

# Abgeschirmte piezoelektrische Potentiale um Versetzungen in piezoelektrischen Kristallen

LUDWIG MERTEN

Philips Zentrallaboratorium GmbH, Laboratorium Aachen

(Z. Naturforschg. 21 a, 793—798 [1966] ; eingegangen am 10. März 1966)

Die Abschirmung von piezoelektrischen Potentialen um Versetzungen in piezoelektrischen Halbleitern läßt sich sehr allgemein behandeln. Bei Darstellung dieser abgeschirmten Potentiale als FOURIER-Reihen in  $\varphi$ , die nur geradzahlige Harmonische enthalten, sind die  $r$ -abhängigen FOURIER-Koeffizienten des Index  $2n$  Summen aus der modifizierten HANKELschen Funktion und der sogen. LOMMELschen Funktion  $2n$ -ter Ordnung. ( $r, \varphi$ : Polarkoordinaten in den Ebenen  $\perp$  zur Versetzungslinie.)

Wie in <sup>1</sup> gezeigt wurde, sind Versetzungen in piezoelektrischen Kristallen im allgemeinen von „piezoelektrischen“ Potentialen umgeben. Solange wahre Ladungen vernachlässigt werden können, sind diese Potentiale, die auf weitreichenden COULOMB-Kräften beruhen, senkrecht zur Versetzungslinie räumlich weit ausgedehnt, genauer, sie bleiben konstant mit Änderung des Abstandes  $r$  in fester Richtung senkrecht zur Versetzungslinie. Mit zunehmender Zahl quasifreier Ladungsträger (Elektronen und Löcher) und geladener Fehlstellen (Donatoren, Akzeptoren) verkleinert sich jedoch die effektive Reichweite der Potentiale infolge äußerer Abschirmung. Diese Abschirmeffekte sollen im folgenden für thermisches Gleichgewicht berechnet werden. Mit Kenntnis der abgeschirmten Potentiale läßt sich dann auch die Dichte der an den Versetzungen haftenden (ge-  
trappten) Ladungen angeben.

Wie in <sup>1b</sup> gezeigt wurde, ist das Potential einer Schraubenversetzung ohne Abschirmeffekte bei Annahme elastischer Isotropie ein Linien-Quadrupol-Potential der Form

$$V = A \cos 2 \varphi, \quad (1 a)$$

bei einer Stufenversetzung ist diesem noch ein Linien-Oktupol-Potential überlagert (mit einer etwaigen zusätzlichen Phasenverschiebung in den  $\cos$ -Gliedern):

$$V = A_2 \cos 2 \varphi + A_4 \cos 4 \varphi. \quad (1 b)$$

$r, \varphi$  sind ebene Polarkoordinaten senkrecht zur Versetzungslinie. Bei der Stufenversetzung ist  $\varphi$  relativ zur Richtung des BURGERS-Vektors gemessen. Berücksichtigt man die elastische Anisotropie, so treten im

allgemeinen höhere Multipole hinzu, d. h. das allgemeine Potential ist eine FOURIER-Reihe der Form:

$$V = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n} \cos(2n\varphi - 2n\varphi_{2n}). \quad (2)$$

Die Koeffizienten  $A_{2n}$  und die Phasenkonstanten  $\varphi_{2n}$  hängen ab vom Betrage  $b$  des BURGERS-Vektors und als Materialkonstanten von den piezoelektrischen  $e_{ij}$ , den dielektrischen  $\kappa_{ij}$  und den elastischen Konstanten  $c_{ij}$ . Für eine reine Stufenversetzung (elastische und dielektrische Isotropie:  $\kappa = \kappa_{11} = \kappa_{22} = \kappa_{33}$ ) in hexagonalen Kristallen der Klasse  $C_{6v}$  (Beispiele: CdS, CdSe, ZnO mit Wurtzitstruktur), deren BURGERS-Vektor in Richtung einer  $a$ -Achse und deren Versetzungslinie in der hexagonalen Basisebene liegen, gilt zum Beispiel <sup>1b</sup>:

$$A_2 = \frac{b}{4\kappa(1-\nu)} \{ -2(1-\nu)e_{31} + 2\nu e_{33} \}, \quad (2 a)$$

$$A_4 = \frac{b}{16\kappa(1-\nu)} \{ -e_{31} + e_{33} - 2e_{15} \}. \quad (2 b)$$

Auch bei elastischer Anisotropie genügt es, nur einige wenige Anfangsglieder zu berücksichtigen, da die  $A_{2n}$  sehr schnell mit wachsendem  $n$  abnehmen.

