

УДК 541.124

ПЕРЕЗАРЯДКА ДИСЛОКАЦИЙ В ПЛАСТИЧЕСКИ
ДЕФОРМИРУЕМЫХ КРИСТАЛЛАХ A^2B^6

Р. А. Варданян, С. Г. Веселко

Рассмотрен квантовый переход слабосвязанного электрона с иона, оказавшегося в процессе пластической деформации кристалла в области пространственного заряда краевой дислокации, в автолокализованное на дислокации конденсированное состояние. В рамках адиабатического приближения учтено электрон-фононное взаимодействие, обеспечивающее возможность многоквантового флуктуационного испускания и поглощения фононов в начальном и конечном состояниях. Получена вероятность элементарного акта перезарядки дислокации как функции температуры, константы электрон-фононного взаимодействия и расстояния между дислокацией и ионом. На основе численных расчетов для полупроводниковых соединений A^2B^6 получены зависимости эффективности процесса перезарядки как функции скорости деформации, энергии ионизации иона, температуры и напряженности электростатического поля, окружающего краевую дислокацию.

При движении заряженной дислокации в процессе пластической деформации кристалла точечный центр может оказаться вблизи ядра дислокации в области ее электростатического поля. Под действием этого поля возможна ионизация точечного центра, рассмотренная в работе [1]. Однако для достаточно глубоких точечных центров в зависимости от зарядового состояния дислокации, температуры и скорости деформации может стать существенным другой процесс, состоящий в туннельном переходе слабосвязанного электрона с иона на дислокационные оборванные связи. Согласно экспериментальным данным, такие ненасыщенные валентные связи порождают в запрещенной зоне полупроводника узкую одномерную зону с шириной, много меньшей глубины ее залегания [2]. Поэтому туннельный перенос электрона с центра на дислокацию в случае реализации автолокализованного конденсированного состояния должен сопровождаться многофононными процессами в обоих локализованных состояниях. Необходимость исследования такого процесса перезарядки диктуется рядом задач деформационной спектроскопии и лежит в основе построения макрокинетики возникновения в широкозонных полупроводниковых соединениях A^2B^6 дислокационных токов [3, 4], деформационной люминесценции [5, 6], фотопластического эффекта [7, 8], стимулированной деформацией проводимости [9].

1. Постановка задачи. Волновые функции

В настоящей работе при нахождении вероятности перезарядки мы будем следовать работам [10-12], в которых исследовался донорно-акцепторный электронный перенос, и воспользуемся результатами общей теории многофононных переходов [13]. Туннелирующий электрон связан с решеткой слабее остальных электронов кристалла и тем самым является выделенной частицей, совершающей квантовый переход с иона на дислокацию. Тогда в одноэлектронном приближении гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H = H_0 + U + U_i + U_d + H_L + H_{in}.$$

Здесь H_0 — гамильтониан свободного электрона с эффективной массой μ ; U — электростатический потенциал заряженной дислокации; U_i , U_d — короткодействующие потенциалы иона и дислокации; H_L — гамильтониан решетки, взятый в гармоническом приближении; H_{int} — оператор электрон-фононного взаимодействия в приближении потенциала деформации. Многофононность перехода обусловлена изменением нормальных координат фононов в локализованных состояниях. Изменением фононных частот («частотный эффект»), ангармонизмом и возможным проявлением локальных мод мы пренебрегаем, рассматривая лишь взаимодействие электронов с акустическими фононами.

Для нахождения вероятности перезарядки необходимо, вообще говоря, найти волновую функцию электрона в суммарном поле иона и дислокации. Однако ввиду короткодействия потенциалов U_i и U_d на далеких расстояниях, превышающих размеры локализации электрона в начальном и конечном состояниях, их взаимное влияние мало. Поэтому достаточно воспользоваться волновой функцией ψ_d электрона в непосредственной близости дислокации и определить асимптотику волновой функции ψ_i начального состояния электрона на центре в области дислокации. Тогда, как показано в работах [11-13], вероятность перезарядки может быть представлена в виде

$$W(\varepsilon) = \int dE w(E) F_i^+(E_i + E) F_d^-(E_d + E), \quad (1)$$

где

$$w(E) = \frac{2\pi}{\hbar} |M(E)| \delta(E + E_i - \varepsilon), \quad M(E) = \int \psi_i^* U_d \psi_d d\mathbf{r} \quad (2)$$

— вероятность туннелирования электрона с энергией E с иона на дислокацию, $F^{+(\cdot-)}(\varepsilon)$ — вероятность флюктуационного испускания (поглощения) большого числа фононов с изменением энергии электрона на ε .

