

Одномерные структуры, образованные низкотемпературным скольжением дислокаций — источники дислокационного поглощения и излучения в полупроводниковых кристаллах $A^{IV}B^{VI}$

© Н.И. Тарбаев, Г.А. Шепельский

Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины,
252650 Киев, Украина

(Получена 28 июля 1997 г. Принята к печати 17 ноября 1997 г.)

Приведены и проанализированы результаты измерений характерных узких линий оптического поглощения и излучения, вызванных низкотемпературным (при температурах $T = 1.8 \div 77$ К) скольжением дислокаций в кристаллах сульфида кадмия. Линии оптического поглощения характеризуются гигантскими силами осцилляторов ($f \sim 1$). Предложена и обоснована модель, объясняющая всю совокупность экспериментальных результатов для сульфида кадмия и других соединений $A^{IV}B^{VI}$. В предложенной модели дислокационное оптическое поглощение и дислокационное излучение связываются с образованием одномерных цепочек ассоциаций точечных дефектов при скольжении винтовых дислокаций со ступеньками. Из данных эксперимента рассчитаны линейная плотность ступенек и объемная плотность точечных дефектов в цепочках, а также оценены силы осцилляторов соответствующих оптических переходов.

Ранее было показано, что в результате низкотемпературного (при температурах $T = 1.8 \div 77$ К) движения и генерации дислокаций в кристаллах сульфида кадмия в спектрах красовой фотолюминесценции (ФЛ) возникают характерные линии излучения [1–3]. Эти линии впоследствии получили название дислокационного излучения (ДИ). ДИ состоит из группы линий малой ширины, расположенных вблизи края фундаментального поглощения. ДИ разгорается по мере роста степени пластической деформации и уже при достаточно небольшой остаточной деформации может доминировать в спектре излучения CdS. Другой характерной чертой ДИ оказался "низкотемпературный" отжиг: после выдержки кристалла при комнатной температуре уже в течение нескольких часов линии ДИ практически исчезают из спектра ФЛ, хотя, например, при 77 К они сохраняются неограниченно долго. Таким образом, электронные состояния, связанные с ДИ, следует считать метастабильными.

ДИ оказалось характерным и для кристаллов других полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ — CdTe, CdSe. Сама возможность движения и генерации дислокаций в кристаллах полупроводниковых соединений $A^{IV}B^{VI}$ практически при сколь угодно низких температурах, по крайней мере до $T = 1.8$ К, (низкотемпературная пластическая деформация — НТПД) впервые была доказана в [2]. Обнаружение НТПД дало возможность и впоследствии использовалось для наблюдения *in situ* элементарных процессов пластического течения кристаллов сульфида кадмия [4–6]. До этого дислокации вводились в полупроводниковые кристаллы, как правило, лишь при температурах значительно выше 300 К. Последнее обосновывалось наличием высоких барьеров Пайерлса, препятствующих движению дислокаций в периодическом потенциале кристаллической решетки. Обнаружение НТПД оказалось возможным благодаря исключительно высокой чувствительности метода ФЛ в применении к регистрации начала и развития пластической деформации.

Обнаружение явления НТПД позволило установить несколько важных, на наш взгляд, особенностей. Оказалось, что, несмотря на очень малую степень макроскопической пластической деформации при низкой температуре ($\varepsilon \leq 10^{-4}$), она приводит к качественной трансформации оптических, фотоэлектрических и излучательных свойств кристаллов. Это свидетельствует о чрезвычайно высокой электрической и оптической активности вводимых при движении дислокаций электронных состояний.

Как известно, движение дислокаций в кристаллической решетке вызывает генерацию точечных дефектов. При высокой температуре интенсивное взаимодействие дислокаций и образованных дислокациями точечных дефектов происходит уже в процессе пластической деформации. Это не позволяет разделить вклады собственно дислокаций и точечных дефектов в изменение физических свойств кристаллов. Очевидно, что максимальное понижение температуры пластической деформации приводит к подавлению термоактивационных механизмов взаимодействия дислокаций и точечных дефектов и дает "замороженную", или первичную картину результатов дефектообразования в кристаллах при движении дислокаций.

Здесь можно сделать также важное методическое замечание. При НТПД появляется редкая возможность непосредственно во время низкотемпературного эксперимента контролируемо изменять концентрацию вводимых деформационных дефектов, а также визуально наблюдать движение и генерацию дислокаций. Возможность наблюдения обеспечивается наличием интенсивного ДИ в спектрах ФЛ и катодолюминесценции [3].

Что касается природы так называемых дислокационных состояний, ответственных за ДИ, то здесь по мере накопления новых данных возникали различные точки зрения. Недавно появились работы [5,7], авторы которых на основании исследования ДИ в CdS с помощью метода пространственно разрешенной спектроскопии делают

заклучение об участии электронных состояний непосредственно дислокаций в переходах, соответствующих ДИ. Согласно выводам [7], излучательные переходы происходят через электронные состояния, локализованные в ядрах винтовых дислокаций. Варианты участия в дислокационном излучении точечных дефектов, расположенных либо в следах движения дислокаций, либо даже непосредственно вокруг дислокаций, авторами [7] исключаются.