Die Phasenkonstanten  $\varphi_{2n}$  seien im folgenden als unwesentlich gleich Null gesetzt, sie können im Endergebnis wieder eingeführt werden, indem man  $\varphi$  durch  $\varphi - \varphi_{2n}$  ersetzt.

Es sei noch bemerkt, daß die besonderen Verhältnisse im Versetzungskern natürlich durch die Gln. (1) und (2) nicht miteinfaßt werden.

In der Unabhängigkeit der piezoelektrischen Potentiale von  $r$  besteht ein charakteristischer Unterschied gegenüber z. B. Versetzungspotentialen, die infolge von Deformationspotentialen entstehen und

<sup>1</sup> L. MERTEN, a) Phys. Kondens. Materie 2, 53, 66 [1964]; b) Z. Naturforschg. 19 a, 788, 1161 [1964].



für eine Stufenversetzung ohne Abschirmung bei elastischer Isotropie die Form besitzen<sup>2</sup>

$$V(r, \varphi) = (E_1/e) (b/2\pi) \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{\sin \varphi}{r}, \quad (3)$$

also wie  $1/r$  nach außen abfallen. Hierin bedeuten  $E_1$  das Deformationspotential,  $\nu$  wie in (2 a, b) das POISSON-Verhältnis,  $b$  den Betrag des BURGERS-Vektors.

Die Anwesenheit quasi-freier Ladungsträger (Elektronen und Löcher) und geladener Punktfehlstellen im Versetzungsgebiet führt nun zu einer äußeren Abschirmung der Potentiale. Die aus (1 a, b) bzw. (2) entstehenden abgeschirmten Potentiale werden für thermisches Gleichgewicht unter der Voraussetzung  $|V| \leq kT/e$  ( $k$ : BOLTZMANN-Konstante,  $T$ : absolute Temperatur) beschrieben durch die lineare Differential-Gleichung (Abschirmgleichung, linearisierte POISSON-BOLTZMANN-Gl.)

$$\Delta V - (1/L^2) V = - (1/r^2) \sum_n \alpha_{2n} \cos 2n\varphi$$

$$[\alpha_{2n} \equiv (2n)^2 A_{2n}], \quad (4)$$

deren Lösung sich, wie im folgenden gezeigt werden soll, in geschlossener Form angeben läßt. Hierin gibt, bis auf konstante Faktoren, das zweite Glied der linken Seite die Dichte der wahren Ladungen im thermischen Gleichgewicht an, die rechte Seite die Dichte der Polarisationsladungen auf Grund des Piezoeffektes.

$L$  bedeutet eine Abschirmlänge, die im Falle des nichtentarteten Halbleiters gleich ist der DEBYE-HÜCKEL-Länge

$$L_D = \sqrt{\kappa kT / (4\pi e^2 N)}. \quad (4a)$$

Hierin bedeutet  $N$  im Falle des Eigenhalbleiters oder des reinen n- bzw. p-Halbleiters die Dichte der freien Ladungsträger,  $\kappa$  die dielektrische Konstante. Bezüglich der erweiterten Bedeutung von  $N$  für den allgemeineren Fall des nichtentarteten Halbleiters siehe den Anhang, ebenso bezüglich der Herleitung von (4). Wegen der Darstellung von  $L$  in entarteten Halbleitern siehe z. B. DINGLE<sup>3</sup>.

Als Lösung einer linearen Differential-Gleichung setzt sich das Gesamtpotential  $V$  zusammen nach

$$V = \sum_n V_{2n}; \quad (5a)$$

dabei ist  $V_{2n}$  die Lösung von

$$\Delta V_{2n} - (1/L^2) V_{2n} = - (\alpha_{2n}/r^2) \cos 2n\varphi. \quad (5)$$

Die weitere Aufgabe besteht in der Lösung von (5) unter den aus physikalischen Gründen zu verlangenden Randbedingungen: Im Unendlichen ( $r \rightarrow \infty$ ) soll  $V_{2n}$  verschwinden und für  $r \rightarrow 0$  jedenfalls endlich bleiben. Wie sich zeigen wird, bleibt für  $r = 0$  jedoch noch eine Unstetigkeitsstelle des Potentials  $V$  bestehen. Dies hängt physikalisch damit zusammen, daß in der unmittelbaren Umgebung der Versetzungslinie (Versetzungskern) die Polarisationsladungen durch die Inhomogenitäten von (5) bzw. (4) und folglich die Potentiale  $V_{2n}$  selbst nicht mehr realistisch beschrieben werden. Wie sich qualitativ das Potential hier verhalten wird, wurde bereits in<sup>1a</sup> diskutiert. Da sich diese Abweichungen vermutlich aber auf ein zylinderförmiges Gebiet mit dem Radius von etwa 10 Å um die Versetzungslinie beschränken werden, brauchen sie im folgenden nicht berücksichtigt zu werden.