Направим ось z вдоль дислокации. В цилиндрической системе координат (ρ, φ, z) аппроксимируем дислокацию двумерным потенциалом притяжения нулевого радиуса

$$U_d = -V_d \cdot \delta(\rho)/2\pi\rho, \quad (3)$$

окруженным электростатическим барьером [14]

$$U = U_0 \ln(\rho_0/\rho), \quad \rho \leq \rho_0, \quad (4)$$

где $U_0 = 2e^2 f(T)/\kappa a$; κ — диэлектрическая постоянная; a — расстояние между атомами вдоль дислокации, ρ_0 — радиус экранирования; $f(T)$ — зависящий от температуры T коэффициент заполнения дислокации электронами. В качестве точечного центра рассмотрим для простоты отрицательный ион, расположенный в плоскости $z=0$ на расстоянии ρ_0 от оси дислокации. Нейтральный атомный остаток иона аппроксимируем δ -потенциалом

$$U_i = -V_i \frac{\delta(\rho - \rho_0)}{\rho} \delta(\varphi) \delta(z). \quad (5)$$

Угол φ отсчитывается от прямой, соединяющей центр с дислокацией. Для получения асимптотики ψ_i вблизи дислокации используем интегральное представление уравнения Шредингера

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | E) U_i(\mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

где $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | E)$ — трехмерная функция Грина частицы с энергией E в аксиальном поле (4). Учитывая, что в отсутствие потенциала U_i движение частицы в поле (4) вдоль оси z свободно, используя свойство факторизуемости пропагатора [15]

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | t) = K(\rho, \rho' | t) K(z - z' | t)$$

и выражение для пропагатора свободной частицы

$$K(z - z' | t) = \left(\frac{\mu}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i\mu(z - z')^2}{2\hbar t} \right],$$

с учетом определения

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | E) = \frac{1}{\hbar} \int K(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | t) \exp \left(\frac{iEt}{\hbar} \right) dt$$

для волновой функции ψ_z получаем

$$\psi_z = \frac{V_z \psi_z(\rho_0, 0, 0)}{2\pi} \int G(\rho, \rho_0; \varphi, 0 | E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu}) \exp(i k_z z) dk_z. \quad (6)$$

Здесь

$$G\left(\rho, \rho_0; \varphi, 0 | E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu}\right) = \frac{\mu}{2\pi \hbar^3} \frac{1}{\sqrt{\rho \rho_0}} \sum_m \frac{\exp \left[im\varphi - \left| \int_{\rho_0}^{\rho} k_m(\rho) d\rho \right| \right]}{\sqrt{k_m(\rho) k_m(\rho_0)}}$$

— квазиклассическая двумерная функция Грина [16],

$$k_m(\rho) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu \left[U(\rho) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu \rho^2} - E \right]}.$$

При вычислении электронного матричного элемента $M(E)$ важна асимптотика волновой функции (6) вблизи дислокации на расстояниях $\rho \ll \beta^{-1}$, где β — параметр поперечной локализации волновой функции ψ_z электрона на дислокации. Для таких расстояний, пренебрегая величинами порядка $(\rho_0 \beta)^{-m}$, в (6) можно сохранить лишь слагаемое с $m=0$. Физически это означает, что наибольший вклад в вероятность туннелирования вносит траектория с нулевым прицельным параметром, соответствующая прямой, соединяющей центры в плоскости $z=0$. Лишь при очень малых расстояниях ρ_0 между ионом и дислокацией становятся существенны траектории с $m \neq 0$. Однако при таких ρ_0 неправомерно предположение о слабом взаимном влиянии иона и дислокации, лежащее в основе нашего рассмотрения. Таким образом, выражение для волновой функции ψ_z принимает вид

$$\psi_z = \frac{C}{\sqrt{\rho}} \int \frac{\exp \left[- \left| \int_{\rho_0}^{\rho} k_0(\rho) d\rho \right| \right]}{\sqrt{k_0(\rho) k_0(\rho_0)}} \exp(i k_z z) dk_z,$$

