

УДК 548.4

А. С. ВАРДАНЯН, Р. А. ВАРДАНЯН

ТЕПЛОЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ НА ДИСЛОКАЦИОННЫЕ ПЕРЕГИБЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Из-за наличия проблемы рекомбинационно-стимулированного движения дислокаций в полупроводниках исследован процесс теплового захвата электрона на дислокационный плавный перегиб. Многофононный захват становится возможным благодаря локализации носителя на перегибе. При помощи волновой функции локализованного состояния найдено сечение многофононного захвата для предельных случаев температур, соответствующих термически активированному и квантовому переходам между электронно-колебательными термами.

Введение. Дислокации, являясь топологическим дефектом кристаллической решетки, существенно взаимодействуют с электронной подсистемой кристаллов. В то время как в металлах это взаимодействие проявляется в основном в динамических свойствах дислокаций и сводится к торможению движущейся дислокации свободными электронами, в полупроводниках значительное влияние на механические и электронные свойства кристаллов оказывает формирование в запрещенной зоне дислокационных энергетических состояний [1].

Дислокационный перегиб (кинк) как вторичный дефект кристаллической решетки образуется, когда различные участки дислокации находятся в соседних долинах периодического рельефа решетки (потенциал Пайерлса). Его электронные свойства определяют динамику дислокаций в полупроводниках, контролируемую механизмом Пайерлса. Движение дислокации по этому механизму принято делить на три этапа [1, 2]: образование термических двойных перегибов, их «диссоциация», т.е. миграция солитонов в противоположные стороны, и аннигиляция движущихся навстречу друг другу кинков различных знаков. Эти акты подвержены влиянию электронных процессов. Предполагается, что образование перегиба должно привести к отщеплению электронного уровня от одномерной дислокационной зоны, т.е. к трехмерной локализации электрона, что может, например, понизить энергию образования двойного перегиба [3]. Возможность локализации электрона на перегибе обсуждалась также в работах [4, 5]. Такая локализация представляет интерес в связи с проблемой рекомбинационно-стимулированного движения дислока-

ций [2], приводящего к расширению дефектов упаковки в контактных областях биполярных и оптоэлектронных полупроводниковых устройств и их деградации. Если перегиб на дислокации обеспечит локализацию носителей и тем самым безызлучательный механизм их рекомбинации, то энергия, выделившаяся при рекомбинации, может способствовать миграции перегиба вдоль дислокации.

Многофононный захват электронов на глубокие состояния, сформированные дефектами решетки, можно разделить на два этапа [6]. На первом этапе электрон-фононная система переходит с сохранением энергии из начального состояния (где электрон свободен, а решетка находится в положении теплового равновесия) в конечное состояние (где электрон локализован и возбуждаются колебания решетки). На втором этапе происходит релаксация возбуждений, т.е. колебания, локализованные вблизи центра захвата, рассеиваются по всему кристаллу. Именно на этом этапе может происходить стимуляция движения дефекта. Однако, как правило, темп захвата носителя лимитируется первым этапом.

Данная работа посвящена изучению многофононного захвата электрона на дислокационные перегибы.

Отщепление уровня от дислокационной зоны вполне очевидно в случае резкого перегиба (с шириной порядка межатомного расстояния), так как он приводит к обрыву одномерных связей вдоль дислокации. Однако, так как аналитическое описание резких перегибов оказывается невозможным, большой интерес представляет изучение возможной локализации электрона на плавных перегибах, образование которых характерно для широкого класса полупроводников с ионным и смешанным ионно-ковалентным типом связей. Соответствующим критерием является малость параметра τ_p / G , где τ_p – напряжение Пайерлса и G – модуль сдвига. Ширина перегиба w связана с его высотой a (порядка межатомного расстояния) соотношением

$$w = a \left(\frac{\pi/2}{\tau_p / G} \right)^{1/2},$$

поэтому при $\tau_p / G \ll 1$ имеем $w \gg a$ и перегиб является плавным [7]. Даже в ковалентных кристаллах возможно образование плавных перегибов на частичных дислокациях, для которых барьер Пайерлса может быть значительно понижен [7]. В случае плавных перегибов применима струнная модель дислокации или континуальное приближение, что позволяет провести аналитическое рассмотрение проблемы и представить формирование кинка как возникновение упругой деформации решетки. При этом возможно найти аналитический вид волновой функции локализованного состояния [8].