Здесь уместно подчеркнуть, что авторы названных работ сосредоточили свое внимание исключительно на исследовании ДИ. При этом игнорировался тот факт, что дислокационные состояния, вводимые при низких температурах, помимо ДИ вызывают радикальные изменения и в спектрах оптического поглощения (ОП), спектрах возбуждения ФЛ и спектрах фотопроводимости (ФП). Особого внимания, на наш взгляд, требует интерпретация спектров оптического поглощения, индуцированного НТПД и состоящего из группы узких линий с очень большим коэффициентом поглощения α в них (α может превышать 10^2 см^{-1}). Последнее свидетельствует о большой силе осцилляторов соответствующих оптических переходов. Таким образом, общая картина дефектообразования при движении дислокаций оказывается гораздо более сложной в сравнении с той, которую могут дать только лишь особенности ДИ. Интерпретация природы рассматриваемых дислокационных состояний требует, разумеется, учета всех явлений, которые возникают в результате НТПД. Отметим, что регистрируемые линии ДИ и ОП не имеют аналогов в исходных кристаллах $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ и ранее не наблюдались. Кроме того, они не появляются и после пластической деформации, осуществленной при высоких температурах ($T > 300 \text{ К}$). Наконец, указанные оптические линии не обнаруживаются после введения в кристалл, в том числе при низких температурах ($T < 78 \text{ К}$), собственных точечных дефектов, например, посредством облучения высокоэнергетичными частицами. В последнем случае распределение дефектов может быть равномерным по объему, однако остается хаотическим.

В настоящей работе помимо спектров ДИ приводятся и анализируются результаты измерений дислокационного ОП, спектров возбуждения ДИ и ФП, а также температурного гашения ДИ. На основании приведенных данных делается вывод о том, что лишь с помощью модели одномерных цепочек, состоящих из ассоциатов точечных дефектов, образованных движущимися дислокациями, наиболее полно и не противоречиво можно объяснить всю совокупность экспериментальных данных.

Исследовались высокоомные, специально не легированные объемные монокристаллы CdS , а также CdSe , CdTe . Образцы изготавливались в виде прямоугольных параллелепипедов, грани которых ориентировались рентгенографически. Образцы вместе с устройством для одноосной деформации помещались в гелиевый оптический криостат. Экспериментальные методы и установки

для спектроскопических измерений ФЛ, ОП, ФП описаны в предыдущих статьях [8,9]. Ориентация граней образцов позволяла осуществлять пластическую деформацию по призматической или по смешанной системам скольжения. Измерения оптического пропускания вдоль или нормально оси C кристалла проводились с помощью широкого луча, охватывающего значительный объем образца и, таким образом, также значительное число полос скольжения дислокаций. Благодаря этому можно говорить о некоторой усредненной величине коэффициента оптического поглощения α , хотя процесс развития пластического течения в кристалле происходит принципиально неоднородно. Определение таким образом α дает заниженные значения, что следует учитывать в дальнейшем при оценке плотности дислокационных дефектов. Возбуждение ФЛ проводилось излучением гелий-кадмиевого лазера с длиной волны 441.6 нм , мощностью до 5 мВт . Для снятия спектров возбуждения ДИ использовался монохроматор ДМР-4 с источником излучения — ксеноновой лампой ДКСШ-150. Плотность выходов дислокаций на грань $(0001) N_d$ определялась по числу ямок травления по методике [10].

Данные, представленные на рис. 1, соответствуют деформированию образца CdS при одноосном сжатии вдоль направления $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ при $T = 4.2 \text{ К}$. Регистрация спектров ФЛ, ОП, возбуждения ФЛ осуществлялась в направлении кристаллографической оси C . Спектральное распределение ДИ в кристаллах сульфида кадмия (рис. 1, *a*) практически без фона удается получить благодаря селективному возбуждению в характерных линиях, имеющих место в спектре возбуждения ДИ (рис. 1, *b*). Эти линии обнаруживаются в области примесного поглощения. При этом число линий ДИ, их спектральное положение и соотношение интенсивностей не зависит от плотности мощности возбуждающего излучения. Весь спектр ДИ может быть получен при возбуждении ФЛ излучением, соответствующим любой из линий в спектре возбуждения.

ДИ на рис. 1, *a* при $T = 4.2 \text{ К}$ состоит из ряда характерных полос излучения, которые мы будем именовать дислокационными полосами. В дальнейшем будем рассматривать три наиболее отчетливые и интенсивные полосы, которые для краткости обозначим I, II, III с энергиями 2.447 , 2.440 и 2.435 эВ соответственно. С повышением температуры происходит гашение полос II и III. При этом полоса II практически исчезает уже при $T = 20 \text{ К}$ а полоса III гасится вблизи $T = 40 \text{ К}$. Интенсивность наиболее коротковолновой полосы I в диапазоне $4.2 \div 40 \text{ К}$ практически не изменяется. Затем по мере повышения температуры интенсивность начинает уменьшаться, и только при $T = 140 \div 150 \text{ К}$ полоса I становится практически незаметной в спектре ФЛ. Отметим, что полуширина дислокационных полос в диапазоне температур $1.8 \div 100 \text{ К}$ оказывается порядка kT и близка к полуширине линий излучения связанных экситонов.

