1993 ЖУРНАЛ ТЕХНИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ Том 63, в. 9
1993 JOURNAL OF TECHNICAL PHYSICS Vol. 63, N 9

01;06;07

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ И ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ В ПРЯМОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

М.А.Разумова, В.Н.Хотяинцев

В рамках приближения деформационного потенциала осуществлено численное моделирование одночастичных, локализованных на краевой дислокации состояний в кубическом прямозонном полупроводнике и на его основе дано объяснение экспериментально наблюдаемой поляризации дислокационного поглощения (ДП) и люминесценции (ДЛ) вдоль вектора Бюргерса.

Показано, что сильная анизотропия эффективных масс может приводить к поляризации ДП и ДЛ либо вдоль линии дислокации (при $m_{\parallel} < m_{\perp}$), либо в плоскости, перпендикулярной к ней (при $m_{\parallel} > m_{\perp}$). Но основным фактором, определяющим поляризацию ДП и соответствующей ДЛ при реальных значениях параметров, является отличие констант деформационного потенциала D_1 и D_2, соответствующих продольному и поперечному сжатию (для данной подзоны). Экспериментально наблюдаемой поляризации вдоль b соответствует соотношение $|D_1| > |D_2|$, которое действительно выполняется для всех материалов, в которых исследовалось ДП. При $|D_2| > |D_1|$ ДП должно быть поляризовано перпендикулярно b.

Введение

Экспериментальные исследования края собственного поглощения в полупроводниках показывают, что при введении дислокаций в запрещенной зоне появляется поглощение, величина которого возрастает с увеличением плотности дислокаций σ. Это дополнительное поглощение будем называть дислокационным поглощением (ДП). Длинноволновая граница ДП, не связанного с глубокими дислокационными состояниями оборванных связей, отстоит на 0.2–0.3 эВ от края фундаментального поглощения [1–6]. При наличии в образце избытка дислокаций с определенной ориентацией вектора Бюргерса b обнаруживается характерная особенность: для различных типов дислокаций и в различных материалах [1–6] ДП и соответствующая дислокационная люминесценция (ДЛ) поляризованы преимущественно вдоль b. Поляризация ДП наиболее сильно выражена для переходов с минимальной энергией и ослабевает по мере приближения к неполяризованному краю фундаментального поглощения [6]. Поляризация ДП не получила еще последовательного объяснения, хотя шаги в этом направлении предпринимались.

В настоящей работе предложена модель, объясняющая поляризацию ДП, обусловлённого электрически неактивными краевыми дислокациями.

Основные положения модели и постановка задачи

Рассмотрим для простоты кубический прямозонный полупроводник (в определенной степени кубическое приближение применимо и для гексагональных кристаллов [7]). В наиболее актуальной длинноволновой части спектра ДП коэффициент поглощения пропорционален σ, поэтому ограничимся изучением поглощения в поле отдельной дислокации, которую будем считать краевой, идеальной, прямолинейной и бесконечной.

Как показывает эксперимент [1–6], глубина дислокационных уровней (0.2–0.3 эВ) невелика по сравнению с шириной запрещенной зоны. Поэтому воспользуемся однозонным приближением, в рамках которого спектр дислокационных электронных состояний вблизи зоны проводимости (Dc-состояния) и спектр дислокационных дырочных состояний вблизи валентной зоны (Dv-состояния) формируются независимо.

Выбираем простейшую, но отражающую необходимые принципиальные моменты модель. Прежде всего учитываем трехкратное вырождение максимума валентной зоны в отсутствие деформаций в кристалле. Спин-орбитальным расщеплением, которое, как правило, мало́ по сравнению с глубиной нижайших дислокационных уровней, пренебрегаем. Анизотропное поле дислокации снимает это вырождение, в результате образуются три серии дислокационных одномерных зон Dv-состояний, переходы из которых в Dc-состояния и зону проводимости (невырожденную) соответствуют трем различным поляризациям ДП. Серия дырочных дислокационных зон, которая оказывается наиболее глубокой, и будет определять поляризацию длинноволновой части спектра ДП.

