1988 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 30, в. 12
1988 SOLID STATE PHYSICS Vol. 30, № 12

УДК 539.2.01

О ЗАХВАТЕ ЭЛЕКТРОНОВ ДИСЛОКАЦИЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Р. А. Варданян, Г. Г. Киракосян, В. Я. Кравченко

В рамках адиабатического подхода рассмотрен безызлучательный многофононный переход электрона из объемной зоны в автолокализованное конденсонное состояние, порождаемое краевой дислокацией в запрещенной зоне полупроводника. Получена зависимость вероятности захвата электрона как нейтральной (реконструированной), так и отрицательно заряженной дислокацией от температуры, константы деформационного потенциала, а также других параметров кристалла.

Хорошо известно, что ненасыщенные валентные связи в ядрах краевых дислокаций порождают электронные состояния в запрещенной зоне полупроводника. Согласно многочисленным экспериментальным данным, эти состояния в основном достаточно глубокие и поэтому эффективны в процессах рекомбинации неравновесных носителей. Для рекомбинационного захвата избыточного носителя необходим неупругий канал отвода энергии, обеспечивающий переход в состояние, связанное с дислокацией. В области высоких температур, когда излучательные переходы подавлены, существенную роль может играть фононный механизм, при котором энергия захватываемой частицы передается акустическим фононам. Ниже мы рассмотрим безызлучательный захват основных носителей в электронном полупроводнике и его особенности, обусловленные спецификой дислокационных состояний.

Глубокие электронные состояния, связанные с дислокацией, по характеру локализации можно разделить на два типа. К первому типу отнесем состояния с трехмерной локализацией. Они связаны с точечными дефектами, расположенными вдоль линии дислокации. Таковыми могут быть захваченные ядром примеси с глубокими уровнями, ступеньки или перегибы на дислокационной линии, достаточно редко расположенные оборванные связи. Безызлучательный захват в такие состояния осуществляется посредством деформации решетки в окрестности центра и в принципе не отличается от рекомбинации на обычных точечных дефектах, детально изученной в ряде работ [1]. Состояния другого типа — это одномерные зоны, наличие которых на дислокациях, например, в атомарных полупроводниках Ge и Si, обнаружено при исследовании СВЧ проводимости [2] и комбинированного резонанса (для Si [3]). Если такая зона широка и перекрывает энергетическую щель в полупроводнике (эта возможность следует из некоторых численных расчетов [4]), то безызлучательный захват может осуществиться по каскадному механизму Лэкса [5]. Этот же механизм может определять и захват неосновных носителей (дырок) на отрицательно заряженную дислокацию, электростатическое поле которой обусловливает серию густо расположенных связанных состояний большого радиуса; такой случай рассмотрен в работе одного из авторов [6]. В случае же глубокой и узкой одномерной зоны безызлучательный многофононный флуктуационный переход может быть реализован лишь при автолокализации конечного электронного состояния за счет взаимодействия с решеткой. Дело в том, что переход в делокализованное даже в одном измерении состояние нуждается в решеточной флуктуации в объеме (длине линии), вероятность чего экспоненциально мала. В работах [7, 8] это обстоятельство не учитывалось, и экспоненциально малый фактор, содержащий объем флуктуации, там отсутствует. Как известно, в одномерной зоне автолокализация за счет взаимодействия с акустическими фононами (конденсонное состояние) возможна [9, 10].

В настоящей работе рассчитывается переход электрона из трехмерной зоны проводимости в глубокое состояние, автолокализованное в одномерной дислокационной зоне.