Во всем исследуемом температурном диапазоне дислокационные полосы сопровождаются отчетливой

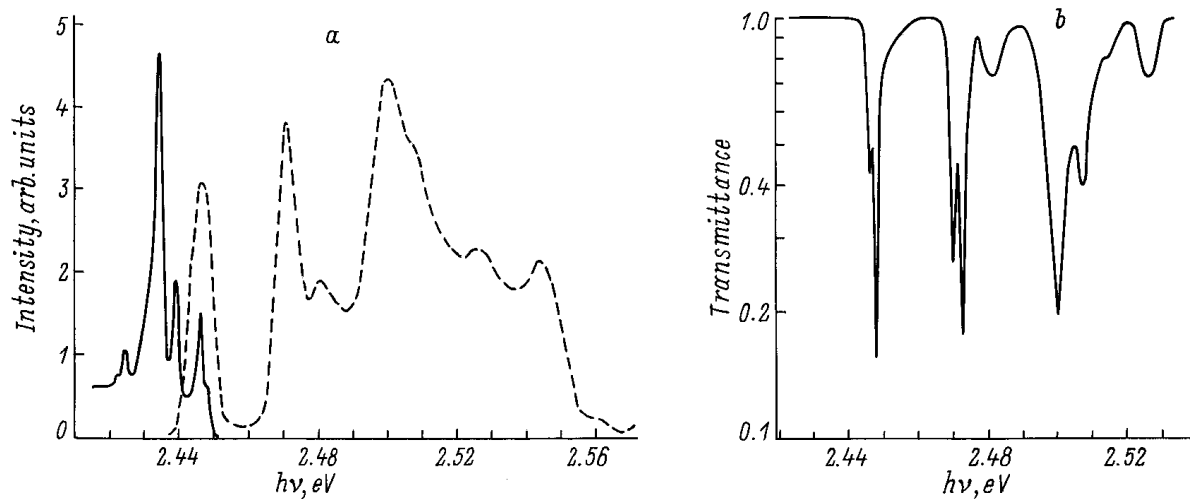


Рис. 1. Спектры ДИ (*a*, сплошная линия), возбуждения ДИ (*a*, штриховая линия) и оптического пропускания (*b*) в результате НТПД кристаллов сульфида кадмия.

ЛО-фононной структурой. При этом фактор электрон-фононной связи для всех дислокационных полос оказывается очень близким и составляет величину ~ 0.1 . Последнее обстоятельство может свидетельствовать о том, что излучательные переходы всех трех типов происходят на одно и то же конечное состояние, вероятно, акцепторного типа. Действительно, значительные величины фактора электрон-фононной связи в CdS обнаруживались лишь при оптических переходах на акцептор из-за большой эффективной массы дырки [11].

Таким образом, если исходить только из данных ФЛ, то интерпретация излучательных переходов в ДИ не встречает особых затруднений. Действительно, дислокационные полосы II и III следовало бы приписать излучательным переходам с уровней мелких доноров, а полосу I из зоны свободных энергий на одно и то же акцепторное состояние. Это предположение хорошо согласуется с наличием тонкой структуры — дублетности всех трех полос. Перераспределение интенсивности линий в дублете в пользу более низкоэнергетичной компоненты свидетельствует о постепенном заполнении дырками верхнего из дублетных уровней акцептора при понижении температуры.

Как видно из данных рис. 1, спектральные положения полос в ОП полностью совпадают с положениями полос в спектрах возбуждения ДИ. Такое детальное совпадение линий поглощения и линий в спектрах возбуждения ДИ означает, что линии ОП и ДИ соответствуют оптическим переходам между электронными состояниями в одной и той же системе энергетических уровней. Отметим также, что все описанные особенности ОП и спектров возбуждения ДИ возникают одновременно с линиями ДИ в результате НТПД и одновременно с последними исчезают в результате описанного выше низкотемпературного (при температурах $\lesssim 300$ К) отжига.

В спектральном распределении ФП в результате НТПД также появляются узкие полосы, при этом новые максимумы возбуждения фототока совпадают по энергетическому положению с максимумами спектра возбуждения ДИ. Полосы ФП сохраняются вплоть до самых низких в эксперименте температур — 1.8 К. Это означает, что в каждой из полос дислокационного поглощения имеет место внутренний фотоэффект электронного типа, поскольку в CdS фототок определяется основными носителями тока — электронами. Фотоэффект может быть вызван либо непосредственно переходами электронов в зону, либо переходами в сопровождении оже-процесса, в результате которого появляются свободные электроны.

Следует отметить, что описанные изменения в спектрах качественно не зависят от направления наблюдения. В образцах, ориентированных для смешанного скольжения, индуцированные одноосным сжатием полосы в спектрах не проявляли качественного своеобразия, за исключением значительно меньшей интенсивности и большей размытости. Последнее обстоятельство свидетельствует о том, что дислокации, скользящие в базисной плоскости, способствуют лишь уширению полос своими упругими полями.

Из пьезооптических исследований полосы ДИ I и соответствующей ей полосы ОП были определены степень ориентационного вырождения (6-кратное) и симметрия электронных состояний, ответственных за ДИ — C_3 [12].