где

$$k_0(\rho) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu \left[U(\rho) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} - E \right]}.$$

Поскольку показатель туннельной экспоненты велик, то при вычислении нормировочной постоянной C интеграл по k_z может быть легко вычислен методом перевала с перевальным значением $k_z=0$

$$C = \frac{1}{2\pi^{5/4}} \left\{ \int_0^{\infty} \frac{\exp \left[-2 \left| \int_{\rho_0}^{\rho} k(\rho) d\rho \right| \right]}{k(\rho) k(\rho_0)} \times \right. \\ \left. \times \left[\left| \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{d\rho}{k(\rho)} \right| \right]^{-1/2} d\rho \right\}^{1/2}, \quad k(\rho) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu [U(\rho) - E]}.$$

При $\rho_0 k(\rho_0) \gg 1$ константа C легко вычисляется, и для волновой функции ψ_i окончательно получаем

$$\psi_i = 2^{-5/4} \pi^{-3/2} \frac{k(\rho_0)}{\sqrt{\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp \left[- \left| \int_{\rho_0}^{\rho} k_0(\rho) d\rho \right| \right]}{\sqrt{k_0(\rho) k_0(\rho_0)}} \exp(ik_z z) dk_z. \quad (7)$$

Добавление к потенциалу нулевого радиуса иона (5) медленно меняющегося потенциала $U(\rho)$ (4), удовлетворяющего условию квазиклассичности

$$\left| \frac{1}{k^2(\rho)} \frac{dk(\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_0} \ll 1,$$

как хорошо известно [17], не изменяет граничного условия на радиальную часть волновой функции

$$\frac{1}{\sqrt{\rho} \psi_i} \frac{d(\sqrt{\rho} \psi_i)}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_0} = - \frac{\sqrt{2\mu E_i^0}}{\hbar},$$

из которого следует, что действие поля дислокации приводит к сдвигу уровня $-E_i^0$ основного состояния иона, расположенного в ρ_0

$$E_i = E_i^0 - U(\rho_0),$$

соответствующей искривлению зон электростатическим потенциалом (4).

Волновая функция ψ_d описывает состояние электрона на дислокации. Безызлучательный многофононный переход в такое состояние возможен лишь при автолокализации электрона вдоль дислокации за счет взаимодействия с акустическими фононами (акустический полярон) [18-20].

В этом случае волновая функция ψ_d электрона, локализованного в цилиндрической яме U_d , описывается выражением [20]

$$\psi_d = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} \beta K_0(\beta\rho) \frac{\exp(im\varphi)}{\text{ch } \gamma z}, \quad (8)$$

где $K_0(\beta\rho)$ — функция Макдональда [21]; $\beta = 1/\hbar \cdot \sqrt{2\mu E_d}$; $-E_d$ — глубина залегания дислокационной зоны; m — проекция момента на ось z . Для $\beta\alpha < 1$ параметр автолокализации

$$\gamma = \frac{\mu\Gamma}{2\hbar^2}, \quad \Gamma = \frac{3}{2\pi} \frac{\mu E_d^2}{G\hbar^2} E_d,$$

здесь E_c — константа деформационного потенциала, G — упругий модуль.

