.
2. Двошарові гетероструктури на основі

вузькощілинних напівпровідникових сполук, за умови утворення впорядкованої дислокаційної сітки на межі розділу, є перспективними надпровідниками.

3. При розгляді транспортних процесів у двошарових епітаксialьних гетероструктурах необхідно врахувати розсіювання носіїв заряду на крайових дислокаціях невідповідностей.

*Робота частково фінансується МОН України (Державний реєстраційний номер 0909U001414).*

**Фреїк Д.М.** – заслужений діяч науки і техніки України, доктор хімічних наук, професор, директор Фізико-хімічного інституту, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла;

**Чобанюк В.М.** – проректор з навчальної роботи, кандидат фізико-математичних наук, доцент;

**Соколов О.Л.** – науковий співробітник;

**Лоп'янюк М.А.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент.

- [1] Р.А. Андриевский. Основные проблемы наноструктурного материаловедения // *Наноструктурное материаловедение*. №1. с. 5-13 (2005).
- [2] Д.М. Фреїк, В.М. Чобанюк, Л.І. Никируй Напівпровідникові тонкі плівки – стан проблеми (огляд) // *Фізика і хімія твердого тіла*, 7(3), сс. 405-417 (2006).
- [3] N. Ya. Fogel, E. T. Buchstab, Yu. V. Bomze, O. I. Yuzepovich, A. Yu. Sipatov, E. A. Pashitskii, A. Danilov, V. Langer, R. I. Shekhter, M. Jonson Interfacial superconductivity in semiconducting monochalcogenide superlattices // *Phys. Rev. B*. v. 66. p. 174513. (2002).
- [4] О.И. Юзефович, М.Ю. Михайлов, СВ. Бенгус, А.Ю. Аладышкин, Е.Е. Пестов, Ю.Н. Ноздрин, А.Ю. Сипатов, Е.И. Бухштаб, Н.Я. Фогель. Сверхпроводимость границ раздела полупроводниковых слоев в двухслойных и многослойных гетероструктурах типа  $A^{IV}B^{VI}$  // *Физика низких температур*, 34(12), сс. 1249-1258 (2008).
- [5] K. Wiesauer and G. Springholz. Nano-Scale Dislocation Patterning in PbTe on PbSe (100) Heteroepitaxy Studied by Scanning Tunneling Microscopy // *Proceedings GMe Forum*, pp. 209-212 (2001)
- [6] Д.М. Фреїк, О.Л. Соколов, Ю.В. Кланічка. Вплив дислокацій невідповідності на рухливість носіїв заряду у двошарових епітаксialьних структурах на основі сполук  $A^{IV}B^{VI}$  // *Вісник Прикарпатського університету. Математика. Фізика*. В. 3. сс. 65-71 (2007).
- [7] Г. Матаре. *Электроника дефектов в полупроводниках*. Мир, М. (1974).
- [8] G.F. Neumark. Theory of the Influence of Misfit Dislocations on Interfacial Mobility and Hall Effect // *Phys. Rev. (b)*, 1(6), pp. 2613-2622 (1970).
- [9] К.В. Шалимова. *Физика полупроводников*. Энергоатомиздат. М. 392 с. (1985).
- [10] Д.М. Фреїк, М.А. Галушак, Л.И. Межиловская. *Физика и технология полупроводниковых пленок*. Вища школа, Львів, 152 с. (1988).
- [11] О.А. Александрова, Р.Ц. Бондоков, Н.В. Саунин, Ю.М. Таиров. Подвижность носителей заряда в двухслойных структурах PbTe/PbS // *Физика и техника полупроводников*, 32(9), сс. 1064-1068 (1998).
- [12] P.R. Vaya, J. Majht, B.S.V. Gopalam, C. Dattatrepan. Thickness Dependence of Hall Mobility of HWE Grown PbTe Films // *Phys. Stat. Sol. (a)*, 87(341), pp 341-350 (1985).
- [13] D.M. Freik, L.I. Nykyruy, V.M. Shperun. Scattering Mechanisms of Electrons on Monocrystalline PbTe, PbSe and PbS // *Semiconductor Physics, quantum electronics and photoelectronics*, 5(4), pp 362-367 (2002).
- [14] М.А. Глауберман, О.А. Кулініч, В.В. Єгоров, Н.А. Канищева, В.В. Козел. Вплив структурних дефектів у при поверхневих шарах кремнію на перетворювальні властивості інжекційно-інверсійної магніточутливої структури // *Фізика і хімія твердого тіла*, 5(1), сс. 38-43 (2004).
- [15] Д.М. Фреїк, О.Л. Соколов, Г.Д. Матеїк. Розсіювання носіїв заряду в двошаровій гетероструктурі p-PbTe/n-PbS // *Фізика і хімія твердого тіла*, 5(4), сс. 709-715 (2004).

D.M. Freik, V.M. Chobanyuk, O.L. Sokolov, M.A. Lopyanko

## **Misfit Dislocations and Electronic Processes in the Two- Layer Epitaxial Structures of Lead Chalcogenides**

*Physical-chemical institute of Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57,  
Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine, E-mail: freik@pu.if.ua*

The results of research features of processes creation and forming of boundary misfit dislocations are directed in PbTe/PbSe heterostructure, deposited on (100) KCl. The geometrical models of dislocations are offered and their influence is analysed on mobility of charge carrier. Transport processes and terms of realization of the superconductivity state are considered of two- layer PbTe/PbS heterostructure.