Полученные нами количественные данные по оптическому поглощению $\alpha(\nu)$ дают возможность сделать оценки средней плотности генерируемых НТПД оптически активных центров N с помощью известной формулы [13]

$$fN = \frac{ncm}{\pi e^2 \hbar} \int \alpha(\nu) d\nu; \quad (1)$$

где f — сила осциллятора, N — концентрация осцилляторов, ν — частота, n — коэффициент преломления,

c — скорость света в вакууме, e и m — заряд и масса электрона, $\hbar = h/2\pi$ — постоянная Планка. Подставляя численные значения величин, получаем

$$fN \simeq 1.13 \cdot 10^{12} n \int \alpha(\nu) d\nu \quad (2)$$

(здесь α измеряется в см^{-1} , N в см^{-3}). Для полученных из нашего эксперимента значений α имеем $fN = 2 \cdot 10^{15} \text{см}^{-3}$. В работе [14] спектр люминесценции локально пластически деформированных при $T > 300 \text{ К}$ областей кристалла объяснялся излучательной рекомбинацией электронов и дырок непосредственно на дислокациях. Однако даже если принять, что число состояний (осцилляторов) в расчете на единицу длины дислокации равно числу атомов с нарушенной координацией химических связей в дислокационном ядре, $\sim 10^7 \text{см}^{-1}$, то для объяснения наблюдаемой в нашем эксперименте большой величины оптического поглощения потребовалась бы сила осциллятора оптического перехода $f \sim 10^3$. Оценка сделана для средней плотности дислокаций на грани (0001) деформированного кристалла $N_d = 10^5 \text{см}^{-2}$, чему соответствовало поглощение $\alpha = 10 \text{см}^{-1}$. Между тем в полупроводниках уже величина $f \sim 10$ считается гигантской, обнаруживается только у экситонно-примесных комплексов и требует специального теоретического обоснования [15].

В работе [16] установлено преобладание винтовой компоненты у дислокаций в CdS, скользящих по призматической системе, что увеличивает фактическую длину дислокации в расчете на каждую наблюдаемую ямку травления в плоскости (0001). Как можно судить из приведенной в работе [16] конфигурации дислокаций в единичной полосе скольжения по призматической плоскости типа $\{1\bar{1}00\}$, длина дислокации (и количество электронных состояний, соответственно) за счет изломов увеличена в расчете на одну ямку травления, но практически не более чем в $3 \div 4$ раза. Это, даже если пренебречь вероятными различиями в энергетическом спектре электронных состояний краевых и винтовых участков дислокации, не устраняет принципиальных количественных расхождений "ядерной" модели с данными оптического эксперимента.

Из приведенной оценки следует, что ни одна из моделей электронных состояний, ответственных за ДИ, которая связывается непосредственно с ядром дислокации, не может объяснить наблюдаемые нами большие величины коэффициента поглощения.

В работах [6] ДИ приписывается непосредственно ядрам винтовых дислокаций системы скольжения $\langle \bar{2}110 \rangle \{01\bar{1}0\}$ на основании того, что авторы наблюдают разбегающиеся со временем светящиеся пятна на гранях образца, перпендикулярных базисной плоскости. Эти пятна однозначно интерпретируются как движущиеся следы винтовых дислокаций. Однако, на наш взгляд, однозначности здесь нет, если учесть наблюдаемое экспериментально быстрое гашение интенсивности ДИ возбуждающим светом при уровнях оптического возбуждения

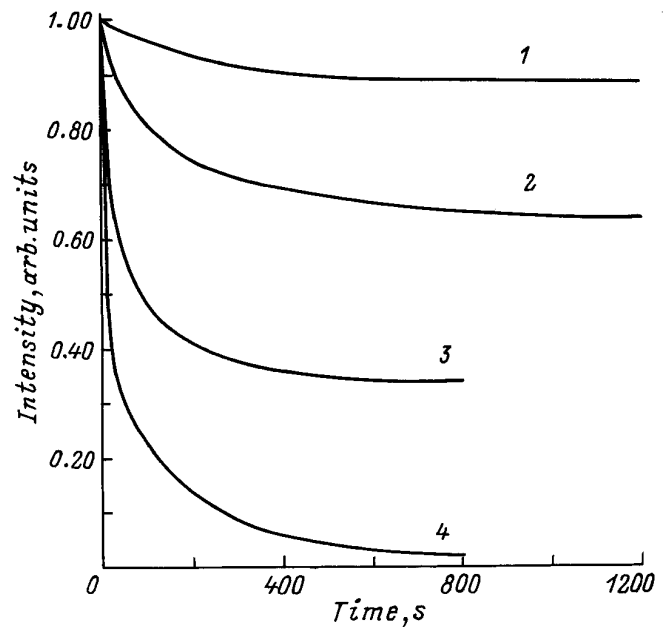


Рис. 2. Кинетические зависимости "выгорания" ДИ в зависимости от температуры T , К: 1 — 4.2, 2 — 77, 3 — 98, 4 — 135.