Zur Lösung von (5) setzen wir an

$$V_{2n}(x, \varphi) = -\alpha_{2n} f_{2n}(x) \cos 2n\varphi, \quad (6)$$

womit sich für die  $f_{2n}$  folgende Differential-Gleichung ergibt ( $x \equiv r/L$ ):

$$\frac{d^2 f_{2n}}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{df_{2n}}{dx} + \left( -1 - \frac{(2n)^2}{x^2} \right) f_{2n} = \frac{1}{x^2} \quad (7)$$

oder mit  $q \equiv ix$  und  $\tilde{f}_{2n}(q) \equiv f_{2n}(x)$

$$\frac{d^2 \tilde{f}_{2n}}{dq^2} + \frac{1}{q} \frac{d\tilde{f}_{2n}}{dq} + \left( 1 - \frac{(2n)^2}{q^2} \right) \tilde{f}_{2n} = \frac{1}{q^2}. \quad (7a)$$

Die so erhaltene Diff.-Gl. (7 a) ist eine spezielle inhomogene BESSELSche Differential-Gleichung, die als LOMMELSche Differential-Gleichung bezeichnet wird. Partikuläre Integrale sind die sog. LOMMELschen Funktionen (vgl. z. B.<sup>4</sup>, S. 347)

$$S_{-1, 2n}(q) = \frac{1}{q^2} + \frac{(2n)^2 - 2^2}{q^4} + \frac{\{(2n)^2 - 2^2\}\{(2n)^2 - 4^2\}}{q^6} + \frac{\{(2n)^2 - 2^2\}\{(2n)^2 - 4^2\}\{(2n)^2 - 6^2\}}{q^8} + \dots$$

$$= \frac{1}{4n} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(2n-k-1)!}{k!} \left( \frac{q}{2} \right)^{2k-2n} \quad (8)$$

<sup>2</sup> D. L. DEXTER u. F. SEITZ, Phys. Rev. **86**, 964 [1952].

<sup>3</sup> R. B. DINGLE, Phil. Mag. **46**, 831 [1955].

<sup>4</sup> G. N. WATSON, Theory of BESSEL Functions, At the University Press, Cambridge 1952.

oder, wenn man durch die Definition

$$\mathfrak{S}_{-1,2n}(x) \equiv S_{-1,2n}(Q) \quad (9)$$

Funktionen mit reellem Argument als direkte Lösungen von (7) einführt, die als „modifizierte“ LOMMELsche Funktionen bezeichnet seien:

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_{-1,2n}(x) &= -\frac{1}{x^2} + \frac{(2n)^2 - 2^2}{x^4} - \frac{\{(2n)^2 - 2^2\}\{(2n)^2 - 4^2\}}{x^6} + \frac{\{(2n)^2 - 2^2\}\{(2n)^2 - 4^2\}\{(2n)^2 - 6^2\}}{x^8} - \dots \\ &= \frac{1}{4n} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{k+n} \frac{(2n-k-1)!}{k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k-2n}. \end{aligned} \quad (10)$$

Die Reihen brechen offensichtlich ab hinter dem Gliede mit dem Exponenten  $-2n$ . Wie man leicht zeigen kann, gilt für die  $\mathfrak{S}_{-1,2n}$  die Rekursionsformel:

$$\mathfrak{S}_{-1,2n+2} = -\frac{n}{n+1} \left(1 + \frac{4n(2n+1)}{x^2}\right) \mathfrak{S}_{-1,2n} + \frac{2n(2n+1)}{n+1} \frac{\mathfrak{S}'_{-1,2n}}{x} - \frac{2n+1}{n+1} \frac{1}{x^2}. \quad (10a)$$

Die „modifizierten“ LOMMELschen Funktionen mit den niedrigsten Indizes lauten explizit:

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_{-1,2}(x) &= -\frac{1}{x^2}, \quad \mathfrak{S}_{-1,4}(x) = -\frac{1}{x^2} + \frac{12}{x^4}, \quad \mathfrak{S}_{-1,6}(x) = -\frac{1}{x^2} + \frac{32}{x^4} - \frac{640}{x^6}, \\ \mathfrak{S}_{-1,8}(x) &= -\frac{1}{x^2} + \frac{60}{x^4} - \frac{2880}{x^6} + \frac{80640}{x^8}. \end{aligned} \quad (11)$$