В случае достаточно высоких температур и (или) сильного электрон-фононного взаимодействия выражение для $F_{\alpha}^{\pm}(\epsilon)$ ($\alpha = i, d$), как показано в [1, 20], может быть аппроксимировано нормированной на единицу гауссовой функцией

$$F_{\alpha}^{\pm}(\epsilon) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar^2\sigma_{\alpha}^2} \right)^{1/2} \exp \left[- \frac{(\epsilon \pm \delta_{\alpha})^2}{2\hbar^2\sigma_{\alpha}^2} \right]. \quad (9)$$

В (9) δ_{α} — параметр тепловыделения, характеризующий энергию поляризации решетки при изменении зарядового состояния центра (дислокации); $\hbar^2\sigma_{\alpha}^2$ — дисперсия, определяющая температурную зависимость процесса перезарядки. Согласно результатам работ [1, 20], для параметров тепловыделения δ_{α} имеем

$$\delta_i = \frac{3\pi^2}{2} \frac{\mu}{M} \left(\frac{E_c}{\hbar\omega_m} \right)^2 E_i^0, \quad \delta_d = \frac{\mu\Gamma^2}{12\hbar^2},$$

где M — масса элементарной ячейки, ω_m — максимальная (дебаевская) частота фононов. В области высоких температур $kT > \hbar\omega_m$, когда пластическая деформация кристаллов A^2B^6 особенно легко осуществима, $\hbar^2\sigma_{\alpha}^2 = = 2kT\delta_{\alpha}$.

2. Вероятность перезарядки, стимулированной пластической деформацией

Подставляя волновые функции (7) и (8) в (2), с учетом (3) после простых вычислений для матричного элемента перехода $M(E)$ имеем

$$M(E) = -\frac{2^{-7/4}}{\pi} K_0(\beta a) \frac{V_d k(\rho_0) \beta}{\sqrt{\gamma a}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\left[-\int_a^{\rho_0} k_0(\rho) d\rho\right]}{\sqrt{k_0(a) k_0(\rho_0)}} \frac{dk_z}{\operatorname{ch}(\pi k_z / 2\gamma)}.$$

Для вычисления вероятности туннелирования электрона (2) при интегрировании по k_z воспользуемся методом перевала. Перевальному пути соответствует $k_z=0$, т. е. траектория перехода лежит в плоскости $z=0$. Используя, как и при нахождении нормировочной постоянной, условие $\rho_0 k(\rho_0) \gg 1$, для вероятности электронного перехода окончательно получаем

$$w(E) = w_0 \exp\left[-2 \frac{\sqrt{2\mu U_0}}{\hbar} \rho_0 e^{-E/U_0} \Gamma\left(\frac{3}{2}; \ln \frac{\rho_0}{\rho_0} - \frac{E}{U_0}\right)\right] \delta(E + E_i - \varepsilon),$$

где

$$w_0 = \frac{K_0^2(\beta a)}{2} \frac{k(\rho_0)}{k(a)} e^{E/U_0} \Gamma^{-1}\left(\frac{1}{2}; \ln \frac{\rho_0}{\rho_0} - \frac{E}{U_0}\right) \frac{\sqrt{\mu U_0} V_d^2 \beta^2}{\hbar^2 \rho_0 \gamma a},$$

$\Gamma(\alpha, x)$ — неполная гамма-функция [21]. Простым интегрированием по E , используя выражение (9), легко получить вероятность перезарядки $W(\varepsilon)$, зависящую от энергии активации ε электрона на ионе. Нахождение полной вероятности W_{π} переноса электрона за единицу времени сводится к интегрированию $W(\varepsilon)$ по всем энергиям, и окончательное выражение принимает вид

$$W_{\pi} = W_0 \left[\frac{2\pi}{|f'(\varepsilon_{\pi})|} \right]^{1/2} \exp[f(\varepsilon_{\pi})], \quad (10)$$