Вероятность теплового захвата носителя на перегиб. Теория теплового захвата носителей на глубокие центры в полупроводниках была разработана в классических работах [9–11] и др. Эта теория основывается на «адиабатической теории возмущений», т.е. поправка первого порядка к адиабатическому приближению рассматривается в качестве оператора, описывающего воздействие локализованного электрона на решетку. В результате захвата электрона решетка вокруг центра захвата оказывается поляризованной, что соот-

ветствует сдвигке нормальных координат решетки. Это дает возможность передачи энергии электрона решетке с генерацией большого числа фононов.

Рассмотрим дислокацию, направленную вдоль оси z . Согласно работе [8], в основном состоянии локализованный электрон описывается волновой функцией

$$\psi_n = \sqrt{\frac{\beta}{\pi\rho}} e^{-\beta\rho} \left(\frac{\sqrt{\pi}\tilde{A}(1/2 + \varepsilon_0)}{w\tilde{A}(\varepsilon_0)} \right)^{1/2} \text{ch}^{-\varepsilon_0} \left(\frac{\pi z}{w} \right), \quad (1)$$

где $\beta^{-1} = \hbar / \sqrt{2mE_D}$, m – масса электрона, E_D – глубина залегания основного уровня в запрещенной зоне полупроводника. Значение параметра

$$\varepsilon_0 = \sqrt{-2mE_0} / (\pi\hbar / w) \quad (2)$$

определяется энергией основного состояния:

$$E_0 = \begin{cases} -\frac{\lambda}{2} \frac{a^2}{w^2} & \text{if } \frac{2\lambda}{E_b} \gg 1, \\ -\frac{\lambda^2 m a^4}{2\pi^2 \hbar^2 w^2} & \text{if } \frac{2\lambda}{E_b} \ll 1, \end{cases} \quad (3)$$

где E_b – ширина энергетической зоны, λ – константа деформационного потенциала. В случае простой параболической дисперсии E_b определяется зоной Бриллюена: $E_b \approx \hbar^2 \pi^2 / 2ma^2$.

В цилиндрических координатах волновая функция свободного электрона с нулевым орбитальным моментом, нормированная на цилиндр радиусом R , есть

$$\psi_m = \sqrt{\frac{k_\rho}{4\pi RL}} J_0(k_\rho \rho) e^{ik_z z}, \quad (4)$$

где k_ρ – двумерный волновой вектор свободного электрона.

Будем рассматривать захват носителей на перегиб в случае, когда их переходы вызываются акустическими колебаниями решетки. Энергия взаимодействия электрона с продольными упругими волнами описывается формулой $U_{e-ph} = -\lambda u_{ii}(z)$. Здесь под смещением u следует понимать тепловые колебания решетки. С использованием разложения смещений в ряд Фурье по нормальным координатам решетки энергия взаимодействия представляется следующим образом:

$$W(Q) = \lambda \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_q q [Q_{q,c} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}) + Q_{q,s} \sin(\mathbf{q}\mathbf{r})], \quad (5)$$

где Q обозначает всю совокупность нормальных координат Q_i ($i=1, \dots, N$), N есть число элементарных ячеек в фундаментальном объеме, а $Q_{q,c}$ и $Q_{q,s}$ – нормальные координаты стационарных косинусоидальных и синусоидальных волн с волновым вектором \mathbf{q} . Здесь сумма берется по половине пространства волновых векторов.

Так как взаимодействие свободных электронов с решеткой слабо, в адиабатическом приближении считается, что свободный электрон вообще не

возмущает решетку. Переход электрона в локализованное состояние на кинке сопровождается сдвижкой нормальных координат решетки. Вследствие цилиндрической симметрии волновой функции локализованного состояния синусоидальные волны не возмущаются. Нормальные координаты косинусоидальных волн смещаются на величину

$$a_{q,c}^n = \left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \frac{\lambda}{\hbar s} \int d\mathbf{r} |\psi_n(r,0)|^2 \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (6)$$

где $\psi_n(r,0)$ – волновая функция локализованного электрона, не возмущенного решеткой; s – скорость звука в твердом теле.