Um die Randbedingungen zu erfüllen, sind den modifizierten LOMMELschen Funktionen noch modifizierte Zylinderfunktionen als Lösungen der homogenen Gleichung zu überlagern. Da das Potential im Unendlichen verschwinden soll, können diese, bis auf einen konstanten Faktor, nur die modifizierten HANKELschen Funktionen  $K_{2n}(x)$  sein:

$$f_{2n}(x) = C K_{2n}(x) + \mathfrak{S}_{-1,2n}(x). \quad (12)$$

Der in  $K_{2n}(x)$  enthaltene Pol-Teil

$$\dots + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{(2n-k-1)!}{k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k-2n} \quad (12a)$$

stimmt nun bis auf einen gemeinsamen Faktor genau mit den LOMMELschen Funktionen [vgl. Gl. (10)] überein. Der Faktor  $C$  ist daher so zu wählen, daß sich die Pol-Glieder gerade fortheben, nämlich:

$$C = \frac{(-1)^{n+1}}{2n}, \quad \text{so daß} \quad f_{2n}(x) = \frac{(-1)^{n+1}}{2n} K_{2n}(x) + \mathfrak{S}_{-1,2n}(x) \quad (12b)$$

oder als Reihendarstellung geschrieben (vgl. z. B. <sup>5</sup>, S. 207)

$$\begin{aligned} f_{2n}(x) &= \frac{(-1)^n}{2n} I_{2n}(x) \ln(\gamma x/2) + \frac{(-1)^n}{4n} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x/2)^{2n+2k}}{k! (2n+k)!} \left( \sum_{l=1}^k \frac{1}{l} + \sum_{l=1}^{2n+k} \frac{1}{l} \right) \\ &\quad + \frac{1}{4n} \sum_{k=n}^{2n-1} \frac{(-1)^{n+k-1} (2n-k-1)!}{k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k-2n} \end{aligned} \quad (12c)$$

( $\gamma = 1,781$ ,  $\ln \gamma = C = 0,5772$ : EULER-MASCHERONISCHE-KONSTANTE).

Eingesetzt in (6) und (5a) ergibt sich somit als vollständige Lösung:

$$V = \sum_n V_{2n} = - \sum_n a_{2n} f_{2n} \cos 2n\varphi \quad (13a)$$

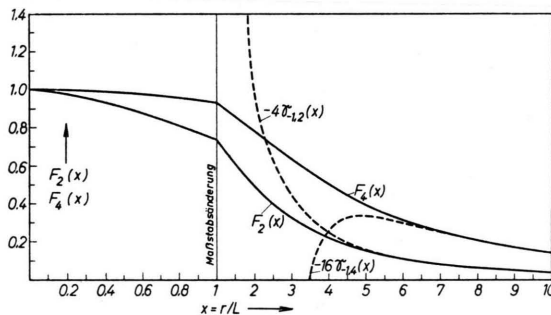
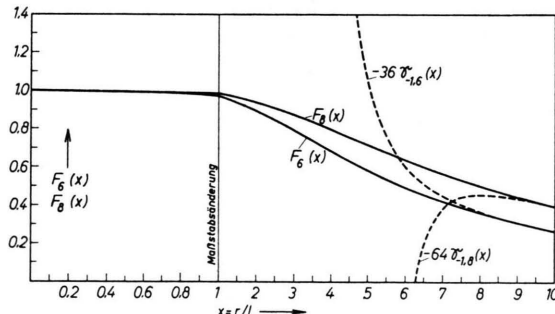
bzw. mit (4)

$$= \sum_n A_{2n} F_{2n} \cos 2n\varphi, \quad \text{wobei } F_{2n} \equiv -(2n)^2 f_{2n}. \quad (13b)$$

Die Zahlenwerte von  $f_{2n}$  und  $\mathfrak{S}_{-1,2n}$  für  $2n = 2, 4, 6, 8$  sind in Tab. 1 zusammengestellt, der Verlauf der  $F_{2n} = 2n \{(-1)^n K_{2n}(x) - 2n \mathfrak{S}_{-1,2n}\}$  ist in Abb. 1 dargestellt. Das asymptotische Verhalten des  $x$ -abhängigen Faktors  $f_{2n}$  für  $x \rightarrow \infty$  (d. h.  $r \rightarrow \infty$ ) wird durch die modifizierten LOMMELschen Funktionen  $\mathfrak{S}_{-1,2n}(x)$  beschrieben, da die modifizierten

<sup>5</sup> JAHNKE-EMDE-LÖSCH, Tafeln höherer Funktionen, Teubner-Verlag, Stuttgart 1960.

