Краткие сообщения

05

Автолокализация доменов температуры в полупроводниках с перестраиваемым спектром

© Ю.В. Гудыма

Черновицкий государственный университет имени Ю. Федьковича,
58012 Черновцы, Украина

(Поступило в Редакцию 4 октября 1999 г. В окончательной редакции 31 января 2000 г.)

Показано, что в полупроводниках с оптическим поглощением, модулируемым температурой, возможна макроскопическая автолокализация температурных доменов за счет деформационно-теплового взаимодействия. Описанное явление можно рассматривать как крупномасштабный аналог хорошо известных квантовых эффектов самозахвата.

1. При достаточно сильном электрон-фононном взаимодействии в кристаллах происходит автолокализация квазичастиц (электронов и экситонов) в состояния с размером масштаба постоянной решетки. Квазичастицы в таком случае называют поляронами малого радиуса, конденсонами, поляризующими или деформирующими экситонами [1]. Ниже мы показываем, что на поверхности полупроводников с перестраиваемым электронным спектром возможна макроскопическая автолокализация доменов температуры за счет деформационно-теплового взаимодействия. Данное явление при всем своеобразии является крупномасшабным аналогом известных квантовых эффектов самозахвата.

Этот вопрос тесным образом связан с образованием на поверхности твердых тел, облучаемых мощным лазерным светом, периодических структур [2]. Периодическая модуляция рельефа поверхности самопроизвольно возникает всякий раз, когда интенсивность лазерного источника превышает пороговое значение. Экспериментально наблюдались (в Si, Ge, GaAs, InSb) как необратимые решетки (оставшиеся после действия лазерного импульса), так и обратимые решетки, существующие только в течение длителености импульса. Формирование структур с нелинейной зависимостью проводимости за счет образования дефектов в p-CdTe, n-CdS, p-ZnTe, по-видимому, имеет похожую природу [3,4]. Образование периодических структур дефектов при лазерном воздействии на поверхность полупроводника изучалось в [5]. При локальном импульсном лазерном облучении исследовались профили квазистатических деформаций ангстремного масштаба [6].

2. Если флуктуации температуры T от средних значений модулируют ширину запрещенной зоны полупроводника

$$E_g^* = E_g(1 - bT), \tag{1}$$

где коэффициент

$$b = \frac{1}{E_g}\left|\frac{\partial E_g}{\partial T}\right|$$

характеризует скорость этого изменения, то коэффициент оптического поглощения

$$\alpha = \alpha_0 \left(\frac{\hbar\omega - E_g^*}{\hbar\omega - E_g}\right)^{1/2}. \tag{2}$$

Здесь $\alpha = \alpha_0$ при $T = 0$. Возникающие под действием света поперечные флуктуации температуры обусловливают появление дополнительных сил в уравнении колебаний упругой среды на поверхности (оптико-акустический эффект)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nu^2 \Delta u - \frac{K\beta}{\rho}\nabla T, \tag{3}$$

где u — вектор смещения среды; ν — скорость звука в среде; K — модуль всестороннего сжатия; β — коэффициент объемного расширения; ∇ и Δ — дифференциальные операторы, заданные в плоскости поверхности полупроводника.

Модуляция оптического поглощения в среде в свою очередь вызывает дополнительную модуляцию температуры T в соответствии с уравнением теплопроводности

$$\chi\Delta T - \frac{K\beta}{\rho}\nabla u + \frac{1}{\rho c_p}\left(\alpha P - \frac{H}{l}(T - T_0)\right) = 0, \tag{4}$$

где χ — температуропроводность среды, ρ — плотность вещества, c_p — удельная теплоемкость материала при постоянном давлении, P — плотность падающего излучения, H — коэффициент теплоотдачи, l — толщина пластины, T_0 — температура термостата.

Уравнение теплопроводности записано с учетом того, что распределение температуры поддерживается посредством непрерывного лазерного источника тепла постоянным во времени. Уравнению (4) удобно придать вид

$$\chi\Delta T - \frac{K\beta}{\rho}\nabla u + \frac{\alpha P}{\rho c_p} - \frac{T - T_0}{\tau} = 0, \tag{5}$$

где τ — время релаксации температуры.