сравнительно небольшой интенсивности (50 Вт/см^2). На рис. 2 представлены кинетические зависимости интенсивности ДИ при различных значениях температуры. Можно выделить два участка на этих кривых: участок быстрого спада и участок относительно стабильной интенсивности ДИ. Видно, что с ростом температуры увеличивается как скорость начального спада, так и его амплитуда, причем амплитуда спада резко и нелинейно растет с увеличением интенсивности возбуждения. В работах [4,6,7] использовались значительные интенсивности возбуждения, до $2 \cdot 10^2 \text{ Вт/см}^2$, что должно было приводить к сильному гашению ДИ в промежутке между расходящимися винтовыми дислокациями. При этом, по-видимому, выявлялись только еще не погашенные участки в непосредственной близости от движущихся дислокаций. Таким образом, учитывая ограниченное пространственное разрешение и подавление фона при обработке электронного телевизионного сигнала, вместо светящейся непрерывной полоски между двумя расходящимися винтовыми дислокациями при 77 К в [6] наблюдались только ее концы. На этом основании источниками ДИ считались исключительно области ядер дислокаций. Наше предположение подтверждается также тем, что при температуре 4.2 К, когда "выжигание" ДИ слабое, авторы [6] видят именно удлиняющуюся непрерывную светящуюся полосу. Таким образом, выводы настоящей работы не противоречат экспериментальным данным микролюминесцентного анализа работы [6].

С другой стороны, при пластической деформации помимо линейных дефектов образуется значительное количество точечных дефектов. В работе [6] прямыми наблюдениями показано, что именно винтовые дислока-

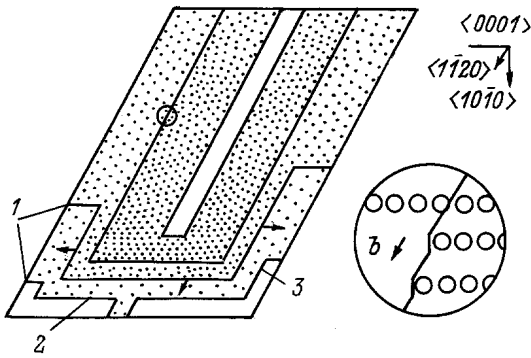


Рис. 3. Схема образования дефектов при пластической деформации по системе $\langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}00\}$ за счет скольжения винтовых дислокаций со ступеньками (см. увеличенный фрагмент) при сжатии вдоль $[10\bar{1}0]$. 1 — выходы скользящих дислокаций на грань $\langle 0001 \rangle$; 2, 3 — краевые и винтовые сегменты дислокационных петель соответственно. Изменение густоты точек условно отражает прирост средней плотности ассоциатов точечных дефектов после прохождения очередного винтового сегмента. Стрелки указывают направления движения дислокаций.

ции, скользящие в плоскости $\{10\bar{1}0\}$, порождают дислокационную ФЛ. При этом источники дислокационного свечения генерируются непосредственно при перемещении винтовых дислокаций. Это, по нашему мнению, свидетельствует о непричастности механизма образования дефектов путем рекомбинации однотипных дислокаций с противоположно направленными векторами Бюргерса, скользящими в смежных плоскостях скольжения. Вместе с тем хорошо известен механизм образования точечных дефектов при движении именно винтовых дислокаций со ступеньками (см., например, [17]). При деформации по призматической системе скольжения винтовые сегменты скользят в параллельных плоскостях типа $\{1\bar{1}00\}$, а ступеньки с краевой составляющей — переползают. Поскольку диффузией при низких температурах можно пренебречь, ступеньки порождают либо межузельные атомы, либо вакансии. Ступенька при своем движении образует непрерывную цепочку дефектов (рис. 3), которая может прерываться только в случаях, когда ступенька сдвигается вдоль винтовой дислокации консервативно, например, при огибании закрепленного квазиодномерного дефекта.

Можно попытаться рассмотреть, что же представляет собой структурно такая цепочка вакансий. Ступенька интересующей нас винтовой дислокации может быть сегментом дислокации одного из трех типов. Это может быть, согласно [18], 90-градусная (краевая), смешанная 60- либо 30-градусная дислокация.

Для определенности можно рассмотреть случай, когда генерируются вакансии. На рис. 4 условно, без учета ширины дислокаций, показаны конфигурации всех трех видов ступенек, нанесенные на решетку вюрцита в базисной плоскости. Обозначены контуры сечения полости, которая образовалась бы в континууме. Полость имела

бы форму призмы с образующими b и l , где l — единственный участок длины соответствующей ступеньки. Однако, учитывая дискретность кристалла, "полость" будет иметь вид цепочки вакансий типа $V_{Cd} - V_S - V_{Cd} - V_S - \dots$ и т.д., образующей одномерную структуру (рис. 5). При этом на каждый элементарный акт переползания единичной 60- или 30-градусной ступеньки будет образовываться по две пары вакансий. Переползание ступеньки 90-градусной (краевой) дислокации должно создавать "полость" вдвое большего объема и породить по 4 пары вакансий: $2(V_{Cd} - V_S)$ на каждый шаг. Из элементарных энергетических соображений можно заключить, что движение 90-градусной ступеньки будет затруднено. Поэтому есть основания предполагать, что единичные ступеньки 30- и 60-градусной дислокаций являются наиболее вероятным источником точечных дефектов при рассматриваемой пластической деформации.