где

$$W_0 = \frac{K_0^2(\beta a)}{4\pi} \frac{\sqrt{\mu U_0} V_d^2 \beta^2}{\hbar^2 \sigma_i \sigma_d \rho_0 \gamma a} e^{-\frac{E_i^0 - \varepsilon_{\pi}}{U_0}} \Gamma^{-1}\left(\frac{1}{2}; \frac{E_i^0 - \varepsilon_{\pi}}{U_0}\right) \left[\frac{(E_i^0 - \varepsilon_{\pi})/U_0}{\ln \frac{\rho_0}{a} + \frac{E_i^0 - \varepsilon_{\pi}}{U_0}} \right]^{1/2},$$

$$f(\varepsilon) = -2 \frac{\sqrt{2\mu U_0}}{\hbar} \rho_0 e^{\frac{E_i^0 - \varepsilon}{U_0}} \Gamma\left(\frac{3}{2}; \frac{E_i^0 - \varepsilon}{U_0}\right) - \frac{(\varepsilon + \delta_i)^2}{2\hbar^2 \sigma_i^2} - \frac{(\varepsilon + \Delta - \delta_d)^2}{2\hbar^2 \sigma_d^2},$$

$\Delta = E_d - E_i$ — дефект резонанса. Перевальное значение энергии ε_{π} определяет эффективную энергию туннелирования $E_{\text{эф}} = -E_i + \varepsilon_{\pi}$ и находится из уравнения

$$\frac{\sqrt{2\mu U_0}}{\hbar} \rho_0 e^{\frac{E_i^0 - \varepsilon_{\pi}}{U_0}} \Gamma\left(\frac{1}{2}; \frac{E_i^0 - \varepsilon_{\pi}}{U_0}\right) = \frac{(\varepsilon_{\pi} + \delta_i) U_0}{\hbar^2 \sigma_i^2} + \frac{(\varepsilon_{\pi} + \Delta - \delta_d) U_0}{\hbar^2 \sigma_d^2}, \quad (11)$$

следующего из условия $f'(\varepsilon_{\pi})=0$.

Для нахождения энергии ε_{π} из трансцендентного уравнения (11) необходим численный расчет. Однако для небольших расстояний ρ_0 возможно аналитическое решение уравнения (11), которое позволяет выявить ряд качественных особенностей процесса перезарядки. Действительно, уравнение (11) можно представить в виде

$$A e^{\alpha \Gamma(1/2; x)} = B - x, \quad (12)$$

в котором

$$x = \frac{E_i^0 - \varepsilon_{\pi}}{U_0}, \quad A = \sqrt{2\mu U_0} / \hbar \rho_0 \frac{\hbar^2 \sigma_i^2 \sigma_d^2}{U_0^2 (\sigma_i^2 + \sigma_d^2)}, \quad B = \frac{E_i^0 - Q}{U_0}.$$

В области высоких температур $Q = -\Delta\delta^*/\delta_i$, где $\delta^* = \delta_i\delta_d/(\delta_i + \delta_d)$ — приведенная энергия тепловыделения. Величина Q отрицательна (мы рассматриваем случай экзотермического процесса перезарядки $\Delta > 0$) и в зависимости от соотношения электрон-фононной связи на ионе и дислокации изменяется в интервале $-\Delta \leq Q \leq 0$. В асимптотическом пределе $x \gg 1$ для малых расстояний ρ_0 , соответствующих условию $A/B^{3/2} \ll 1$, $x = B(1 - A/B^{3/2})$, откуда

$$\epsilon_{\Pi} = Q + 2 \frac{kT\delta^*}{\hbar} \sqrt{\frac{2\mu}{E_d^2 - Q}} \rho_0. \quad (13)$$

Качественное поведение перевальной энергии ϵ_{Π} как функции расстояния между ионом и дислокацией ρ_0 таково, что с уменьшением ρ_0 она уменьшается, достигая $\epsilon_{\Pi} = Q$. В случае, когда $\delta_i \gg \delta_d$, $Q = -\Delta$ и

$$\epsilon_{\Pi} = -\Delta + 2 \frac{kT}{E_d} \delta_d^2 \rho_0.$$

Это означает, что при малых ρ_0 энергия практически полностью выделяется на ионе и электроны туннелируют с эффективной энергией, близкой к $-E_d$. В другом предельном случае, когда $\delta_d \gg \delta_i$, при малых ρ_0 энергия большей частью выделяется на дислокации, а энергия туннелирующих электронов близка к $-E_i$. Следовательно, возникновение «горячей» и «холодной» точек, сопровождающих процесс перезарядки, и эффективная энергия туннелирования электронов зависят от расстояния между центром и дислокацией, расположения относительно друг друга их энергетических уровней и параметров электрон-фононного взаимодействия. Аналогичная зависимость отмечена в процессах донорно-акцепторной перезарядки [10–12].