В безразмерных переменных $r' = \alpha_0 r$, $t' = \alpha_0 \nu t$, $u' = \alpha_0 u$, $T' = bT$ уравнения (3) и (5) имеют вид

$$\frac{\partial^2 u'}{\partial t'^2} = \Delta u' - \frac{K\beta}{\nu^2 \rho b}\nabla T'. \tag{6}$$

$$\Delta T' - \frac{K\beta}{\nu^2 b\rho}\nabla u' + \frac{\alpha b P}{\chi\rho c_p \alpha_0^2} - \frac{T' - T_0'}{\alpha_0^2 \tau\chi} = 0. \tag{7}$$

Для удобства в дальнейшем в формулах штрих будем опускать. Уравнениям (6), (7) соответствует экстремальное действие

$$S = \iint \left\{ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2}(\nabla u)^2 - \frac{K\beta}{\nu^2\rho b} u\nabla T + \frac{1}{2}(\nabla T)^2 - \frac{(T-T_0)^2}{2\alpha_0^2\chi\tau} - \frac{2}{3}\frac{bP}{\alpha_0\chi\rho c_p}\frac{(\hbar\omega - E_g + E_g T)^{3/2}}{E_g(\hbar\omega - E_g)^{1/2}} \right\} dr dt. \tag{8}$$

Уравнения Эйлера в безразмерных переменных следуют из минимизации $S = \iint F(T, u) dr dt$ по T и u

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) - \Delta u + \frac{K\beta}{\nu^2\rho b}\nabla T = 0, \tag{9}$$

$$\nabla j + \frac{bP}{\chi\rho c_p}\frac{\alpha}{\alpha_0^2} - \frac{1}{\alpha_0^2\chi\tau}(T - T_0) = 0, \tag{10}$$

где ток

$$j = j_\tau + j_u = \nabla T - \frac{K\beta}{\nu^2\rho b}u. \tag{11}$$

Учет самодействия в (10) приводит к тому, что ток оказывается функционально зависящим от колебаний решетки. В итоге уравнение становится нелинейным.

Чтобы воспользоваться полевой теорией, введем мнимое время $\tau = it$ и перейдем к мнимому действию $S \to iS$. Безразмерная плотность лагранжиана в таком случае имеет вид

$$L = \frac{1}{2}\int \left(\frac{\partial u}{\partial \tau}\right)^2 dr + \frac{1}{2}\int (\mathrm{div} u)^2 dr + \min\nolimits_T \int \left\{ \frac{K\beta}{\nu^2\rho b} u\nabla T - \frac{1}{2}(\nabla T)^2 - \frac{(T-T_0)}{2\alpha_0^2\chi\tau} + \frac{2}{3}\frac{bP}{\alpha_0\chi\rho c_p}\frac{(h\omega - E_g + E_g T)^{3/2}}{E_g(\hbar\omega - E_g)^{1/2}} \right\} dr, \tag{12}$$

а закон сохранения энергии

$$E = \frac{1}{2}\int \left(\frac{\partial u}{\partial \tau}\right)^2 dr + U(u, T). \tag{13}$$

В лагранжиан колебательные переменные входят только квадратично и линейно, поэтому по колебательным модам задача может быть решена точно и эти перменные могут быть исключены. После этого задача сводится к варьированию действия, зависящего исключительно от $T(r, \tau)$. Это мы и покажем ниже.

3. Нас интересуют те из траекторий с энергией $E = 0$ (на линии локализации), которые при $\tau = -\infty$ начинаются в точке $u = 0$ и кончаются при $\tau = 0$ на поверхности $U(u, T) = 0$. Из закона сохранения энергии $E = 0$ следует, что в конечной точке траектории $\partial u / \partial \tau = 0$ (локализованные состояния). Таким образом, описанная макроскопическая задача формально аналогична проблеме туннельного преодоления автолокализованного барьера в квантовом случае [1]. Минимизация L по u дает уравнение Эйлера

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \tau^2} + \Delta u - \frac{K\beta}{\nu^2\rho b}\nabla T = 0, \tag{14}$$

которое должно решаться при условиях

$$u\Big|_{r=-\infty} = 0, \qquad \frac{du}{d\tau}\Big|_{\tau=0} = 0. \tag{15}$$

Решение, удовлетворяющее условиям (15), имеет вид

$$u = \nabla \int G(\tau - \tau'.r - r')\frac{K\beta}{\nu^2\rho b} T dr' d\tau', \tag{16}$$

где функция Грина

$$G(r, \tau) = \int e^{i[\omega(\tau-\tau') - k(r-r')]}\frac{1}{k^2 + \omega^2}\frac{dk}{(2\pi)^3}\frac{d\omega}{2\pi}, \tag{17}$$

функция $T(r, \tau)$ четным образом продолжена в область $\tau > 0$.