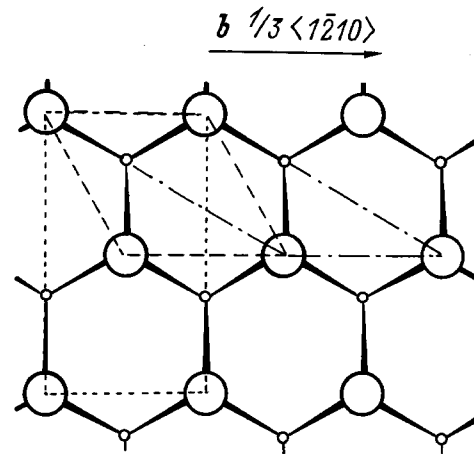


Рис. 4. Решетка вюрцита со стороны базисной плоскости и возможные конфигурации полостей в континууме, образованных различными ступеньками винтовой дислокации: точечная, штриховая и штрихпунктирная линии — 90-, 60- и 30-градусная дислокации соответственно.

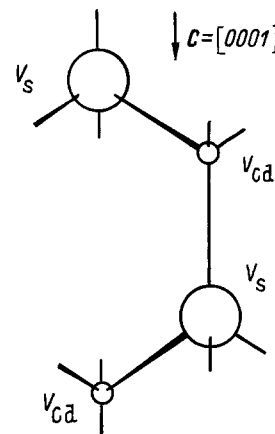


Рис. 5. Схема ассоциата собственных точечных дефектов (периода одномерной цепочки), образуемого при скольжении винтовой дислокации со ступеньками по системе $\langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}00\}$.

Симметрия каждой отдельной пары вакансий $V_{Cd} - V_{Cd}$ относится к группе C_s , т.е. имеется ось 1-го порядка, расположенная под углом к оси (0001), и плоскость зеркального отражения $\{1\bar{2}10\}$. Наиболее симметричная конфигурация цепочки в целом может иметь плоскость отражения $\{1\bar{2}10\}$, причем только в том случае, когда оси каждой очередной пары вакансий ($V_{Cd} - V_S$), рождаемой в результате чистого переползания ступеньки, располагаются в одной плоскости. Такая конфигурация будет, по-видимому, энергетически выгодной, так как отвечает образованию минимального дипольного момента цепочки (тип связи в CdS — частично ионный). Цепочки, лежащие целиком в одной плоскости, будут трехкратно ориентационно вырожденными. В случае образования межузельных атомов отличие заключается в том, что в области ступеньки происходит вытеснение пар атомов Cd и S из узловых позиций в межузельные.

Таким образом, коллективные электронные состояния рассматриваемых цепочек дефектов как целого не могут обеспечить более высокую степень ориентационного вырождения полос, наблюдаемых как в поглощении [12], так и в излучении [12,7] в резонансной дислокационной полосе. В то же время симметрия отдельной пары вакансий ($V_{Cd} - V_{Cd}$) и степень пространственного вырождения совпадают с симметрией электронных состояний, ответственных за ДИ.

На рис. 3 схематически представлен механизм образования цепочек собственных точечных дефектов движущимися винтовыми дислокациями со ступеньками. Цепочечная структура показана только на увеличенном фрагменте.

Примечание к схеме. Считаем, что: 1) число раскрывшихся полупетель равно числу ямок травления в полосах скольжения; 2) петля первоначально прорастает на всю длину плоскости скольжения за счет движения краевого сегмента; 3) среднее значение линейной плотности ступенек вдоль винтовых сегментов — N_d .

Тогда число N состояний дефектов, собранных в цепочки для образца толщиной в 1 см, может быть рассчитано следующим образом:

$$N[\text{см}^{-3}] = 0.5N_dN_j \cdot 10^7, \quad (3)$$

где 10^7 см^{-1} — линейная плотность точечных дефектов (число периодов комплексов дефектов на 1 см длины); 0.5 — коэффициент, усредняющий вклад в генерацию точечных дефектов первых полупетель, которые пересекли практически весь образец, и последних, вклад которых в генерацию цепочек дефектов мал.

Величину, полученную из (3), нужно приравнять величине N , получаемой экспериментально из данных по оптическому поглощению, оцененному из соотношения (2) — $N[\text{см}^{-3}] = 2 \cdot 10^{14}f$. Откуда

$$N_j = 4 \cdot 10^7 / (N_d f). \quad (4)$$

Беря значение N_d , равное средней плотности дислокаций в плоскостях скольжения на см^2 , $2 \cdot 10^5$, получаем

соотношение, связывающее N_j и f :

$$N_j[\text{см}^{-1}] = (1/f)2 \cdot 10^2. \quad (5)$$

Здесь представляется возможность оценить среднюю линейную плотность ступенек на винтовом сегменте на основании (4), сделав предварительно некоторое разумное допущение о силе осциллятора f оптических переходов. Как известно, максимальная сила осцилляторов наблюдается у оптических переходов, соответствующих связанным экситонам, и находится для кристаллов $A^{II}B^{VI}$ в пределах от 1 до 10 [19]. В нашем случае, исходя из спектрального расположения линий, следует учесть значительную локализацию экситонов. Поэтому следует выбрать нижнюю границу этой величины $f = 1$. Отсюда получаем значение $N_j = 2 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$ — оценку N_j снизу.

