

УДК 535.37

© 1990

РАСЩЕПЛЕНИЕ ЛИНИИ ДИСЛОКАЦИОННОГО ЭКСИТОНА В КРИСТАЛЛАХ С НЕРАВНОВЕСНЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ

Ю. С. Леликов, Ю. Т. Ребане, Ю. Г. Шретер

Показано, что возникновение серий в спектрах фотолюминесценции кристаллов германия и кремния, приготовленных методом двухстадийной деформации, можно объяснить на основе представления о сдвиге энергетического уровня дислокационного экситона, находящегося на 90° частичной дислокации, под влиянием деформационного поля соседней 30° частичной дислокации. Получена формула, связывающая положения линий в сериях с дискретным набором расстояний между частичными дислокациями, который в свою очередь определяется постоянной решетки дефекта упаковки.

В недавних работах [1-4], посвященных исследованию фотолюминесценции кристаллов кремния и германия, приготовленных методом двухстадийной пластической деформации [5, 6], сообщалось о наблюдении в таких кристаллах серий линий в области спектра, соответствующей дислокационной люминесценции.

Положение линий в сериях описывалось различными эмпирическими формулами. Так, в [1, 2] для случая кремния была предложена формула

$$E_n = E(D4) - c(14 - n)^2, \quad (1)$$

где E_n — энергия линии дислокационной люминесценции, c — некоторая константа, а n принимает значения от 1 до 14.

Другая эмпирическая формула была использована для определения положений линий в серии в работах [3, 4]

$$E_n = E^* - \alpha/\beta^n, \quad (2)$$

где E^* , α , β — эмпирические параметры, а n принимает целые положительные значения.

Однако причины, обуславливающие возникновение серий в кристаллах, подвергнутых двухстадийной деформации, остаются до сих пор невыясненными. В настоящей работе предлагается возможное объяснение причин возникновения серий линий в таких кристаллах и получена общая формула, описывающая положения линий в сериях как в кремнии, так и в германии с единых позиций. (Предварительное сообщение об идее данного объяснения было сделано в обзорном докладе [7]).

Известно, что основным типом дислокаций в Si и Ge являются 60° дислокации, которые расщеплены на 90° и 30° частичные дислокации, разделенные дефектом упаковки (см., например, [5]). Равновесное расстояние между частичными дислокациями r_0 определяется минимумом суммарной энергии упругих полей частичных дислокаций и поверхностной энергии дефекта упаковки. Под действием сильного сдвигового напряжения, приложенного на второй стадии деформации, 60° дислокации начинают двигаться в плоскостях скольжения, эквивалентных (111). Существенно, что подвижность 20° и 90° частичных дислокаций оказывается различной [8]. Это приводит к тому, что для движущейся дислокации существует новая равновесная ширина дефекта упаковки r'_0 . В зависимости от

порядка следования 30° и 90° частичных дислокаций r'_0 может оказаться как больше, так и меньше r_0 , и, кроме этого, абсолютная величина r'_0 зависит от того, в какой именно из плоскостей, эквивалентных (111), лежит данная дислокация. Поскольку структура дефекта упаковки обладает определенной двумерной решеткой, то расстояния r'_0 между частичными дислокациями могут принимать только дискретные значения

$$r_n = r_0 + na_{sf}, \quad (3)$$

где n — положительное или отрицательное целое число; a_{sf} — минимальный шаг изменения r'_0 , определяемый структурой двумерной решетки дефекта упаковки и связанный с постоянной объемной решетки a_0 соотношением $a_{sf} = (3/8)^{1/2} a_0$.

После снятия нагрузки на второй (холодной) стадии деформации 60° дислокации остаются замороженными в неравновесных состояниях с расстояниями $r'_0 = r_n$ между частичными дислокациями.

Различными r_n мы будем ниже сопоставлять различные линии E_n в дислокационной люминесценции.