1. Волновые функции

Гамильтониан системы, состоящей из электрона, взаимодействующего с потенциалом дислокации и продольными акустическими фононами, и фононов запишем в виде

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+W(\rho)+\sum_q \lambda_q Q_q \chi_{-q}(\mathbf{r})+\frac{1}{2}\sum_q \hbar\omega_q\left(Q_q^2-\frac{\partial^2}{\partial Q_q^2}\right). \tag{1}$$

Здесь $W(\rho)=W_0(\rho)+W_e(\rho)+W_д(\rho,\varphi)$ — потенциал, зависящий от координат в плоскости, перпендикулярной дислокации, направленной вдоль оси z. W включает «химическую» яму W_0, обусловливающую глубину дислокационной зоны, электростатический потенциал W_e заряженной дислокации и деформационный потенциал $W_д=\lambda\,\mathrm{div}\,u_0$ (λ — константа деформационного потенциала, $u_0(\rho,\varphi)$ — поле статических смещений решетки вблизи дислокации). В операторе электрон-фононного взаимодействия $\lambda_q=\lambda(\hbar\omega_q/2G)^{1/2}$, $\omega_q=sq$ — фононная частота, $G=\rho s^2$ — упругий модуль, ρ — плотность кристалла, s—скорость звука. Использовано разложение по вещественным нормальным координатам Q_q, $\chi_q=(2/V)^{1/2}\cdot\sin(\mathbf{qr}+\pi/4)$, V — нормировочный объем.

Воспользовавшись адиабатическим приближением, представим волновую функцию системы в виде произведения $\Psi(\mathbf{r},Q)\,\Phi(Q)$. При этом из гамильтониана выделяется неадиабатический член H', имеющий вид

$$H'\Psi\Phi=-\frac{1}{2}\sum_q \hbar\omega_q\left(2\frac{\partial\Psi}{\partial Q_q}\frac{\partial\Psi}{\partial Q_q}+\Phi\frac{\partial^2}{\partial Q_q^2}\right), \tag{2}$$

который в пренебрежение частотным эффектом [11] (второе слагаемое в (2)) будет служить возмущением, вызывающим безызлучательный переход.

Записав адиабатическую часть гамильтониана в виде, удобном для рассмотрения автолокализации, имеем

$$H_{0e}\Psi_{en}=E_{en}\Psi_n,\quad H_{0p}\Phi=E_p\Phi,\quad E=E_{en}+E_p,$$

$$H_{0e}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+W+\sum_q \lambda_q Q_q\chi_{-q}(\mathbf{r})+\frac{1}{2}\sum_q \hbar\omega_q \bar{Q}_q^2+\sum_q \lambda_q(Q_q-\bar{Q}_q)(\chi_{-q}(r)-\bar{\chi}_{-q}),$$

$$H_{0p}=\frac{1}{2}\sum_q \hbar\omega_q\left[(Q_q-\bar{Q}_q)^2-\frac{\partial^2}{\partial Q_q^2}\right], \tag{3}$$

здесь

$$\bar{Q}_q=-\frac{\lambda_q}{\hbar\omega_q}\bar{\chi}_{-q},\qquad \bar{\chi}_{-q}=\int d^3r\,\chi_{-q}(\mathbf{r})\,|\Psi_n(r)|^2, \tag{4}$$

$\bar{Q}_q$ — сдвижка нормальных координат фононов, обусловленная взаимодействием электрона с фононами в автолокализованном конденсонном состоянии. Последний член в (3) считается малым возмущением.

В конечном состоянии (b, n) (b — электронный, n — фононный индекс) из-за наличия глубокой потенциальной ямы $W_0(\rho)$ поперечное движение электрона локализовано. Влияние W_e и $W_д$ при этом несущественно. В то же время конденсонный потенциал, даваемый двумя следующими членами в H_{0e}, определяет автолокализацию электрона вдоль дислокации.

Подставив электронную функцию Ψ (**r**) в факторизованном виде $\varphi_b(\rho) f_b(z)$ и усреднив H_{0e} по поперечному движению, для $f_b(z)$ получаем нелинейное уравнение Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dz^2} - \Gamma f_b^2(z) + \frac{\Gamma}{2}\int f_b^4(z)\,dz\right] f_b(z) = (E_b + E_D) f_b(z), \quad (5)$$