С другой стороны, представляется возможность оценить N_j сверху. В [20] предложено оценивать напряжение торможения дислокаций t_d единичными ступеньками плотностью N_j , вызываемое их неконсервативным перемещением, с помощью соотношения

$$t_d = (N_j W) / b^2, \quad (6)$$

где W — энергия образования точечного дефекта, \mathbf{b} — вектор Бюргерса. Будем исходить из предположения, что механизм скольжения винтовых дислокаций со ступеньками, перемещающимися неконсервативно и генерирующими дефекты, ответственные за ДИ, является именно тем механизмом, который контролирует скольжение дислокаций в кристаллах при данной температуре. Используя формулу (6), можно оценить, начиная с какой величины N_j пластическое течение кристалла будет контролироваться скольжением винтовых дислокаций со ступеньками: $N_j = t_d b^2 / W$. В качестве t_d возьмем полученную из эксперимента среднюю величину порогового напряжения пластической деформации t_{thr} для $T = 77 \text{ К}$: $t_d = (1/2)t_{thr} = 0.5 \cdot 10^5 \text{ кг/м}^2$ (коэффициент 1/2 учитывает наклон плоскости скольжения по отношению к оси сжатия [1120]). В качестве энергии образования точечного дефекта примем сумму энергий образования двух пар изолированных вакансий, взятых из [21]: $W = 2[W(V_{Cd}) + W(V_S)] = 2(3.5 + 2) \text{ эВ} = 11 \text{ эВ}$. Эта величина заведомо завышена, так как не учитывает взаимодействия близко расположенных дефектов. Для CdS $b = 0.414 \cdot 10^{-8} \text{ м}$.

Итак, $N_j = t_d b^2 / W = 4.8 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$. Это — ограничение сверху для N_j . Для этого значения N_j следует брать, исходя из (5), меньшую силу осциллятора оптического перехода, а именно $f = 0.1$. Таким образом, мы установили, что N_d лежит в пределах $2 \cdot 10^2 \div 4.8 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$. Отсюда следует (см. (4)), что средняя объемная плотность точечных дефектов, расположенных в цепочках, находится в пределах $2 \cdot 10^{15} \div 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, что представляется вполне реальной величиной.

Исходя из вышесказанного, предлагается следующая модель электронных переходов, объясняющая совокупность особенностей спектров поглощения и излучения

кристаллов сульфид кадмия, деформированных пластически при низкой температуре. Переход, ответственный за наиболее длинноволновую полосу оптического поглощения и коротковолновую полосу ФЛ соответствует возбуждению экситонов, связанных на квазиодномерной структуре вакансионного (межузельного) типа, образованной при движении ступенек на винтовых дислокациях. Поскольку экситоны локализованы на некоторой квазиодномерной структуре, экситонный уровень должен быть размыт в зону в связи с перекрытием волновых функций связанных экситонных состояний вдоль цепочки. Остальные полосы ОП — поглощение возбужденными состояниями той же системы. Причем в последнем случае возбуждение распространяется вдоль цепочки дефектов и быстро релаксирует до основного состояния, поэтому и не проявляется в излучении.

Таким образом, большие силы осцилляторов f объясняются внутрицепочечным резонансным взаимодействием. Здесь представляется уместной аналогия с молекулярными кристаллами, у которых молекулы уложены в одномерные ориентированные цепочки. Матричный элемент внутрицепочечного взаимодействия в таких кристаллах по крайней мере на 2 порядка превышает матричный элемент межцепочечного взаимодействия. Длинноволновые полосы ДИ II и III, для которых не наблюдается резонансного поглощения, — излучение, связанное с некоторыми нарушениями трансляционной симметрии цепочек собственного или примесного происхождения, возбуждаемое через упомянутые "зоны одномерных связанных экситонов". Из-за малой энергии связи цепочечная структура оказывается нестабильной. Поэтому низкая температура является тем необходимым фактором, который препятствует распаду структур. Указанная модель может быть применима и для других соединений $A^{II}B^{VI}$, исходя из аналогии ДИ в них.

В пользу существования одномерных структур и связанных с ними узких зон свободной энергии свидетельствуют и важные дополнительные экспериментальные факты. Так, в результате НТПД возникает заметная анизотропия в величине продольного и поперечного фототока по отношению к предполагаемой ориентации цепочек: отношение $I_{||}/I_{\perp}$ достигает 10. Кроме того, подвижность носителей тока, оцененная из измерений ФП в дислокационных полосах ОП, имеет значение $\mu \approx 5 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Это по крайней мере на порядок превышает подвижность электронов зоны проводимости сульфида кадмия.