Используя (1) и (4), для сдвижки нормальных координат получаем

$$a_{q,c}^n = \left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \frac{4\lambda\beta}{\sqrt{\pi}\hbar s} \cdot \frac{1}{(4\beta^2 + q_\rho^2)^{1/2}} \cdot \frac{4^{\varepsilon_0-1} \Gamma(1/2 + \varepsilon_0)}{\Gamma(\varepsilon_0)\Gamma(2\varepsilon_0)} \Gamma\left(\varepsilon_0 + \frac{i\omega q_z}{2}\right) \Gamma\left(\varepsilon_0 - \frac{i\omega q_z}{2}\right). \quad (7)$$

Отметим, что здесь фононный волновой вектор разделен на компоненты по z и ρ : $q = \sqrt{q_z^2 + q_\rho^2}$, так как радиусы локализации различны.

Сдвижкой нормальных координат решетки определяется тепловыделение Δ , характеризующее энергию поляризации решетки вокруг кинки и возникающее в процессе захвата носителя:

$$\Delta = \sum_i |A_i|^2 \hbar \omega_i, \quad (8)$$

где ω_i – частота осцилляторов; A_i – безразмерный параметр, характеризующий смещение нормальных координат фононов: $A_i = A_i^m - A_i^n$, $A_i^{m,n} = (\hbar/2M\omega_i)^{1/2} a_i^{m,n}$, M – полная масса всех атомов в элементарной ячейке решетки.

Если электрон находится в возбужденном состоянии, то решетка может находиться в квантово-механическом состоянии, определяемом фононными числами заполнения, а при локализации носителя решетка может перейти в любое из многочисленных новых состояний. Следовательно, для нахождения вероятности захвата носителя локальным уровнем необходимо усреднить матричный элемент перехода по всем возможным начальным состояниям решетки и просуммировать по ее конечным состояниям. С пренебрежением частотным эффектом, т.е. с предположением, что энергетические поверхности электронно-колебательной системы имеют одинаковую кривизну в начальном и конечном состояниях, была получена вероятность захвата электрона в работе Рикайзена [11]:

$$W_{mn}(k) = \omega_D \int_{-\infty}^{\infty} M(t,T) e^{\eta(t,T)} dt, \quad (9)$$

где ω_D – дебаевская частота колебаний решетки, T – абсолютная температура. При помощи вероятности перехода определим сечение захвата на кинку:

$$S_{\zeta\delta} = \frac{\int W_{mn}(k) f(k) \frac{Rdk_\rho}{(2\pi)^2} \cdot \frac{Ldk_z}{\pi}}{\int v_k f(k) \frac{dk}{(2\pi)^3}}, \quad (10)$$

где v_k – скорость носителя, $f(k)$ – функция распределения электронов.

Предэкспоненциальный множитель $M(t, T)$ в (9) определяется матричным элементом электронного перехода

$$P_i = \left(\frac{\hbar}{2M\omega_i} \right)^{1/2} \lim_{Q \rightarrow 0} \int \psi_n^*(\mathbf{r}, Q) \frac{\partial}{\partial Q_i} \psi_m(\mathbf{r}, Q) d^3\mathbf{r} \quad (11)$$

($\psi_m(\mathbf{r}, Q)$ представляет собой возмущенную волновую функцию электрона) согласно соотношению

$$M(t, T) = \sum_{i,j} \Omega_i \Omega_j P_i P_j^* \left\{ [2n_i + 1 - g_i(t)] \delta_{ij} + A_i A_j^* g_i(t) g_j(t) \right\}. \quad (12)$$

Здесь $g_i(t) = i \sin(\Omega_i t) + (2n_i + 1)(1 - \cos \Omega_i t)$, $\Omega_i = \omega_i / \omega_D$; $n_i = [\exp(\hbar\omega_i / k_B T) - 1]^{-1}$ – числа заполнения фононов; k_B – постоянная Больцмана.