имеющее решение солитонного типа [9, 10]

$$f_b(z) = \sqrt{\frac{\gamma}{2}}\,\mathrm{ch}^{-1}(\gamma z), \quad \gamma = \frac{\mu\Gamma}{2\hbar^2}, \quad E_b = -E_D - \frac{\mu\Gamma^2}{24\hbar^2}, \quad \Gamma = \frac{\lambda^2}{2G}\int d^2\rho\varphi_b^2(\rho). \quad (6)$$

Необходимое нам в дальнейшем тепловыделение Δ, величина которого совпадает с потенциальной энергией автолокализации, равно

$$\Delta = \frac{1}{2}\sum_q \hbar\omega_q \bar{Q}_q^2 = \frac{\mu\Gamma^2}{12\hbar^2}. \quad (7)$$

Если в качестве $\varphi_b(\rho)$ использовать волновую функцию для аксиально-симметричной ямы глубиной W_0 и шириной порядка постоянной решетки a, то для Γ получаем

$$\Gamma = \frac{3}{4\pi}\frac{\lambda^2}{Ga^2}(\beta a)^2, \quad \beta^2 = 2\mu E_D/\hbar^2, \quad (8)$$

β^{-1} — радиус поперечной локализации, E_D — энергия связи (оценка (8) получена для случая $\beta a < 1$, $2\mu W_0 a^2/\hbar^2 \gg 1$). Критерий континуального приближения — неравенство $\gamma a \ll 1$, а приближение большого тепловыделения справедливо при $\Delta \gg \hbar\omega_D$ (ω_D — дебаевская частота). Согласно (6)—(8), эти критерии совместимы в силу заведомо реализуемого неравенства $\hbar^2/\mu a^2 \gg \hbar\omega_D$.

Мы будем рассматривать переход в состояние покоящегося конденсона, полагая в балансе энергий вклад энергии его движения несущественным. Так как эффективная масса конденсона $\sim\Delta/s^2$, то такой подход обеспечивается уже сформулированным критерием $\Delta \gg \hbar\omega_D$. Конечное колебательное состояние описывается произведением осцилляторных функций, центрированных в $\bar{Q}_q$, т. е.

$$\Phi_b(Q) = \prod_q \Phi_{n_q}(Q_q - \bar{Q}_q),$$

а энергия системы

$$E_b = -E_D - \frac{\Delta}{2} + \sum_q \hbar\omega_q (n_q + 1/2). \quad (9)$$

В начальном состоянии (a, m) электрон принадлежит трехмерной зоне проводимости, в которой, как известно, конденсонная автолокализация не реализуется [12]. Мы рассмотрим два случая.

1) Простейшая ситуация, когда влияние дальнодействующих дислокационных потенциалов W_e и $W_д$ незначительно и исходный электрон свободен

$$\Psi_{a1} = V^{-1/2}\exp(i\mathbf{kr}), \quad E_{a1} = \hbar^2 k^2/2\mu. \quad (10)$$

2) Поля W_e и $W_д$ представляют барьер на пути зонного электрона к дислокации, который должен быть пройден туннелированием. Электростатический потенциал, создаваемый заряженной дислокацией при достаточно высоких температурах, имеет вид

$$W_e(\rho) = U_0 \ln(\rho_D/\rho), \quad \rho < \rho_D, \quad U_0 = 2eq(T)/\varkappa, \quad (11)$$

где ρ_D — радиус экранирования, $q(T)$ — температурно-зависимая линейная плотность заряда, $\varkappa$ — диэлектрическая постоянная. Условия применимости (11) приведены в [6, 7]. Деформационный потенциал $W_д$ в отличие от W_e лишен цилиндрической симметрии. Ограничимся рассмотрением случая, когда U_0 в (11) достаточно большое, так что в значительной области $W_e \gg W_д$ и даже при $W_д < 0$ электрон должен пройти большой туннельный путь. Здесь для учета радиального туннелирования электрона из трехмерной зоны мы воспользуемся результатами, полученными в [7].