В отожженных кристаллах преобладают дислокации с равновесной шириной дефекта упаковки $r_0 = 65 \text{ \AA}$ (Si) и $r_0 = 50 \text{ \AA}$ (Ge) [9], которым мы сопоставим линии с энергией E_0 , остающиеся в спектрах люминесценции после отжига. Для кремния $E_0 = 997 \text{ мэВ}$ (линия D4), а для германия $E_0 = 513 \text{ мэВ}$.

Недавно было показано, что линия E_0 в германии обусловлена рекомбинацией дислокационного экситона, локализованного на 90° частичной дислокации [10]. Температурное поведение линии E (D4) в кремнии также дает основания предполагать, что эта линия представляет собой излучение дислокационного экситона, локализованного на 90° частичной дислокации [11].

Влияние деформационного поля соседней 30° частичной дислокации на энергию дислокационного экситона можно учесть по теории возмущений. Величина этого возмущения $\Delta E(r'_0)$ пропорциональна $1/r'_0$, так как деформационное поле 30° частичной дислокации спадает обратно пропорционально расстоянию до ее оси r . В рамках изотропного гармонического континуального приближения отличные от нуля компоненты тензора $\epsilon_{ik}^{30^\circ}(r)$, записанные в цилиндрических координатах, связанных с осью 30° частичной дислокации, равны

$$\begin{aligned} \epsilon_{rz}^{30^\circ}(r, \theta) &= \epsilon_{\theta z}^{30^\circ}(r, \theta) = \frac{b_s}{4\pi} \frac{1}{r}, \\ \epsilon_{r\theta}^{30^\circ}(r, \theta) &= \epsilon_{\theta r}^{30^\circ}(r, \theta) = \frac{b_s}{4\pi} \frac{1}{(1-\nu)} \frac{\cos \theta}{r}, \\ \epsilon_{rr}^{30^\circ}(r, \theta) &= \epsilon_{\theta\theta}^{30^\circ}(r, \theta) = -\frac{b_s}{4\pi} \frac{(1-2\nu) \sin \theta}{(1-\nu) r}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $b_s^{30^\circ}$, $b_z^{30^\circ}$ — краевая и винтовая компоненты вектора Бюргера 30° частичной дислокации, связанные с постоянной решетки a_0 соотношениями $b_s = a_0/\sqrt{24}$ и $b_z = a_0/\sqrt{8}$; ν — коэффициент Пуассона; угол θ отсчитывается от плоскости скольжения дислокации, а ось z направлена вдоль оси дислокации.

Сдвиг уровня дислокационного экситона, локализованного вблизи 90° частичной дислокации в поле $\epsilon_{ik}^{30^\circ}(r)$, может быть найден по формуле

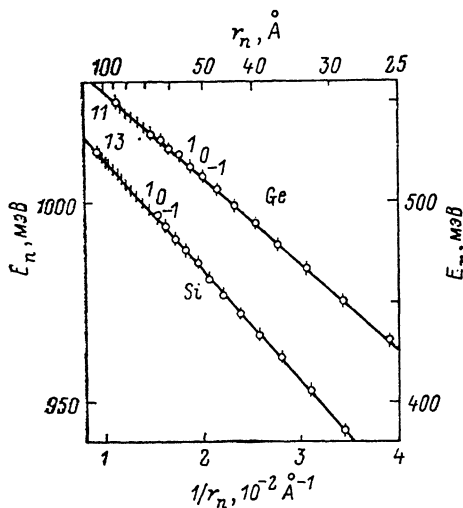
$$\Delta E(r'_0) = \sum_{ik} D_{ik}^{ex} \epsilon_{ik}^{30^\circ}(r'_0, 0), \quad (5)$$

D_{ik}^{ex} — тензор деформационного потенциала дислокационного экситона. Поскольку дислокационный экситон в германии и кремнии удовлетворительно описывается в рамках метода эффективной массы [7, 11], то деформационный потенциал D_{ik}^{ex} может быть выражен через деформаци-