Влияние поля деформаций будем рассматривать в рамках метода деформационного потенциала [7], а движение частиц в приближении эффективной массы. Для простой изотропной зоны проводимости деформационный потенциал дислокаций сводится к скаляру. Связанные дислокационные состояния для этого случая анализировались нами в работе [8]. Было получено, что размерная энергия поперечного движения носителей заряда пропорциональна эффективной массе. А так как для ряда кристаллов, исследованных экспериментально, $m_c \ll m_v$, то Dc-состояния намного мельче по сравнению с Dv-состояниями. При обратном соотношении поляризационные особенности проявлялись бы слабо.

Используемой модели валентной зоны в кубическом кристалле соответствует гамильтониан [7]

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} L\partial_x^2+M(\partial_y^2+\partial_z^2) & N\partial_x\partial_y & N\partial_x\partial_z \\ N\partial_x\partial_y & L\partial_y^2+M(\partial_x^2+\partial_z^2) & N\partial_y\partial_z \\ N\partial_x\partial_z & N\partial_y\partial_z & L\partial_z^2+M(\partial_x^2+\partial_y^2) \end{pmatrix} +$$

$$+\begin{pmatrix} D_1 u_{xx}+D_2(u_{yy}+u_{zz}) & D_3 u_{xy} & D_3 u_{xz} \\ D_3 u_{xy} & D_1 u_{yy}+D_2(u_{xx}+u_{zz}) & D_3 u_{yz} \\ D_3 u_{xz} & D_3 u_{yz} & D_1 u_{zz}+D_2(u_{yy}+u_{xx}) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $\partial_x = \partial/\partial x$, $\partial_y = \partial/\partial_y$; L, M, N — независимые константы, описывающие закон дисперсии; D_1, D_2, D_3 — независимые константы деформационного потенциала; u_{ij} — компоненты тензора деформаций дислокации, для которых мы воспользуемся известными выражениями в приближении изотропной упругой среды [9].

Валентная зона в идеальном кристалле представляет собой совокупность трех подзон, вырожденных в точке r, которые являются связанными за счет недиагональных членов гамильтониана. В силу особенностей конфигурации деформационного поля краевой дислокации роль недиагональных членов не является определяющей и на первоначальном этапе объяснения эффекта поляризации ДП взаимодействием подзон можно пренебречь, положив $N = 0$, $D_3 = 0$.

Функции Ванье каждой из подзон по отношению к преобразованиям симметрии кубического кристалла ведут себя аналогично функциям атомного p-электрона типа x, y, z. Поэтому сами подзоны будем обозначать индексами x, y, z.

В идеальном кристалле изоэнергетические поверхности для отдельных подзон представляют собой одинаковые эллипсоиды с осями вращения, направленными вдоль x, y, z. Направления x, y, z равноправны, но для отдельной подзоны направление соответствующей кубической оси является выделенным, т.е. каждая зона в отдельности анизотропна. Проявляется это в том, что при $L \neq M$ эффективные массы для движения вдоль и поперек оси различны $m_\parallel \neq m_\perp$ ($L = \hbar^2/2m_\parallel, M = \hbar^2/2m_\perp$). Кроме того, при $D_1 \neq D_2$ различным является энергетический сдвиг, обусловленный сжатием кристалла вдоль и поперек оси. Направление оси также является направлением дипольного момента перехода из данной v-подзоны в изотропную зону проводимости.

Различное сочетание анизотропии подзон с анизотропией деформационного поля дислокации обусловливает неэквивалентность Dv-состояний, связанных с различными подзонами, и, как следствие, определенную поляризацию ДП. Задача состоит в том, чтобы установить, какой из двух факторов анизотропии является определяющим: анизотропия тензора эффективной массы $m_\parallel \neq m_\perp$ или анизотропия констант деформационного потенциала $D_1 \neq D_2$, и объяснить, почему из трех взаимно перпендикулярных направлений, характеризующих краевую дислокацию (b, нормаль к плоскости скольжения и направление дислокационной линии), в поляризации ДП выделенным является именно направление b. Чтобы установить доминирующий фактор анизотропии, их влияние будем исследовать по отдельности.

Дислокации по отношению к базису x, y, z могут быть ориентированы по-разному. Эксперимент показал, что ориентация дислокации в кристалле не имеет принципиального значения, ДП остается поляризованным вдоль b. Мы рассмотрим случай, когда влияние анизотропии эффективной массы наиболее сильное, а именно когда оси дислокации совпадают с кубическими осями. Пусть $0z$ есть линия дислокации, а вектор b параллелен $0y$.