$x \equiv \frac{r}{L}$	$-f_2(x)$	$-\mathfrak{S}_{-1,2}(x)$	$-f_4(x)$	$-\mathfrak{S}_{-1,4}(x)$	$-f_6(x)$	$-\mathfrak{S}_{-1,6}(x)$	$-f_8(x)$	$-\mathfrak{S}_{-1,8}(x)$
0,0	$2,500 \cdot 10^{-1}$	$+\infty$	$6,250 \cdot 10^{-2}$	$-\infty$	$2,778 \cdot 10^{-2}$	$+\infty$	$1,563 \cdot 10^{-2}$	$-\infty$
0,2	2,438	$2,500 \cdot 10^1$	6,230	$-7,475 \cdot 10^3$	2,774	$9,980 \cdot 10^6$	1,562	$-3,146 \cdot 10^{10}$
0,4	2,319	$6,250 \cdot 10^0$	6,170	$-4,625 \cdot 10^2$	2,764	$1,550 \cdot 10^5$	1,558	$-1,223 \cdot 10^8$
0,6	2,176	2,778	6,077	$-8,981 \cdot 10^1$	2,747	$1,347 \cdot 10^4$	1,553	$-4,703 \cdot 10^6$
0,8	2,026	1,563	5,955	-2,773	2,724	$2,365 \cdot 10^3$	1,546	$-4,698 \cdot 10^5$
1,0	1,876	1,000	5,810	-1,100	2,695	$6,090 \cdot 10^2$	1,537	$-7,782 \cdot 10^4$
1,5	1,526	$4,444 \cdot 10^{-1}$	5,379	$-1,926 \cdot 10^0$	2,600	$5,031 \cdot 10^1$	1,507	$-2,905 \cdot 10^3$
2,0	1,231	2,500	4,898	$-5,000 \cdot 10^{-1}$	2,481	$8,250 \cdot 10^0$	1,466	$-2,735 \cdot 10^2$
2,5	$9,927 \cdot 10^{-2}$	1,600	4,410	-1,472	2,345	1,962	1,418	$-4,222 \cdot 10^1$
3,0	8,036	1,111	3,943	$-3,704 \cdot 10^{-2}$	2,200	$5,940 \cdot 10^{-1}$	1,363	$-8,970 \cdot 10^0$
3,5	6,548	$8,193 \cdot 10^{-2}$	3,510	$1,666 \cdot 10^{-3}$	2,053	2,157	1,304	-2,333
4,0	5,380	6,250	3,118	$1,563 \cdot 10^{-2}$	1,907	$9,375 \cdot 10^{-2}$	1,243	$-6,992 \cdot 10^{-1}$
4,5	4,461	4,938	2,769	2,012	1,766	4,842	1,180	-2,297
5,0	3,735	4,000	2,462	2,080	1,632	2,976	1,118	$-7,818 \cdot 10^{-2}$
5,5	3,157	3,306	2,192	1,994	1,505	2,121	1,056	-2,477
6,0	2,693	2,778	1,956	1,852	1,388	1,681	$9,961 \cdot 10^{-3}$	$-4,801 \cdot 10^{-3}$
6,5	2,319	2,367	1,751	1,695	1,280	1,423	9,383	$2,936 \cdot 10^{-3}$
7,0	2,013	2,041	1,571	1,541	1,180	1,252	8,831	5,910
7,5	1,762	1,778	1,415	1,399	1,089	1,126	8,307	6,942
8,0	1,553	1,563	1,279	1,270	1,006	1,025	7,811	7,156
8,5	1,379	1,384	1,159	1,155	$9,307 \cdot 10^{-3}$	$9,408 \cdot 10^{-3}$	7,345	7,024
9,0	1,231	1,235	1,055	1,052	8,619	8,672	6,907	6,747
9,5	1,106	1,108	$9,624 \cdot 10^{-3}$	$9,609 \cdot 10^{-3}$	7,993	8,023	6,498	6,416
10,0	$9,989 \cdot 10^{-3}$	1,000	8,810	8,800	7,424	7,440	6,116	6,074