Величина $\eta(t, T)$, характеризующая процесс (активационный или туннельный) перехода системы в новое состояние, есть

$$\eta(t, T) = i\varepsilon_I t - \sum_i |A_i|^2 g_i(t). \quad (13)$$

Здесь $\varepsilon_I = E_I / \hbar\omega_D$, где E_I – энергия ионизации локализованного электрона. Так как взаимодействие локализованных электронов с фононами приводит к смещению равновесных положений электронных уровней, энергия ионизации оказывается меньше разности энергий между чисто электронными состояниями на величину тепловыделения Δ :

$$\varepsilon_I = (\hbar\omega_D)^{-1} [E_m(0) - E_n(0)] - \sum_i \Omega_i \left(|A_i^m|^2 - |A_i^n|^2 \right)$$

($E_m(0)$, $E_n(0)$ – энергии соответственно электронного и связанного состояний, не возмущенных решеткой). Полагая, что энергия ионизации достаточно велика ($\varepsilon_I \gg 1$), в дальнейшем будем пользоваться квазиклассическим предельным случаем, который справедлив, когда связь между локализованным электроном и решеткой достаточно сильна. Тогда из выражений (9) и (13) видно, что характерные значения t в интеграле порядка ε_I^{-1} , так что можно разложить функцию $g_i(t)$ по $\Omega_i t$, полагая $\Omega_i t \ll 1$ и ограничиваясь квадратичными членами:

$$g_i(t) = i\Omega_i t - (2n_i + 1)(\Omega_i t)^2 / 2. \quad (14)$$

Пренебрегая величинами порядка $k_B T / [E_m(0) - E_n(0)]$ в выражении для скорости захвата (9) и интегрируя по t , получим

$$W_{mn}(k) = \sqrt{2\pi} \frac{\hbar\omega_D^2}{\sigma} \sum_i |P_i|^2 \Omega_i^2 (2n_i + 1) \exp \left[-\frac{(E_I - \Delta)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (15)$$

где тепловыделение Δ определяется формулой (8), а

$$\sigma = \left(\sum_i |A_i|^2 \hbar^2 \omega_i^2 (2n_i + 1) \right)^{1/2}$$

есть дисперсия гауссовской функции, возникающей в выражении (15).

Подставляя (7) в (8) и учитывая, что спектр частот акустический ($\omega(q) = sq$), а также вводя обрезание по q : $q \leq q_D$, получим

$$\Delta = 48 \frac{\lambda^2}{Ms^2} \frac{\beta^2}{q_D^3 w} \ln \frac{\omega_D}{2\beta s} \left(\frac{4^{\varepsilon_0 - 1} \Gamma(2\varepsilon_0) \Gamma(1/2 + \varepsilon_0)}{\Gamma(\varepsilon_0) \Gamma^{1/2}(4\varepsilon_0)} \right)^2. \quad (16)$$

Для нахождения величины σ^2 рассмотрим два предельных случая, соответствующих высоким и низким температурам:

$$\sigma^2 = \begin{cases} 2\Delta k_B T, & k_B T \gg \hbar \omega_D, \\ \left(\ln \frac{\omega_D}{2\beta s} \right)^{-1} \Delta \hbar \omega_D, & k_B T \ll \hbar \omega_D. \end{cases} \quad (17)$$

Для вычисления скорости захвата (15) необходимо перейти от суммы по фоновым состояниям к интегралу по q :

$$\sum_i |P_i|^2 \Omega_i^2 (2n_i + 1) = \frac{1}{2V} \int_{|q| \leq q_D} dq |P(q)|^2 (q/q_D)^2 (2n_q + 1), \quad (18)$$

где V – объем зоны Бриллюэна. Здесь матричный элемент электронных переходов в приближении Франка–Кондона равен

$$P(q) = \left(\frac{\pi^3 k_p}{8RL} \right)^{1/2} \frac{\lambda}{E_{\dot{e}\dot{e}i\dot{e}}} \left(\frac{\hbar w}{Ms\beta^2} \right)^{1/2} q^{1/2} \left(1 + \frac{q_p^2}{\beta^2} \right)^{-1} \text{sech}(\pi w q_z / 2), \quad (19)$$

где $E_{\text{кинк}} = |E_D + E_0|$ есть энергия основного локализованного состояния.