Учет анизотропии эффективной массы для отдельной подзоны

Можно ожидать, что большое отличие продольной и поперечной эффективных масс (в 5–10 раз) должно заметно повлиять на спектр Dv-состояний. Проанализируем роль этого фактора в предположении, что $D_1 = D_2 = D$.

В результате масштабного преобразования ($x' = \sqrt{m_\perp/2\mu}x$, $y' = \sqrt{m_\parallel/2\mu}y$ для Y-состояний и $x' = \sqrt{m_\parallel/2\mu}x$, $y' = \sqrt{m_\perp/2\mu}y$ для X-состояний, μ — приведенная масса) уравнения для стационарных состояний в безразмерных единицах приобретают вид

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\cos\varphi}{r}\frac{\sqrt{1+\delta^\beta}}{1+\delta^\beta\cos 2\varphi}\right\}\psi_n^\beta = \varepsilon_n^\beta\Psi_n^\beta/2, \tag{2}$$

где $\beta = x, y, z$ — индекс подзоны обозначает принадлежность к серии определенного типа, δ^β — параметр анизотропии эффективной массы,

$$\delta^y = -\delta^x = (m_\parallel - m_\perp)/(m_\parallel + m_\perp), \qquad \delta^z = 0, \tag{3}$$

ε_n^β — безразмерная глубина уровня.

Каждая серия уровней образуется из одной подзоны, энергетический спектр локализованных по поперечному движению состояний представляет собой одномерные зоны вида

$$E_n^\beta = -\varepsilon_n^\beta 2\mu(\alpha bD)^2/\hbar^2 + \hbar^2k^2/2m_\perp, \quad \beta = x, y, \tag{4}$$

$$E_n^z = -\varepsilon_n^z m_\perp(\alpha bD)^2/\hbar^2 + \hbar^2k^2/2m_\parallel, \tag{5}$$

где $\alpha = (1-2\nu_p)/2\pi(1-\nu_p)$, ν_p — коэффициент Пуассона.

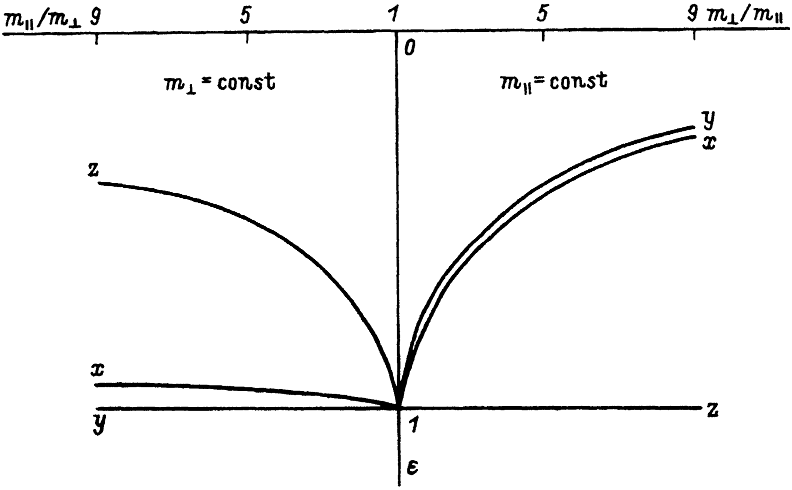

Рис. 1. Зависимость энергетических глубин нижайших одномерных зон из каждой серии Dv-состояний при $k_\parallel = 0$ от анизотропии эффективных масс (энергии нормированы на глубину нижайшего уровня).
Численный счет, число учитываемых угловых гармоник $N = 8$.

В случае Z-состояний эффективная масса для поперечного движения является изотропной и можно воспользоваться результатами работы [8]

$$\varepsilon_1^{zs} = 0.268, \quad \varepsilon_2^{zs} = 0.0825, \quad \varepsilon_3^{zs} = 0.040, \quad \varepsilon_1^{za} = 0.047, \quad \varepsilon_2^{za} = 0.011, \qquad (6)$$

где индексы s и a обозначают симметрию по φ.

В случае X- и Y-состояний уравнение (2) решается численно. При этом различаются два случая: а) $m_{\parallel} > m_{\perp}$, б) $m_{\parallel} < m_{\perp}$. Результаты численного счета представлены на рис. 1 для нормированных единиц, которые можно перевести в абсолютные, используя известные абсолютные значения энергии для Z-состояний (5), (6).