2. Сечение захвата

В рамках адиабатического подхода зонный электрон предполагается не взаимодействующим с решеткой. В локализованном состоянии электрон сильно взаимодействует лишь с колебаниями решетки длиной волны порядка радиуса локального состояния. В нашем случае это взаимодействие приводит, с одной стороны, к автолокализации электрона, а с другой — к поляризации решетки, обусловленной сдвижкой нормальных координат фононов, что и обусловливает безызлучательный переход с флуктуационным испусканием в одном акте большого числа фононов. Согласно общей теории [11], вероятность такого многоквантового перехода имеет вид

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \left\langle \sum_q |P_q|^2 (\hbar\omega_q)^2 (2n_q + 1) G(E_a - E_b) \right\rangle. \tag{12}$$

Здесь угловые скобки означают больцмановское усреднение по начальным зонным состояниям электрона и суммирование по конечным состояниям; n_q — планковская функция,

$$P_q = \frac{\lambda_q}{E_D^* + E_a} \langle \Psi_b | \chi_{-q}(\mathbf{r}) | \Psi_a \rangle, \qquad E_D^* = E_D + \frac{\Delta}{2} \tag{13}$$

— электронная часть матричного элемента оператора неадиабатичности H' (2), где использована поправка к ψ-функции за счет последнего члена в (3),

$$G(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar}\varepsilon t + \frac{1}{2}\sum_q \bar{Q}_q^2 [i \sin\omega_q t + (2n_q + 1)(1 - \cos\omega_q t)] \right\} \tag{14}$$

— характеристическая функция, представляющая собой Фурье-образ вероятности флуктуации. Поскольку значение интеграла в (14) определяется $t \sim \hbar/\varepsilon$, то для переходов в достаточно глубокие состояния в меру условия $E_a - E_b \gg \hbar\omega_D$, совпадающего с критерием применимости адиабатического приближения к локализованному состоянию, характеристическая функция может быть представлена в гауссовой форме

$$G(\varepsilon) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp[-(\varepsilon - \Delta)^2/2\sigma^2], \tag{15}$$

где дисперсия, характеризующая полуширину распределения, равна

$$\sigma^2 = \frac{1}{2}\sum_q \bar{Q}_q^2 (\hbar\omega_q)^2 (2nq + 1) = \Delta \begin{cases} 2T, & T > \hbar\omega_D, \\ \hbar\omega_D, & (8\mu s^2 E_D)^{1/2} < T < \hbar\omega_D. \end{cases} \tag{16}$$

Вычисление матричного элемента P_q для исходного состояния (10) дает

$$P_q = \frac{i\pi}{V}\sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \frac{\lambda_q}{E_D^* + E_a} \frac{\beta}{q_\perp^2 + \beta^2} \left[\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\operatorname{ch}\frac{\pi(q_z + k_z)}{2\gamma}} - \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\operatorname{ch}\frac{\pi(q_z - k_z)}{2\gamma}} \right]. \tag{17}$$

В случае туннелирования через электростатический барьер P_q отличается от (17) фактором $(kV/4\pi RL \mid k(a) \mid a)^{1/2} Q$. Здесь L — длина дислокации; R — радиус цилиндра, на который нормирована зонная функция; $k(x) = [k_\perp^2 - 2\mu W_e(x)/\hbar^2]^{1/2}$; Q — туннельная экспонента

$$Q = \exp\left(-\int\limits_a^{\rho(E_\perp)} |k(x)|\,dx\right), \tag{18}$$

$\rho(E_\perp)$ — точка поворота (корень уравнения $k(x)=0$) [7]. Перейдя, как обычно, от суммирования к интегрированию по q, имеем

$$\sum_q |P_q|^2 (\hbar\omega_q)^2 (2n_q+1) = 2\left(\frac{\lambda}{E_D^* + E_a}\right)^2 \frac{\hbar^2\beta^2 T}{\rho V} \ln\left(\frac{1}{\beta a}\right)\begin{cases} 1 \\ \dfrac{kV}{4\pi RL\,|k(a)|\,a}\,Q^2(E_\perp)\end{cases} \tag{19}$$