Подставим (16) в (12), и, используя представление δ-функции, получим плотность лагранжиана

$$L = \frac{1}{2}\min\nolimits_T \int \left\{ \left(\frac{K\beta}{\nu^2\rho b}\right)^2 \nabla T \nabla \int_{-\infty}^{+\infty} G(r - r', \tau - \tau') \times T(r', \tau') dr' d\tau' - (\nabla T)^2 - \frac{(T-T_0)^2}{\alpha_0^2\chi\tau} + \frac{4}{3}\frac{bP}{\alpha_0\chi\rho c_p}\frac{(\hbar\omega - E_g + E_g T)^{3/2}}{E_g(\hbar\omega - E_g)^{1/2}} \right\} dr. \tag{18}$$

Из (18) следует уравнение Эйлера для температуры

$$-\Delta T + \frac{(T - T_0)}{\alpha_0^2\chi\tau} - \frac{bP}{\alpha_0\chi\rho c_p}\left(\frac{\hbar\omega - E_g + E_g T}{\hbar\omega - E_g}\right)^{1/2} = 0. \tag{19}$$

Минимумы, отвечающие свободным и автолокализованным состояниям, разделены автолокализованным барьером. Его высота определяется положением низшей седловой точки поверхности адиабатического потенциала [1], роль которого в данном случае исполняет лагранжиан (18). Нормированная величина автолокализационного барьера в соответствии с (18) равна

$$W = \frac{K\beta}{\nu^2 \rho b}. \qquad (20)$$

Прозрачность барьера может быть охарактеризована величиной $D = \exp(-2W)$. Если использовать характерные для полупроводниковых соединений A^2B^6 (CdS, ZnS и т.д.) значения параметров $K = 10^{11}\,\mathrm{N/m^2}$, $\beta = 10^{-5}\,\mathrm{deg}^{-1}$, $\nu = 10^5\,\mathrm{m/s}$, $\rho = 5\,\mathrm{g/cm^3}$, $b = 5 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{deg}^{-1}$, то получается оценка $\lg D \approx -4$. Коэффициент прозрачности увеличивается с ростом температурного коэффициента ширины запрещенной зоны, т е. величины обратной связи между ростом температуры и упругими колебаниями среды.

4. Приведенная схема расчета выявляет аналогию между доменизацией и последующей пространственной локализацией температуры на поверхности полупроводников с перестраиваемым электронным спектром в условиях их нагрева межзонно поглощаемым светом с квантовыми эффектами автолокализации. Использованная схема расчета соответствует туннельному способу преодоления автолокализационного барьера [1]. Зависимость ширины запрещенной зоны от температуры обеспечивает механизм обратной связи между уравнениями теплопроводности и колебаний упругой среды. Кроме этого, флуктуации температуры вызывают появление дополнительных сил, обусловливающих колебания упругой среды. Система становится пространственно-неоднородной. Таким образом, процесс развития деформационно-тепловой неустойчивости в описываемых полупроводниках имеет характер крупномасштабной автолокализации. Конечно, могут возникать и состояния, отвечающие совместному перемещению домена температуры и сопровождающей его деформации.

В результате возникновения устойчивых температурных неоднородностей на поверхности полупроводника будут образовываться дефекты структуры. Кроме этого, реальная поверхность всегда характеризуется шероховатостью, а также затравочными дефектами, которые ускоряют фотоиндуцированный процесс разрушения. Техника и существующие проблемы экспериментальной оптико-акустической спектроскопии конденсированных сред детально описаны в [7].

Использованный подход может быть применен для описания автолокализации вакансий или дислокаций в поле деформаций, поддерживаемых за счет энергии лазерного излучения.

Список литературы

[1] *Иорданский С.В., Рашба Э.И.* // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. Вып. 5. С. 1872–1885.
[2] *Емельянов В.И.* // Квантовая электрон. 1999. Т. 28. № 1. С. 2–18.
[3] *Цюцюра Д.И., Шкумбатюк П.С.* // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. Вып. 1. С. 12–14.
[4] *Шкумбатюк П.С., Цюцюра Д.И.* // ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 12. С. 136–138.
[5] *Дорофеев И.А., Либенсон М.Н.* // ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 10. С. 111–118.
[6] *Емельянов В.И., Панин И.М.* // ФТТ. 1997. Т. 39. Вып. 11. С. 2029–2035.
[7] *Жаров В.П., Лехотов В.С.* Лазерная оптико-акустическая спектроскопия. М.: Наука, 1984. 320 с.