Учет анизотропии констант деформационного потенциала

Будем теперь эффективную массу считать изотропной ($m_{\perp} = m_{\parallel} = m$) и проанализируем эффекты, обусловленные неравенством констант деформационного потенциала $D_1 \neq D_2$, т.е. тем, что анизотропная деформация по-разному влияет на подзоны x, y, z.

Задача сводится к решению скалярных уравнений для каждой из подзон в безразмерном виде

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos\varphi}{r} - \frac{\Delta^\beta}{2+\Delta^\beta}\frac{\cos 3\varphi}{r}\right\}\psi_n^\beta = \varepsilon_n^\beta \Psi_n^\beta/2, \qquad (7)$$

где $\beta = x, y, z$; Δ — параметр анизотропии

$$\Delta^y = -\Delta^x = \Delta = (D_1 - D_2)/(D_1 + D_2)(1 - 2\nu_p), \quad \Delta^z = 0. \qquad (8)$$

Энергетический спектр носителей записывается через безразмерные энергии ε_n^β следующим образом:

$$E_n^x = -\varepsilon_n^x \frac{m}{\hbar^2}(\alpha b(1 - \Delta/2)(D_1 + D_2)/2)^2 + \hbar^2 k_z^2/2m, \qquad (9)$$

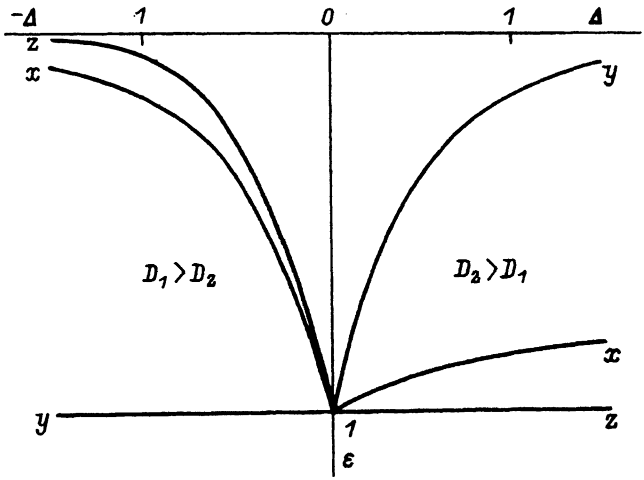

Рис. 2. Зависимость энергетических глубин нижайших одномерных зон из каждой серии Dv-состояний при $k_{\parallel} = 0$ от анизотропии констант деформационного потенциала (энергии нормированы на глубину нижайшего уровня).
Численный счет, число учитываемых угловых гармоник $N = 8$.

$$E_n^y = -\varepsilon_n^y \frac{m}{\hbar^2}(\alpha b(1+\Delta/2)(D_1+D_2)/2)^2 + \hbar^2 k_z^2/2m, \tag{10}$$

$$E_n^z = -\varepsilon_n^z \frac{m}{\hbar^2}(\alpha b D_2)^2 + \hbar^2 k_z^2/2m, \tag{11}$$

где значения ε_n^z те же, что в (6), а ε_n^x, ε_n^y находились численно.

Результаты расчетов представлены на рис. 2.

Анализ результатов

В пренебрежении недиагональными членами $\hat{H}$ (1) из каждой v-подзоны образуется своя серия Dv-состояний. Кроме того, в каждой серии разделяются два класса состояний: симметричные (s) и антисимметричные (a) относительно отражения в плоскости $\varphi = 0$. Это является следствием четности по φ диагональных членов оператора потенциальной энергии в (1). В работе [8] для случая простой изотропной зоны получено, что глубины нижайших уровней симметричных и антисимметричных Dc-состояний отличаются примерно в 6 раз, а глубины нижайшего и первого возбужденного симметричного — примерно втрое. Подобная ситуация должна иметь место и в нашем случае. По этой причине достаточно проанализировать только нижайшие s-состояния каждой Dv-серии. Так как функции нижайших состояний являются четными по φ, то искомую функцию раскладываем по системе угловых функций $\{\cos m\varphi\}$, причем учитываем конечное число гармоник $m = (0, N-1)$, и задача сводится к системе $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с особыми точками в нуле и на бесконечности. Для отыскания собственных значений применяем метод переноса граничных условий [10].