В интеграле по q в выражении (18) снова введено обрезание по дебаевскому волновому вектору, величина которого порядка межатомного расстояния: $q_D \approx a$. Учитывая, что радиусы локализаций носителя превышают расстояние между атомами, можно воспользоваться приближениями $\beta^{-1} q_D > 1$ и $w q_D \gg 1$. Вычисляя таким образом сумму (18), получим сечение захвата электрона на кинк для высоких температур, когда многофононный переход происходит в основном через активированные состояния, и для низких температур, когда в системе идет туннельный переход между электронно-колебательными термами:

$$S_{\dot{e}\dot{e}\dot{o}} = \begin{cases} \frac{3\pi^{\frac{3}{2}}}{4} \frac{\hbar w \omega_D^2 (\Delta k_B T)^{\frac{1}{2}}}{q_D^2 v_T E_{\dot{e}\dot{e}i\dot{e}}^2} \exp \left[-\frac{(E_I - \Delta)^2}{4\Delta k_B T} \right], & k_B T \gg \hbar \omega_D, \\ \frac{3\pi^{\frac{3}{2}}}{8} \left(2 \ln \frac{\omega_D}{2\beta s} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar w \omega_D^2 (\Delta \hbar \omega_D)^{\frac{1}{2}}}{q_D^2 v_T E_{\dot{e}\dot{e}i\dot{e}}^2} \exp \left[-\frac{(E_I - \Delta)^2}{2\Delta \hbar \omega_D} \ln \left(\frac{\omega_D}{2\beta s} \right) \right], & k_B T \ll \hbar \omega_D, \end{cases} \quad (20)$$

где v_T – тепловая скорость носителя.

Сечение захвата (20) определяет темп многофононной рекомбинации, а тепловыделение (16) характеризует энергию, способную стимулировать движение дефекта. Для получения более наглядной зависимости этих величин от параметров перегиба и для проведения численных оценок рассмотрим случай, когда параметр ε_0 , определяемый выражением (2), порядка единицы. Из (16) следует, что при $\varepsilon_0 = 1$

$$\Delta = 2\pi \frac{\lambda^2}{Ms^2} \cdot \frac{\beta^2}{q_D^3 w} \ln \frac{\omega_D}{2\beta s},$$

т.е. тепловыделение обратно пропорционально w , что определяет сильную чувствительность сечения захвата к ширине перегиба. Действительно, приняв $s \sim 5 \cdot 10^5$ см/с, $Ms^2 \sim 20$ эВ, $\omega_D \sim 10^{13}$ с⁻¹, $\lambda \sim 10$ эВ, $v_T \sim 10^7$ см/с, $E_{кин} \sim 0,7$ эВ, получаем, что в интервале температур 300–500 К сечение захвата находится в области от 10^{-22} до 10^{-20} см² при $w = 10$ а, так что многофононный захват на перегиб является весьма вероятным механизмом рекомбинации, способным конкурировать с излучательным механизмом, и в области от 10^{-26} до 10^{-23} см² при $w=20$ а, т.е. тепловой захват на такой перегиб маловероятен.

Заключение. Использование аналитического выражения (1) для волновой функции локализованного состояния позволило нам оценить вероятность захвата электрона на плавные дислокационные перегибы, а также величину энергии поляризации решетки вокруг перегиба. Отметим, что во многих широкозонных полупроводниках, в частности в соединениях класса $A^{II}B^{VI}$, дислокации заряжены, поэтому для захвата на центры на дислокации неосновные носители должны протуннелировать через электростатический барьер. Проведенные здесь вычисления можно непосредственно обобщить на случай заряженной дислокации, используя соответствующую волновую функцию свободного электрона. Процесс туннелирования уменьшает сечение захвата (для любого механизма захвата), что можно описать, вводя в вероятность процесса дополнительный фактор $\exp[-\tilde{E}/k_B T]$, где \tilde{E} представляет собой энергию наиболее эффективно захватываемых носителей и определяется электростатическим потенциалом дислокации.