Для больших расстояний ρ_0 аналитическое решение уравнения (11) невозможно, и для количественных данных необходимо привлечь численные методы. Следует, однако, заметить, что на больших расстояниях в конкуренцию с перезарядкой вступает процесс многофононной полевой ионизации центра [1].

3. Численные расчеты.

Эффективный радиус перезарядки

Для определения эффективности перезарядки дислокации по сравнению с процессом ионизации центра при проведении численных расчетов мы воспользуемся типичными значениями параметров для кристаллов A^2B^6 [22]: $a \sim 4 \cdot 10^{-8}$ см, $\mu \sim 0.2 m_e$, $M \sim 10^{-21}$ г, $E_c \sim 10$ эВ, $\hbar\omega_m \sim 0.03$ эВ, $E_d \sim 1.5$ эВ, $\kappa \sim 10$, $G \sim 10^{12}$ дн/см², $\rho_s = \sim 10^{-5}$ см, $f(T) \sim 0.3$ [5]. На рис. 1 представлена зависимость вероятности перезарядки $W_{\Pi}(\rho_0)$ от расстояния ρ_0 . Следует отметить, что численные расчеты подтверждают качественную зависимость перевальной энергии ϵ_{Π} от расстояния ρ_0 (13).

До сих пор мы рассматривали элементарный акт туннельного переноса электрона. Что касается вопросов макроскопической кинетики, то для выяснения эффективности процесса перезарядки (II) дислокации и ионизации (И) точечного центра движущейся со скоростью V дислокацией с помощью условия

$$\frac{2}{V} \int_{R_{\alpha}}^{\rho_0} \frac{W_{\alpha}(\rho_0) \rho_0 d\rho_0}{\sqrt{\rho_0^2 - R_{\alpha}^2}} = 1, \quad \alpha = \Pi, \text{ И} \quad (14)$$

введем понятие эффективного радиуса взаимодействия R_{α} точечного центра с дислокацией. Величина R_{α} представляет собой максимальный прицельный параметр, при котором точечный центр с достоверностью перезаряжает движущуюся дислокацию или ионизуется. Типичные значения скорости движения дислокации $V = 10^{-2} \div 10^{-5}$ см/с. Численное интегрирование (14) показало, что R_{α} слабо зависит от скорости движения дислокации V .

Для понимания природы многих физических явлений, наблюдаемых при движении заряженных дислокаций и перечисленных в начале статьи, главным является ответ на вопрос, что происходит раньше: ионизация центра в поле дислокации или переход электрона с центра на дислокацию. С этой целью для различных значений глубины точечного центра E_i^0 была рассчитана зависимость эффективного радиуса взаимодействия R_α ($\alpha = \Pi, \text{I}$) от коэффициента заполнения f (вероятность ионизации W_Π (ρ_0) была найдена в работе [1]). Рис. 2 иллюстрирует переход от процесса перезарядки к процессу ионизации при увеличении коэффициента заполнения f и, следовательно, при возрастании напряженности электрического поля вокруг движущейся дислокации.

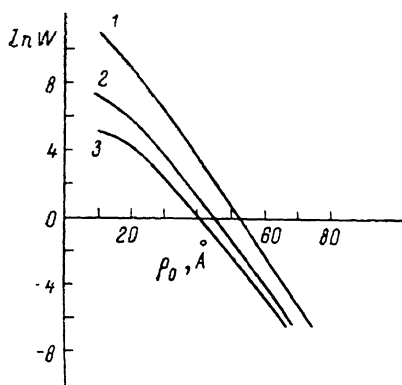


Рис. 1. Зависимость вероятности перехода электрона с центра на дислокацию от расстояния между ними. $f=0.3$.
 E_i^0 (эВ), T (К): 1 — 1,25, 300; 2 — 1,400;
 3 — 1, 300.