Tab. 1. Die Funktionen  $f_{2n}$  und ihre asymptotischen Lösungen  $\mathfrak{S}_{-1,2n}$  (LOMMEL-Funktionen).Abb. 1 a: Die Funktionen  $F_2$  und  $F_4$  mit ihren asymptotischen Darstellungen  $-4\mathfrak{S}_{-1,2} = 4/x^2$  bzw.  $-16\mathfrak{S}_{-1,4} = \frac{16}{x^2} - \frac{192}{x^4}$  (gestrichelt;  $\mathfrak{S}_{-1,2}$ ,  $\mathfrak{S}_{-1,4}$ : modifizierte LOMMEL-Funktionen).Abb. 1 b: Die Funktionen  $F_6$  und  $F_8$  mit ihren asymptotischen Darstellungen  $-36\mathfrak{S}_{-1,6} = \frac{36}{x^2} - \frac{1152}{x^4} + \frac{23040}{x^6}$  bzw.  $-64\mathfrak{S}_{-1,8} = \frac{64}{x^2} - \frac{3840}{x^4} + \frac{184320}{x^6} - \frac{5160960}{x^8}$  (gestrichelt;  $\mathfrak{S}_{-1,6}$ ,  $\mathfrak{S}_{-1,8}$ : modifizierte LOMMEL-Funktionen).

HANKELschen Funktionen exponentiell nach

$$(\sqrt{\pi}/2) e^{-x}/\sqrt{x}$$

abfallen. Das führende Glied für große  $x$  ist also stets der Summand  $-1/x^2$ . Eingesetzt in (13) und (4) bedeutet dies die Aussage, daß für große  $x$  die Dichte der wahren Ladungen und der piezoelektrischen Polarisationsladungen sich gerade gegenseitig kompensieren (äußere Abschirmung). — Für  $x \rightarrow 0$  (d. h.  $r \rightarrow 0$ ) wird der  $x$ -unabhängige Summand  $-\frac{1}{2}(-1)^n/n$  in  $K_{2n}(x)$  das bestimmende Glied, so daß nach (13)

$$V = \sum_n V_{2n} \approx \sum_n A_{2n} \cos 2n\varphi. \quad (14)$$

Das Potential stimmt also für kleine  $x$  ( $r \ll L$ ), wie zu fordern, mit den unabgeschirmten Potentialen (1) bzw. (2) überein.

Explizit lautet das zu einer Schraubenversetzung bei elastischer Isotropie gehörige abgeschirmte Potential jetzt gegenüber (1 a) (vgl. auch <sup>1a</sup>, S. 70)

$$V = A \left( -2K_2(x) + \frac{4}{x^2} \right) \cos 2\varphi \quad (15 a)$$

und das zu den Stufenversetzungen gehörige Potential gegenüber (1 b):

$$V = A_2 \left( -2K_2(x) + \frac{4}{x^2} \right) \cos 2\varphi \quad (15 b) \\ + A_4 \left( 4K_4(x) + \frac{16}{x^2} - \frac{192}{x^4} \right) \cos 4\varphi.$$

### Anhang: Zur Herleitung der Abschirmgleichung [Diff.-Gl. (4)] für das thermische Gleichgewicht

$$\Delta V - \frac{1}{L_D^2} V = - \frac{1}{r^2} \sum_n \alpha_{2n} \cos 2n\varphi \quad (\text{A}, 0)$$

$$\text{mit} \quad L_D = \sqrt{\kappa k T / (4 \pi e^2 N)} \quad (\text{A}, 1)$$

als DEBYE-HÜCKEL-Länge [vgl. Gl. (4a)].

Die Ausgleichsgleichung, die auf Gl. (4) bzw. (A, 0) führt, ist die verallgemeinerte POISSON-Gleichung

$$\Delta V = - (4 \pi / \kappa) (\varrho + \varrho'), \quad (\text{A}, 2)$$

worin  $\varrho$  die Dichte der wahren Ladungen bedeutet und  $\varrho'$  die Dichte der Polarisationsladungen auf Grund des Piezoeffekts ( $\kappa$ : dielektrische Konstante), die in Form einer FOURIER-Summe sich darstellt als <sup>1</sup>:

$$\varrho' = (\kappa / 4 \pi) \sum_n (\alpha_{2n} / r^2) \cos 2n\varphi. \quad (\text{A}, 3)$$

Multipliziert mit  $-4 \pi / \kappa$  ist dies exakt die rechte Seite der Gl. (A, 0). Der Term  $(4 \pi / \kappa) \varrho$  für die wahren Ladungen führt für thermisches Gleichgewicht und in der linearen Näherung auf den zweiten Term der linken Seite von Gl. (A, 0), wobei sich jedoch die genauere Bedeutung der Größe  $N$  in der DEBYE-Länge erst aus einer etwas eingehenderen Betrachtung aller beteiligten wahren Ladungen ergibt.