соответственно для (17) и случая туннелирования. Выражение (19) записано в высокотемпературном пределе $T > \hbar\omega_D$; при низких температурах $T < \hbar\omega_D$ (19) умножается на $^2/_3\,(\hbar\omega_D/T)$. Использовав (15) и (19) для вероятности захвата электрона на нейтральную дислокацию, получаем

$$w = \frac{9L}{2(6\pi^2)^{1/3}}\frac{T}{\hbar^2}(\mu\sigma)^{1/2}\left(\frac{\mu}{M}\frac{\lambda^2}{E_D^*\hbar\omega_D}\right)^2(\beta a)^4\ln\left(\frac{1}{\beta a}\right)\exp\left(-E^{*2}/2\sigma^2\right)\times$$
$$\times\exp\left[\frac{\sigma^2}{4T^2}\left(1+\frac{TE^*}{\sigma^2}\right)\right]D_{-3/2}\left[\frac{\sigma}{T}\left(1+\frac{TE^*}{\sigma^2}\right)\right], \tag{20}$$

где $D_{-3/2}(x)$ — функция параболического цилиндра [13], M — масса элементарной ячейки, $E^* = E_D^* - \Delta$. При вычислении было проведено суммирование по конечным состояниям конденсона, внесшее в (20) фактор $L\gamma$ (независимые автолокализованные состояния могут зарождаться на расстоянии $\sim\gamma^{-1}$ друг от друга).

Согласно (16), $\sigma \gg T$ при $\Delta \gg T$; последнее неравенство соответствует большой по сравнению с температурой энергии связи конденсона и предполагается выполненным. При этом w принимает вид

$$w = \frac{9L}{2(6\pi^2)^{1/3}}\frac{T^2}{\hbar\sigma}\left(\frac{\mu T}{\hbar^2}\right)^{1/2}\left(\frac{\mu}{M}\frac{\lambda^2}{E_D^*\hbar\omega_D}\right)^2(\beta a)^4\ln\left(\frac{1}{\beta a}\right)\frac{\exp\left(-E^{*2}/2\sigma^2\right)}{\left(1+TE^*/\sigma^2\right)^{3/2}}. \tag{21}$$

Для получения радиуса захвата необходимо воспользоваться соотношением $\rho_t = w/jL$, где j — поток частиц, направленный на дислокацию. Таким образом, окончательно получаем

$$\rho_t = \frac{9\pi^2}{4(6\pi^2)^{1/3}}\left(\frac{\hbar^2 T}{\mu\sigma^2}\right)^{1/2}\left(\frac{\mu}{M}\frac{\lambda^2}{E_D^*\hbar\omega_D}\right)^2(\beta a)^4\ln\left(\frac{1}{\beta a}\right)\frac{\exp\left(-E^{*2}/2\sigma^2\right)}{\left(1+TE^*/\sigma^2\right)^{3/2}}. \tag{22}$$

Как уже отмечалось, при низких температурах предэкспоненты в (21) и (22) должны быть умножены на $^2/_3\,(\hbar\omega_D/T)$. Для радиуса захвата электрона на отрицательно заряженную дислокацию получается выражение, отличающееся от (22) множителем

$$F = \left(\frac{2\mu U_0}{\hbar^2}a^2\ln\frac{\rho_D}{a}\right)^{-1/2}\exp\left[-\left(\frac{2\pi\mu U_0}{\hbar^2}\right)^{1/2}\rho_D\right]. \tag{23}$$

Если концентрация дислокаций в полупроводнике равна N_D, то время жизни неравновесного носителя, по определению, связано с радиусом захвата ρ_t следующим образом:

$$\tau^{-1} = N_D\rho\langle v\rangle,$$

где $\langle v\rangle$ — средняя скорость носителя в зоне, а концентрация достаточно мала, чтобы вклады отдельных дислокаций в процесс захвата были аддитивны.