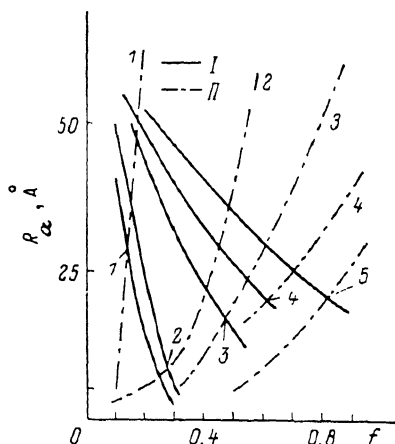


Рис. 2. Зависимость эффективных радиусов перезарядки (I) и ионизации (II) от коэффициента заполнения дислокации f .
 $V = 10^{-8}$ см/с, $E_d = 1.5$ эВ, $E_i^0 = 0.75$ (1), 0.9 (2), 1 (3), 1.1 (4), 1.25 эВ (5).

При рассмотрении явлений деформационной люминесценции и индуцированной деформацией проводимости надо иметь в виду, что к опустошению глубоких центров приводят процессы ионизации и перезарядки и поэтому необходимо использовать наибольший из эффективных радиусов этих процессов.

Рис. 2 позволяет определить зависимость эффективного радиуса взаимодействия R_α от глубины точечного центра E_i^0 при разных коэффициентах заполнения f . В нашем случае R_Π увеличивается с ростом E_i^0 , что имеет следующее объяснение. При указанных значениях параметров кристаллов A^2B^6 тепловыделение δ_d на дислокации гораздо меньше тепловыделения δ_i на центре. В этом случае, как показано выше, практически вся энергия $\Delta = E_d - E_i$ выделяется на центре и независима от энергии E_i^0 электроны туннелируют с энергией $-E_i$. С ростом E_i^0 количество энергии уменьшается и, следовательно, возрастает вероятность многофононного процесса выделения энергии. Поэтому при одном и том же расстоянии ρ_0 вероятность перезарядки центра будет расти с ростом E_i^0 (рис. 1) и соответственно процесс будет возможен при больших прицельных расстояниях R_Π . Полученные результаты по эффективности процессов перезарядки и ионизации позволяют определить критическое значение коэффициента заполнения f_c , при котором процесс перезарядки перестает превалировать над ионизацией. На рис. 3 представлена зависимость f_c от глубины перезаряжающего центра, полученная из условия равенства эффективных радиусов перезарядки и ионизации. При этом коэффициент f заполнения дислокации электронами определяется термодинамическими соображениями и в изучаемых элементарных актах переноса электронного возбуждения может принимать значения как большие, так и меньшие f_c .

В заключение остановимся на основных критериях, используемых в нашем рассмотрении. Условие применимости квазиклассического приближения

$$\frac{U_0}{\rho_0} \ll (2\mu)^{1/2} \frac{(E_i^0 - \varepsilon_n)^{3/2}}{\hbar}$$

нарушается лишь при ρ_0 порядка постоянной решетки a . Однако на таких расстояниях становятся существенными как эффекты корреляции фононов [23], поглощаемых и испускаемых на ионе и дислокации, так и переходы с $m \neq 0$, обусловленные взаимным влиянием глубоких электронных состояний. Таким образом, результаты, полученные в настоящей работе, качественно верны вплоть до расстояний $\rho_0 \sim a$. Поскольку критерий (14)

предполагает, что все дислокации движутся по разным путям, не учитывая возможное перекрытие обметаемых объемов, то зависимости (рис. 1—3) следует рассматривать как оценки снизу.