Dazu seien die folgenden Fälle getrennt behandelt:

#### 1. Eigenhalbleiter

Es tragen nur die freien Ladungsträger zur Gesamtladungsdichte

$$\varrho = e(-n + p) \quad (\text{A}, 4)$$

bei, worin

$$n = n_i e^{eV/(kT)}, \quad p = n_i e^{-eV/(kT)} \quad (\text{A}, 4a)$$

die Dichte der Elektronen bzw. Löcher nach der BOLTZMANN-Statistik bedeutet ( $n_i$ : Inversionsdichte). Einsetzen in (A, 2) ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{4 \pi}{\kappa} \varrho &= - \frac{8 \pi e n_i}{\kappa} \sinh \left[ \frac{eV}{kT} \right] \\ &\approx - \frac{8 \pi e^2 n_i}{\kappa k T} V = - \frac{1}{L_D} V, \end{aligned} \quad (\text{A}, 5)$$

worin <sup>6</sup>  $L_D$  nach (A, 1) mit  $N = 2 n_i$  (A, 5a) die DEBYE-HÜCKEL-Länge des Eigenhalbleiters ist.

#### 2. Nichtentarteter Störstellenhalbleiter

Es sei zunächst angenommen, daß der Kristall als Punktstörstellen nur Donatoren der Dichte  $N_D$  ent-

halte, also ein reiner Elektronenleiter mit der mittleren Elektronendichte  $n$  sei.

Die Dichte  $\varrho$  der wahren Ladungen setzt sich dann zusammen nach

$$\varrho = e(-n + N_D^+). \quad (\text{A}, 6)$$

Hierin bedeutet  $N_D^+$  die Dichte der ionisierten Donatoren, die mit der Gesamtdichte  $N_D$  durch die FERMI-Statistik verknüpft ist:

$$N_D^+ = N_D / (1 + \exp\{-(E_1 - eV - E_F)/(kT)\}). \quad (\text{A}, 7)$$

Für  $n$  gilt in der Näherung der BOLTZMANN-Statistik (nichtentarteter Halbleiter)

$$n = n_0 e^{eV/(kT)} \quad (\text{A}, 8)$$

mit

$$n_0 = 2 (2 \pi m^* k T / h^2)^{3/2} \exp\{E_F/(kT)\}. \quad (\text{A}, 8a)$$

Hierin bedeutet  $E_1$  die Energie des Grundzustandes der Donatoren,  $E_F$  die FERMI-Energie und  $V$  das Störpotential [hier speziell das piezoelektrische Potential aus Gl. (A, 0)].  $m^*$  ist die effektive Masse der Elektronen.

Mit den Abkürzungen

$$\bar{e} \equiv \exp\{-(E_2 - E_F)/(kT)\} \quad (\text{A}, 9)$$

und

$$u \equiv -eV/(kT)$$

folgt nun für  $\varrho/e$  in (A, 6):

$$\begin{aligned} -n + N_D^+ &= -n_0 e^{-u} - \frac{N_D}{1 + \bar{e} e^{-u}} \\ &\approx -n_0 (1 - u) + \frac{N_D}{1 + \bar{e}} \left( 1 + \frac{\bar{e}}{1 + \bar{e}} u \right) \\ &= \left\{ n_0 + \frac{N_D}{1 + \bar{e}} \left( 1 - \frac{1}{1 + \bar{e}} \right) \right\} u, \end{aligned} \quad (\text{A}, 10)$$

wenn man bis zum linearen Gliede entwickelt. Das  $u$ -unabhängige Glied muß dabei verschwinden wegen der Neutralitätsbedingung im ungestörten Zustand:

$$n_0 = N_D / (1 + \bar{e}). \quad (\text{A}, 11)$$

Führt man die Neutralitätsbedingung in (A, 10) ein, so ergibt sich für die geschweifte Klammer:

$$N = n_0 (2 - n_0 / N_D) \quad (\text{A}, 12)$$

und daher schließlich mit (A, 6):

$$(4 \pi / \kappa) \varrho = - (1 / L_D) V,$$

worin  $L_D$  die DEBYE-HÜCKEL-Länge (A, 1) mit  $N$  nach (A, 12) bedeutet.

Sind zusätzlich Akzeptoren im Kristall vorhanden, so ist (A, 6) zu erweitern zu:

$$\varrho = e(-n + N_D^+ - N_A^-), \quad (\text{A}, 13)$$

<sup>6</sup> Vielfach wird auch  $L_D$  nach (A, 1) mit  $N = n_i$  als DEBYE-HÜCKEL-Länge des Eigenhalbleiters bezeichnet.



worin

$$N_A^- = N_A / (1 + \exp \{ (E_2 - eV - E_F) / (kT) \}) \quad (\text{A, 14})$$

die Dichte der ionisierten Akzeptoren und  $N_A$  die Dichte der gesamten Akzeptoren bedeutet.  $E_2$  ist die Energie des Grundzustandes der Akzeptoren.