Как видно из рис. 1, анизотропия эффективной массы ($m_{\|} \neq m_{\perp}$) приводит к расщеплению Dv-состояний различных подзон. Наиболее глубокими при $m_{\|} < m_{\perp}$ являются z-состояния, поэтому в поляризации ДП выделенным должно быть направление линии дислокации. При $m_{\|} > m_{\perp}$ наиболее глубокими являются Y-состояния, однако расщепление между Y- и X- состояниями мало́, а Z-состояния являются более мелкими. При сильной анизотропии ($m_{\|}/m_{\perp} = 9$) глубины нижайших Y- и Z-состояний отличаются в 2.5 раза. Следовательно, длинноволновое крыло ДП должно быть поляризовано в плоскости перпендикулярной дислокационной линии со слабым преимуществом направления b.

Исследования влияния анизотропии констант деформационного потенциала показывают (рис. 2), что наиболее глубокими являются либо X- , либо Y-состояния в зависимости от знака параметра анизотропии $(D_1-D_2)/(D_1+D_2)$. При $|D_1| < |D_2|$ — это X-состояния, при $|D_1| > |D_2|$ — Y-состояния. Следовательно, при $|D_1| < |D_2|$ ДП должно быть поляризовано вдоль нормали к плоскости скольжения, а в случае $|D_1| > |D_2|$ ДП должно быть поляризовано вдоль b. Именно последняя поляризация наблюдается в эксперименте [1–6]. Следует подчеркнуть, что влияние анизотропии констант деформационного потенциала является весьма сильным. Для реальных значений отношения $D_1/D_2 \sim 1.5$–2 глубины $Y-Dv$-состояний и $X-Dv$-состояний отличаются в 6–10 раз. Следовательно, именно анизотропия констант деформационного потенциала является главным фактором, определяющим направление поляризации ДП.

Следует отметить, что использование приближения эффективной массы и деформационного потенциала по отношению к Dv-состояниям находится на пределе применимости, поэтому численные результаты для энергий связи нужно рассматривать как ориентировочные. В то же время эффект отличия глубины X- и $Y-Dv$-состояний, обусловленный неравенством констант D_1 и D_2, выражен настолько сильно, что его можно считать надежно установленным.

Для кристаллов GaAs, InSb, CdS, CdSe реализуется ситуация $|D_1| > |D_2|$, $m_\parallel > m_\perp$, эффект, обусловленный анизотропией эффективных масс, дополняет эффект, обусловленный анизотропией констант деформационного потенциала: сильнее всего отщепляются Y-состояния, затем X-состояния и слабее Z-состояния. Длинноволновое крыло поглощения должно быть поляризовано вдоль b. Для материалов, исследованных экспериментально в работах [1–6], соотношение $|D_1| > |D_2|$ выполняется. Нам неизвестны материалы, для которых выполняется обратное соотношение: $|D_1| < |D_2|$. Если такие существуют, то ДП будет поляризовано перпендикулярно b и линии дислокации. Константы деформационного потенциала определялись по приведенным в обзоре [11] для тетраэдрических полупроводников значениям констант деформационного потенциала a, b, d, связанных с D_1, D_2, D_3 (или l, m, n по [7]) соотношениями

$$(D_1 + 2D_2)/3 = a, \quad (D_1 - D_2)/3 = b, \quad D_3/\sqrt{3} = d. \tag{12}$$

Учет недиагональных компонент гамильтониана (1) при $k_\parallel = 0$ приводит к смешиванию X- и Y-состояний противоположной симметрии по φ. К самым глубоким Y_s-Dv-состояниям подмешиваются X_a-Dv-состояния. Спектр дислокационных дырочных состояний преобразуется, но установленная выше иерархия состояний по глубине уровней сохраняется.