В настоящей работе мы ограничивались рассмотрением взаимодействия туннелирующего электрона лишь с акустическими фононами. Это связано, во-первых, с тем, что в интересующей нас области температур $T < \hbar\omega_0 \sim$

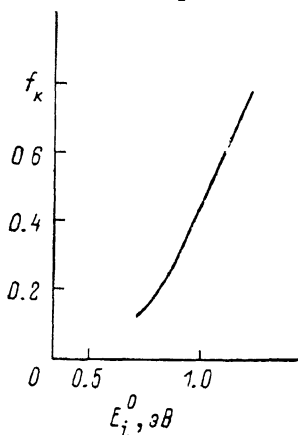


Рис. 3. Зависимость критического заполнения дислокации f_c от глубины перезаряжающего центра E_i^0 . $E_d = 1.5$ эВ, $T = 300$ К, $V = 10^{-5}$ см/с.

~ 500 К (ω_0 — частота оптических фононов) оптические фононы практически не возбуждены [24], а во-вторых, малостью константы взаимодействия электронов с оптическими фононами по сравнению с константой деформационного потенциала в кристаллах типа CdS (см. [25, с. 140]).

Авторы признательны А. Д. Гладуну, М. А. Кожушнеру, Ю. А. Осипьяну и В. Ф. Петренко за обсуждение полученных результатов, а также Е. Г. Веселко за проведение численных расчетов.

Список литературы

- [1] Варданян Р. А. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 1. С. 288—295.
- [2] Grazhulis V. A., Kveder V. V., Mukhina V. Yu. // Phys. St. Sol. (a). 1977. V. 43. N 2. P. 407—415; V. 44. N 1. P. 107—115.
- [3] Осипьян Ю. А., Петренко В. Ф. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 10. С. 1362—1371.
- [4] Ossipyan Yu. A., Petrenko V. F. // J. de Phys. 1979. V. C40. P. 161—167.
- [5] Бредихин С. И., Шмурак С. З. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 3. С. 1028—1037.
- [6] Варданян Р. А., Веселко С. Г., Киракосян Г. Г. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 24—29.
- [7] Осипьян Ю. А., Савченко И. Б. // Письма в ЖЭТФ. 1968. Т. 7. № 4. С. 130—134.
- [8] Petrenko V. F., Whitworth R. W. // Phil. Mag. 1980. V. A41. P. 681—699.
- [9] Зарецкий А. В., Петренко В. Ф. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 4. С. 1167—1174.
- [10] Кожушнер М. А. // ФТТ. 1971. Т. 13. № 9. С. 2601—2609.
- [11] Иванов Г. К., Кожушнер М. А. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 1. С. 9—16.
- [12] Иванов Г. К., Кожушнер М. А. // Хим. физика. 1982. № 8. С. 1039—1053.
- [13] Перлин Ю. Е. / УФН. 1963. Т. 80. № 4. С. 553—595.
- [14] Варданян Р. А. // ЖЭТФ. 1977. Т. 73. № 6. С. 2313—2318.
- [15] Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М., 1968. 382 с.
- [16] Ариштейн А. Э., Варданян Р. А. // ДАН СССР. 1984. Т. 276. № 6. С. 1365—1369.
- [17] Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. 240 с.
- [18] Рашба Э. И. // ЖОС. 1957. Т. 2. № 1. С. 75—88.
- [19] Воронов В. П., Косевич А. М. // ФНТ. 1980. Т. 6. № 3. С. 371—374.
- [20] Варданян Р. А., Киракосян Г. Г., Кравченко В. Я. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 12. С. 3565—3570.

- [21] Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., 1971. 1100 с.
- [22] Физика и химия соединений A^2B^6 . М., 1970. 624 с.
- [23] Golubov S. I., Konobeev Yu V. // Phys. St. Sol. (b). 1975. V. 71. N 1. P. 777—786.
- [24] Rickauzen G. // Proc. Roy. Soc. A. 1957. V. 241. N 1227. P. 480—494.
- [25] Коварский В. А. Кинетика безызлучательных процессов. Кишинев, РИО АН МССР, 1968. 08 с.

Московский
станкоинструментальный институт
Москва

Поступило в Редакцию
16 января 1989 г.
В окончательной редакции
21 апреля 1989 г.