Unter der Voraussetzung  $E_F - E_2 \gg kT$  folgt  $N_A^- \approx N_A$ : Alle Akzeptoren sind negativ geladen (mit Elektronen besetzt). Die Neutralitätsbedingung lautet dann statt (A, 11)

$$n_0 = N_D / (1 + \bar{e}) - N_A. \quad (\text{A, 15})$$

Das Entwicklungsglied erster Ordnung ist unter dieser Voraussetzung sehr klein gegenüber dem entsprechenden Gliede von  $N_D$  in Gl. (A, 10), so daß sich an (A, 10) nichts ändert. Setzt man also die geänderte Neutralitätsbedingung (A, 15) in (A, 10) ein, so folgt:

$$\begin{aligned} -n + N_D^+ - N_A^- & \quad (\text{A, 16}) \\ &= \left\{ n_0 + (n_0 + N_A) \left( 1 - \frac{n_0 + N_A}{N_D} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Es ist daher statt (A, 12) jetzt

$$N = n_0 + (n_0 + N_A) (1 - (n_0 + N_A) / N_D) \quad (\text{A, 17})$$

in die DEBYE-HÜCKEL-Länge  $L_D$  [Gl. (A, 1)] einzuführen.

Für p-Leiter sind in (A, 17)  $n_0$  durch  $p_0$  zu ersetzen und  $N_A$  und  $N_D$  zu vertauschen.

Mit (A, 12) bzw. (A, 17) identische Gleichungen wurden bereits von BROOKS<sup>7</sup> und HERRING<sup>8</sup> benutzt im Zusammenhang mit Untersuchungen zum Problem der Streuung von Elektronen und Löchern an abgeschirmten geladenen Punktfehlstellen.

Herrn M. J. GELEYNs vom Philips-Rekencentrum, Eindhoven (Holland), danke ich für die Ausführung der numerischen Rechnungen.

<sup>7</sup> H. BROOKS, Advan. Electron. 7, 87 [1955], vgl. S. 157 f.

<sup>8</sup> C. HERRING, unveröffentlicht.

## Berechnung und Anwendung der Kehrmatrix der nichtlinearen Gitterstatik für Alkalihalogenide

LORE KERN-BAUSCH

Institut für Theoretische Physik der Universität München

(Z. Naturforschg. 21 a, 798—806 [1966]; eingegangen am 16. März 1966)

Mit der Theorie der klassischen nichtlinearen Gitterstatik lassen sich bei Ionenkristallen beliebige Störkonfigurationen im Kristallgitter atomistisch beschreiben. Die Lösung der nichtlinearen Gittergleichungen gelingt, wenn die Kehrmatrix für den linearen Anteil der Gittergleichungen bekannt ist. Die Kehrmatrix wird für Ionenkristalle vom NaCl-Gittertyp aufgestellt und für die Alkalihalogenide LiF, NaCl, NaBr, KCl, KBr und KJ numerisch berechnet. Mit den Ergebnissen wird ein quantenmechanisches F-Zentren-Modell für die verschiedenen Alkalihalogenide behandelt und das gekoppelte Gleichgewichtsproblem Gitterauslenkung—Elektronenkonfiguration gelöst. Die Berechnung der Gitterverschiebungen und des Variationsparameters der Wellenfunktion für den 1s-Zustand erfolgt durch Iteration.

Vom atomistischen Standpunkt aus stellt ein Kristall ein kompliziertes System von Atomkernen und Elektronen dar. Wir wissen aber, daß in Ionenkristallen die Elektronen stark an die einzelnen Kerne gebunden sind; deshalb kann man dort in guter Näherung die Kristallelektronen kollektiv mit den Atomkernen des Gitters zu Ionen zusammenfassen, die in ihrer periodischen Anordnung die Kristallstruktur bestimmen. Lokalisieren wir die Gitterteilchen in ihren Gleichgewichtslagen und vernachlässigen die oszillatorischen Bewegungen um

die Ruhelagen, so haben wir als Modell für einen idealen Ionenkristall ein streng periodisches statisches Punktgitter.

In der Natur finden wir stets nur Realkristalle vor, deren Symmetrie durch Störzentren verletzt ist. Für den Fall, daß diese Zentren auf einen sehr kleinen Bereich lokalisiert sind, gelingt es bei Ionenkristallen häufig, die physikalischen Eigenschaften der Störung durch quantenmechanische Modelle zu beschreiben, die nur wenige Elektronen und Ionen umfassen. Das übrige Gitter darf als Punktgitter