Очевидно, что вероятность захвата на плавный перегиб мала по сравнению с вероятностью захвата на точечные дефекты: проведенная здесь оценка показывает, что сечение захвата на перегиб в лучшем случае на два-три порядка меньше теоретических оценок соответствующей величины для точечных центров [11]. Тем не менее, как указывалось выше, тепловой механизм захвата на перегиб может конкурировать с излучательным механизмом, поэтому рекомбинация носителей на перегибе может сопровождаться передачей энергии решетке и способствовать движению дефектов, как и наблюдалось в эксперименте [12].

Кафедра теоретической физики

Поступила 15.10.2007

ЛИТЕРАТУРА

1. Suzuki T., Takeuchi S., Yoshinaga H. Dislocation dynamics and plasticity. Berlin–New York: Springer-Verlag, 1991.
2. Maeda K. and Takeuchi S. Dislocations in Solids (edited by Nabarro F.R.N. and Duesbery M.S.), Amsterdam, North-Holland, 1996, Chap. 10, p. 443.
3. Bilyavskii V. I., Darinskii B. M., Shalimov V. V. – Sov. Phys. Solid State, 1982, v. 24, p. 288.
4. Jones R. – Phil. Mag., 1980, B 42, p. 365.

5. **Hirsch P.B., Ourmazd A. and Pirouz P.** – Inst. Phys. Conf. Ser. 60, 1981, p. 29.
6. **Абакумов В.Н., Перель В.И., Ясневич И.Н.** Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. С.-П., 1997.
7. **Suzuki T. and Takeuchi S.** Crystal Lattice Defects & Dislocation Dynamics. New York: Nova Science Publishers, 2000, Chap. 1, p. 1.
8. **Vardanyan R. and Kteyan A.** – Phys. Stat. Sol., 2007, C 4, p. 2903.
9. **Huang K., Rhys A.** – Proc. Roy. Soc., 1950, A204, p. 406.
10. **Kubo R., Toyozawa Y.** – Progr. Theor. Phys., 1955, v. 13, p. 160.
11. **Rickayzen G.** – Proc. Roy. Soc., 1957, A241, p. 480.
12. **Galeckas A., Linnros J., Pirouz P.** – Appl. Phys. Lett., 2002, v. 81, p. 883.

Ա. Ս. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Ռ. Ա. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ՋԵՐՄԱՅԻՆ
ՉԱՎԹՈՒՄԸ ԴԻՍԼՈԿԱՑԻՈՆ ՆԿՆԿԵՐԻ ՎՐԱ

Ա մ փ ո փ ո մ

Հաշվի առնելով կիսահաղորդիչներում դիսլոկացիայի ռեկոմբինացիայով խթանված շարժումը՝ հետազոտել ենք դիսլոկացիոն սահուն կինկի վրա էլեկտրոնի ջերմային զավթման պրոցեսը: Բազմաֆոնոնային զավթումը հնարավոր է դառնում կինկի վրա լիցքակրի տեղայնացման հետևանքով: Տեղայնացված վիճակի ալիքային ֆունկցիայի օգնությամբ որոշվել է բազմաֆոնոնային զավթման կտրվածքը ջերմաստիճանի սահմանային դեպքերում, որոնք համապատասխանում են ջերմասկտիվացված և քվանտային անցումներին էլեկտրոնային-տատանողական թերմերի միջև:

A. S. VARDANYAN, R. A. VARDANYAN

THERMAL CAPTURE OF ELECTRONS BY DISLOCATION KINKS IN
SEMICONDUCTORS

Summary

In the light of recombination-enhanced motion of dislocations in semiconductors, we explored the process of thermal capture of an electron by a smooth kink on dislocation. Multi-phonon capture becomes possible due to carrier localisation on the kink. With the use of wave function of localized state we have found the multi-phonon capture cross-section for two limiting temperature cases corresponding to the thermally activated and quantum transition between vibronic terms.