3. Заключительные замечания

Известно, что пластическая деформация полупроводников увеличивает темп рекомбинации избыточных неравновесных носителей. Мы рассмотрели вопрос о безызлучательном переходе электрона из зоны проводимости в одномерные дислокационные состояния, сопровождающемся автолокализацией в конечных состояниях из-за взаимодействия с акустическими фононами. Разумеется, рекомбинация может осуществляться не только в состояния дислокационной зоны, но и на уровни точечных дефектов, связанных с дислокационной линией (ступеньки, перегибы, генерируемые вакансии и т. д.). Качественное сравнение роли этих двух различных каналов можно провести, представив зонный дислокационный захват как захват на точечные центры с линейной плотностью γ и объемом локализации на них $\Omega \sim \gamma^{-1}\beta^{-2}$. Механизм захвата на таких «центрах» и на обычных дефектах с глубокими уровнями одинаков, так что отличия в вероятностях переходов в основном определяются величинами дисперсии σ и эффективной энергии перехода E^* во флуктуационной экспоненте. Так как, согласно (16) и (6)—(8), $\sigma^2 \sim \Delta \sim \gamma\beta^2 \sim \Omega^{-1}$, то для более размытого, чем точечный центр, конденсона дисперсия уменьшается. Относительно E^* отметим, что при захвате на локальный дефект в качестве E^* фигурирует энергия «голого» уровня, без поляризационной сдвижки [1]. В случае же перехода в автолокализованное состояние, как показано выше, $E^* = |E_D| - \Delta/2$, эффективная энергия перехода уменьшена на величину кинетической энергии электрона в конденсонной яме, ослабляющей энергию связи в (9) на $-\Delta/2$. Если полагать, что для обоих вариантов захвата E^* близки и $E^* \gg \Delta$, то захват на дефекты в силу отличий в величинах дисперсии предпочтительнее, однако плотность конденсонных «центров» γ существенно превышает обычные величины линейной плотности дефектов l^{-1}. Характерные расстояния l между центрами захвата на дислокации можно оценить по размерам прямолинейных участков дислокационных линий; в атомарных полупроводниках при умеренных плотностях дислокаций $l \sim$ десятков микрон, так что $\gamma l \gg 1$. Поэтому можно полагать, что дислокационный канал играет существенную роль в усилении рекомбинационных процессов при пластической деформации.

Авторы признательны С. В. Иорданскому, Ю. А. Осипьяну, В. И. Перелю, Э. И. Рашба и Д. Е. Хмельницкому за обсуждение результатов работы.

Литература

[1] *Коварский В. А., Перельман Н. Ф., Авербух И. Ш.* Многоквантовые процессы. М.: Энергоатомиздат, 1985. 161 с.

[2] *Grazhulis V. A., Kveder V. V., Mukhina V. Yu.* Phys. St. Sol. (a), 1977, vol. 44, N 1, p. 107—115.

[3] *Кведер В. В., Кравченко В. Я., Мчедлидзе Т. Р.* и др. Письма в ЖЭТФ, 1986, т. 43, № 4, с. 202—205.

[4] *Jones R.* Proc. of Yamada Conf. Dislocation in Solids (Japan), 1984, p. 343—348.

[5] *Lax M.* Phys. Rev., 1960, vol. 119, N 5, p. 1502—1523.

[6] *Варданян Р. А.* ЖЭТФ, 1977, т. 73, № 6, с. 2313—2318.

[7] *Варданян Р. А.* ЖЭТФ, 1979, т. 76, № 6, с. 2241—2248.

[8] *Варданян Р. А., Киракосян Г. Г.* ФТТ, 1982, т. 24, № 10, с. 3020—3025.

[9] *Рашба Э. И.* ЖОС, 1957, т. 2, № 1, с. 75—87.

[10] *Воронов В. П., Косевич А. М.* ФНТ, 1980, т. 6, № 3, с. 371—375.

[11] *Перлин Ю. Е.* УФН, 1963, т. 80, № 4, с. 553—595.

[12] *Дейген М. Ф.* ЖЭТФ, 1956, т. 31, № 9, с. 504—511.

[13] *Градштейн И. С., Рыжик И. М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1971. 1108 с.

Институт физики твердого тела АН СССР
Черноголовка
Московская область

Поступило в Редакцию
15 июня 1988 г.