нные потенциалы одномерных электронов D_{ik}^e и дырок D_{ik}^h , связанных в деформационном поле 90° частичной дислокации

$$D_{ik}^x = D_{ik}^e + D_{ik}^h \quad (6)$$

Деформационные потенциалы D_{ik}^e и D_{ik}^h в свою очередь определяются деформационными потенциалами объемных электронов и дырок, так как одномерные деформационные зоны 90° частичных дислокаций в германии и кремнии также могут быть описаны в рамках метода эффективной массы [11-13]. Однако точный расчет D_{ik}^e и D_{ik}^h представляет собой сложную задачу, поскольку требует вычисления матричных элементов тензора объемного деформационного потенциала на волновых функциях поперечного движения для одномерных дислокационных электронов и дырок, которые рассчитываются лишь численно вариационным методом [12, 13].



Поэтому для целей настоящей статьи мы ограничимся грубой оценкой D_{ik}^x , справедливой по порядку величины, и примем $D_{ik}^x \approx E_n$, где E_n — максимальный из деформационных потенциалов объемных носителей.

Зависимость энергетического положения линий в сериях дислокационной люминесценции в Si и Ge от обратной ширины дефекта упаковки.

Точки — экспериментальные данные для бесконечной серии в Si [2] и в Ge [4]. Номера у точек обозначают соответствующие n в формуле (3). Пересечения вертикальных штрихов с прямой указывают положения линий согласно формулам (3), (8). Точка $n=11$ для Si восстановлена по ТА-пестрению. Точка $n=13$ (Si) соответствует линии D6, а $n=11$ (Ge) — линии $E=550$ мэВ.

Тогда для сдвига уровня дислокационного экситона ΔE в деформационном поле $\epsilon_{ik}^{30^\circ}$ в соответствии с формулами (4), (5) получим оценку

$$\Delta E(r'_0) \approx E_n b^{30^\circ} / 4\pi r'_0, \quad (7)$$

где b^{30° — модуль вектора Бюргерса 30° частичной дислокации $b^{30^\circ} = a_0 / \sqrt{6}$.

Следовательно, в рамках рассмотренной модели энергетическое положение линий экситонной люминесценции для дислокаций с различными ширинами дефектов упаковки должно описываться формулой

$$E_n = E_\infty - A / r_n, \quad (8)$$

E_∞ — энергия экситона, связанного на 90° частичной дислокации при бесконечно большой ширине дефекта упаковки; A — постоянная, по порядку величины равная $E_n b^{30^\circ} / 4\pi = E_n a_0 / 4\sqrt{6}\pi$, а r_n определяются формулой (3). Для грубой оценки A можно положить $E_n \approx 20$ эВ в германии и $E_n \approx 10$ эВ в кремнии [14]. Тогда в соответствии с приведенной выше формулой получим $A \approx 4$ эВ · Å для германия и $A \approx 2$ эВ · Å для кремния.

Отметим, что для точного расчета A необходимо учесть нелинейные эффекты, возникающие при взаимодействии упругих полей частичных дислокаций, которые перемешивают различные компоненты тензора деформации, а также могут приводить к дополнительной концентрации напряжений вблизи дислокационной линии [15]. Такой расчет представляет собой сложную задачу, выходящую за рамки настоящей статьи, и мы планируем провести его в ближайшем будущем.

Поскольку нелинейные взаимодействия уругрих полей существуют только вблизи ядер 90° и 30° частичных дислокаций, то заранее очевидно, что они могут существенно повлиять лишь на величину константы A , но не изменят общего вида формулы (8). Разумно поставить вопрос об экспериментальной проверке формулы (8) и об определении значений констант A для кремния и германия из существующих экспериментов.