В силу того что в приближении эффективной массы компоненты дипольного момента перехода $v \to c$ пропорциональны интегралам перекры-

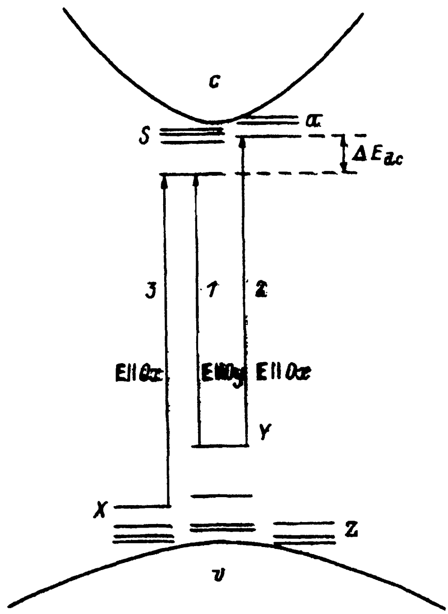

Рис. 3. Схема энергетических уровней и оптических переходов, связанных с краевой дислокацией.

ΔE_{dc} определяет протяженность длинноволнового участка ДП, где поляризация оптических переходов строго вдоль b.

тия соответствующих компонент волновых функций v-состояния и волновой функции c-состояния, а те и другие в поле дислокации обладают симметрией, то возникают определенные правила отбора: разрешенными являются переходы из симметричного в симметричное и из антисимметричного в антисимметричное состояния.

Представленная на рис. 3 схема оптических переходов позволяет интерпретировать экспериментально наблюдаемую частотную зависимость поляризационного отношения [6]. Поглощению с минимальной энергией фотона будут отвечать переходы из нижайших Y_s-Dv-состояний в симметричные Dc-состояния, т.е. переходы, соответствующие y-поляризации (вдоль b). Казалось бы, что прямые разрешенные переходы в x-поляризации начинаются с частот, соответствующих переходу *3* на рис. 3. На самом деле это происходит раньше и связано с тем, что за счет недиагональных элементов гамильтона (1) к симметричным Y-состояниям подмешаны X_a-состояния, которые проявляются, согласно правилам отбора, начиная с перехода *2* на рис. 3. При этом разность глубин уровней нижайших Dc_s- и Dc_a-состояний, равная [8] $\Delta E_{dc} = E_1^{cs} - E_1^{ca} = (0.268 - 0.047)m_c^*(\alpha b D_c)^2/\hbar^2$, где m_c^*, D_c — константы, характеризующие зону проводимости, определяет протяженность начального длинноволнового участка спектра ДП, на котором ДП поляризовано строго по y. Затем степень поляризации начинает убывать. Это является следствием того, что без учета локализации Dc-состояний переход из симметричного Dv-состояния в точку $k = 0$ зоны проводимости в y-поляризации будет разрешенным, а в x-поляризации запрещенным.

Заключение

Проведенный анализ показал, что своим происхождением состояния, ответственные за формирование дислокационного крыла поглощения, могут быть обязаны дальнодействующему полю упругих деформаций. Подтверждением этого является предсказываемая в рамках теории деформационного потенциала и наблюдаемая экспериментально для системы ориентированных дислокаций поляризация дислокационного поглощения и соответствующей дислокационной люминесценции вдоль направления вектора Бюргерса.

Список литературы

[1] *Классен В.Н., Осипьян Ю.А.* // ФТТ. 1972. Т. 14. Вып. 12. С. 3694–3696.
[2] *Баженов А.В., Осипьян Ю.А., Штейнман Э.А.* // ФТТ. 1980. Т. 22. Вып. 2. С. 389–394.
[3] *Сальков Э.А., Тарбаев Н.И., Шепельский Г.А.* // ФТТ. 1980. Т. 22. Вып. 4. С. 1110–1113.
[4] *Баженов А.В., Красильникова Л.Л.* // ФТТ. 1984. Т. 26. Вып. 2. С. 590–592.
[5] *Изотов А.Н., Штейнман Э.А.* // ФТТ. 1986. Т. 28. Вып. 12. С. 1015–1019.
[6] *Баженов А.В., Красильникова Л.Л.* // ФТТ. 1986. Т. 28. Вып. 1. С. 235–241.
[7] *Бир Г.Л., Пикус Г.Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.
[8] *Разумова М.А., Хотяинцев В.Н.* // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 2. С. 275–277.
[9] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
[10] *Абрамов А.А., Диткин В.В., Конюхова Н.Б.* // ЖВМиМФ. 1980. Т. 20. Вып. 5. С. 1155–1173.
[11] *Blacha A., Presting H., Cardona M.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1984. Vol. 126. N 1. P. 11–21.

Киевский университет
им.Т.Г.Шевченко

Поступило в Редакцию
24 августа 1992 г.