Заключение

Низкотемпературное (в интервале $1.8 \div 77 \text{ К}$) движение дислокаций приводит к появлению в оптических и излучательных спектрах кристаллов $A^{II}B^{VI}$ характерных узких линий, которые не имеют аналогов ни в исходных кристаллах, ни в кристаллах, подвергнутых любому другому виду обработки. Оптические переходы

характеризуются гигантскими силами осцилляторов, а соответствующие электронные состояния оказываются метастабильными. На основании экспериментальных результатов и количественных оценок предложена модель дефектообразования скользящими винтовыми дислокациями со ступеньками, в рамках которой объясняются все особенности оптических и излучательных спектров кристаллов $A^{II}B^{VI}$, подвергнутых НТПД. Ступеньки образуют одномерные периодические электронные структуры, состоящие из ассоциатов собственных точечных дефектов кристаллической решетки. Именно низкая температура препятствует распаду ассоциатов и придает одномерным структурам стабильность. Гигантские силы осцилляторов оптических переходов объясняются интенсивным внутрицепочечным резонансным взаимодействием. Из данных эксперимента рассчитаны линейная плотность ступенек и объемная плотность точечных дефектов в цепочках, а также оценены силы осцилляторов соответствующих оптических переходов. Показана некорректность рассмотрения модели дефектообразования при НТПД без учета данных оптического поглощения.

Авторы выражают признательность Ф.Т. Васько за полезное обсуждение экспериментальных результатов.

В заключение авторы выражают благодарность Государственному фонду фундаментальных исследований при Министерстве науки Украины, при поддержке которого выполнялась настоящая работа.

Список литературы

- [1] В.Ф. Гринь, Е.В. Марков, Е.А. Сальков, Н.И. Тарбаев, Г.А. Шепельский. ФТТ, **20**, 2188 (1978).
- [2] Е.А. Сальков, Н.И. Тарбаев, Г.А. Шепельский. УФЖ, **26**, 1570 (1981).
- [3] N.I. Tarbaev, J. Schreiber, G.A. Shepelskii. Phys. St. Sol. (a), **110**, 97 (1988).
- [4] В.Д. Негрий, Ю.А. Осипьян. Письма ЖЭТФ, **35**, 484 (1982).
- [5] J. Appl. Phys., **74**, 7008 (1993).
- [6] V.D. Negry, Yu.A. Osipyanyan, N.V. Lomak. Phys. St. Sol. (a), **126**, 49 (1991).
- [7] В.Д. Негрий. ФТТ, **34**, 2462 (1992).
- [8] Е.А. Сальков, Н.И. Тарбаев, Г.А. Шепельский. ФТТ, **22**, 1110 (1980).
- [9] Е.А. Сальков, Н.И. Тарбаев, Г.А. Шепельский. ФТП, **14**, 1540 (1980).
- [10] Ю.А. Осипьян, И.С. Смирнова, Г.К. Струкова. ФиХОМ, **6**, 145 (1974).
- [11] I.I. Hopfield. Phys. Chem., **10**, 110 (1959).
- [12] Е.А. Сальков, Н.И. Тарбаев, Г.А. Шепельский. ФТП, **15**, 1467 (1981).
- [13] А.М. Стоунхэм. *Теория дефектов в твердых телах* (М., Мир, 1978) т. 1. [Пер. с англ.: А.М. Stoneham. *Theory of defects in solids* (Clarendon, Oxford, 1975)].
- [14] V.D. Negry, Yu.A. Osipyanyan. Phys. St. Sol. (a), **55**, 583 (1979).
- [15] Э.И. Рашба. ФТП, **8**, 1241 (1974).
- [16] Yu.A. Osipyanyan, V.F. Petrenko. G.K. Strukova, I.I. Khodos. Phys. St. Sol. (a), **57**, 477 (1980).

- [17] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций* (М., Атомиздат, 1972). [Пер. с англ.: J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of dislocations* (N.Y.–St.Louis–San Francisco–Toronto–London–Sydney, McGraw-Hill Book Company, 1968)].
- [18] Yu.A. Osipyan, I.S. Smironova. *Phys. St. Sol.*, **30**, 19 (1968).
- [19] D.G. Thomas, J.J. Hopfield. *Phys. Rev.*, **175**, 1021 (1968).
- [20] W.G. Johnson, J.J. Gilman. *J. Appl. Phys.*, **31**, 632 (1960).

Редактор Л.В. Шаронова

One-dimensional structures formed by low temperature dislocation slip as a source of dislocation absorption and dislocation emission in A^{II}B^{VI} semiconductor crystals

N.I. Tarbaev, G.A. Shepelskii

Institute of Semiconductor Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine,
252650 Kiev, Ukraine

Abstract The results of measurements of characteristic optic absorption and emission narrow lines caused by low temperature (1.8–77 K) dislocation slip in cadmium sulphide crystals have been presented and analyzed. The optic absorption lines are characterized by giant oscillator forces ($f \sim 1$). There has been proposed and substantiated a model which explains the complete set of experimental results for cadmium sulphide and for other A^{II}B^{VI} compounds, too. In the presented model the dislocation optic absorption as well as the dislocation emission have been related to a metastable one-dimensional point defect chain formation during the slip of jogged screw dislocations. Low temperature provides stability of such structures. From experimental data, both the linear jog density and the volume point defect density in chains have been calculated and the oscillator forces of relevant optic transitions have been evaluated.