На рисунке представлены зависимости положений линий в Si и Ge от обратной ширины дефекта упаковки $1/r_n$, где r_n определяется по формуле (3). Линии E_n соответствует $n=0$, а остальные линии в серии нумеруются последовательно в порядке возрастания их энергии. Если формула (8) правильна, то построенные таким образом точки должны лечь на прямую. Экспериментальные значения энергий линий в сериях хорошо укладываются на прямые в координатах $E_n, 1/r_n$, что является экспериментальным подтверждением справедливости формулы (8).

Кроме указанных серий, в кристаллах с неравновесными дислокациями наблюдались дополнительные линии: в кремнии линия с энергией $E=1012.6$ мэВ ($D6$) [1, 2], в германии линия $E=550$ мэВ [3, 4]. Расчет по формуле (8) показал, что их можно также включить в серии, приписав им соответственно номера $n=13$ и $n=11$ (см. рисунок).

Отсутствие в экспериментальных спектрах линий с $n=1-12$ в кремнии и с $n=6-10$ в германии, по-видимому, обусловлено малой концентрацией дислокаций с соответствующими ширинами дефектов упаковки, что подтверждается исследованиями с помощью электронной микроскопии [6].

Из проведенных через экспериментальные точки прямых (см. рисунок) можно определить параметры $A=4340$ мэВ·Å, $E_\infty=598.9$ мэВ для германия и $A=2790$ мэВ·Å, $E_\infty=1038.8$ мэВ для кремния.

Таким образом, полученные экспериментальные величины A для германия и кремния согласуются с приведенной выше грубой оценкой, а отношение констант A для Ge и Si соответствует отношению констант деформационных потенциалов E_u для этих полупроводников [14].

Все вышесказанное относилось к чистым полупроводникам. В случае легированных полупроводников следует ожидать осаждения примесей на дефекте упаковки, что должно приводить вследствие эффекта Сузуки [16] к изменению равновесной ширины дефекта упаковки r_0 и сдвигу серии линий как целого в соответствии с формулами (3), (8).

Список литературы

- [1] Sauer R., Weber J., Stolz J., Weber E. R., Kusters K. H., Alexander H. // Appl. Phys. A. 1985. V. 36. N 1. P. 1—13.
- [2] Sauer R., Kisielowski-Kemmerich Ch., Alexander H. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. N 10. P. 1472—1476.
- [3] Izotov A. N., Kolyubakin A. I., Shevchenko S. A., Steinman E. A. // Proc. 8th Int. School on Defects in Crystals. 1988. P. 203—211.
- [4] Изотов А. Н., Колубякин А. И., Шевченко С. А., Штейнман Э. А. // ДАН СССР. 1989. Т. 305. № 5. С. 1104—1106.
- [5] Wessel K., Alexander H. // Phil. Mag. 1977. V. 35. N 8. P. 1523—1536.
- [6] Gottschalk H. // J. Physique. 1979. V. 40. N 1. C6—127.
- [7] Lelikov Yu. S., Rebane Yu. T., Shreter Yu. G. // Inst. Phys. Conf. Ser. 1989. N 104. P. 119—129.
- [8] Alexander H., Kisielowski-Kemmerich C., Swalski A. T. // Phys. St. Sol. (a). 1987. V. 104. N 1. P. 183—192.
- [9] Cockayne D. J. H., Hons A. // J. Physique. 1979. V. 40. C6—11.
- [10] Леликов Ю. С., Ребане Ю. Т., Шретер Ю. Г. // Тез. докл. XI Всес. конф. по физике полупроводников. 1988. Т. 3. С. 95—96.
- [11] Клевова Т. В., Молоцкий М. И. // ФТП. 1986. Т. 20. № 3. С. 472—476.
- [12] Winter S. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 90. N 1. P. 298—303.
- [13] Winter S. Electron—Strain Interaction in Crystals with Static Strain Fields. Umea University, Sweden, 1978. 138 p.
- [14] Баранский П. И., Ключков В. П., Потыкевич И. В. Полупроводниковая электроника. Справочник. Киев, 1975.
- [15] Friedel J. Dislocations. Pergamon Press, 1964. 668 p.
- [16] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М., 1972.