

© 1992

## ТИПЫ ДИСЛОКАЦИОННОГО МЕЖЗОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ПРЯМОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ С КРАЕВЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ

*М. А. Разумова, В. Н. Хотяинцев*

Выполнен теоретический анализ спектров дислокационного межзонного поглощения, обусловленного дальнедействующей частью взаимодействия электронов и дырок с дислокациями: полем деформаций, электрическим полем линейного заряда или пьезоэлектрическим полем. Расчет проведен в квазиклассическом приближении, получены критерии применимости результатов. Установлены и изучены основные типы дислокационного межзонного поглощения в квазиклассической области исходя из механизмов взаимодействия с дислокацией и механизмов поглощения света: деформационное классическое, деформационное туннельное и электротуннельное (пьезотуннельное). В спектре межзонного поглощения при наличии дислокаций выделяются три участка: фундаментальное поглощение, уширенный край фундаментального поглощения (коэффициент поглощения зависит от структуры дислокационного ансамбля и нелинейно зависит от плотности дислокаций) и дислокационное крыло поглощения (линейная зависимость от плотности дислокаций и степенная — от частоты в квазиклассической области). Для каждого типа поглощения установлены характерные энергии, показатели степени частотной и концентрационной зависимостей, найдены условия, при которых данный тип поглощения доминирует.

К настоящему времени накоплен довольно обширный экспериментальный материал по межзонному поглощению света в прямозонных полупроводниках с дислокациями. Так, при введении дислокаций [1-5] наблюдалось дополнительное поглощение, граница которого лежит на 0.2—0.3 эВ ниже края фундаментального поглощения (ФП). Поглощение этого типа будем называть дислокационным поглощением (ДП).

Теоретически ДП исследовано недостаточно. Экситонное поглощение, поглощение типа «глубокий дислокационный уровень—зона проводимости» и некоторые другие рассмотрены в работах [6-8]. С настоящей работой частично перекрывается по постановке задачи работа [9], однако существенно отличаются метод расчета и результаты. Поглощение, обусловленное заряженными дислокациями в GaAs при сильном экранировании, экспериментально и теоретически исследовалось в [10].

Как показано ниже, часть спектра ДП может быть рассчитана в квазиклассическом приближении. Дело в том, что вклады областей с плавным дислокационным рельефом и вклады сильно неоднородных областей вблизи дислокационных линий спектрально разделены. Целью настоящей работы является теоретический анализ квазиклассической части спектра ДП. Вследствие наложения вкладов от большого числа дислокационных зон и неоднородного уширения квантование движения носителей для этой части спектра не проявляется.

Рассмотрим прямозонный полупроводник с простыми изотропными зонами, который в отсутствие дислокаций имеет идеальный разрешенный край межзонного поглощения вида

$$K(\omega) = R_0 \sqrt{\hbar\omega - \varepsilon_g} \quad (1)$$

при  $\hbar\omega > \varepsilon_g$  и  $K(\omega) = 0$  при  $\hbar\omega < \varepsilon_g$ , где  $\varepsilon_g$  — ширина запрещенной зоны,  $R_0$  — известная константа [11]. Кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой не учитываем. Влияние поля дислокаций будем учитывать в однозонном приближении, поскольку актуальной является область частот  $|\hbar\omega - \varepsilon_g| \ll \varepsilon_g$ .

При движении электронов и дырок в плавных полях  $U_c(\mathbf{r})$  и  $U_v(\mathbf{r})$  для вычисления локального значения коэффициента поглощения  $K(\omega, \mathbf{r})$  можно воспользоваться квазиклассическим выражением для функции Грина [12], которое содержит производные  $U_c(\mathbf{r})$ ,  $U_v(\mathbf{r})$  потенциала различных порядков. Если условия применимости квазиклассического приближения выполняются, то по отношению к вкладу производных данного порядка вклад производных следующего порядка является, вообще говоря, малой поправкой. Поэтому далее будем учитывать лишь производные того порядка, которые дают первый неисчезающий вклад в рассматриваемый эффект, а из условия малости поправочных членов получим критерий применимости приближения. Сохраняя производные порядка не выше первого, выражения для коэффициента поглощения можно привести к виду

$$K(\omega, \mathbf{r}) = \frac{R_0}{2\pi} \int_0^\infty d\tau \sqrt{\tau} \int_{-\infty}^\infty ds \exp \left\{ is(\hbar\omega - \varepsilon_g - \tau - U_{cv}) - \frac{is^3}{12} \beta (\nabla U)^2 \right\}, \quad (2)$$

где  $U_{cv}$  и  $\nabla U$  — функции от  $\mathbf{r}$ ,  $U_{cv} = U_c(\mathbf{r}) - U_v(\mathbf{r})$ . Здесь принято условное обозначение  $\beta (\nabla U)^2 = \beta_c (\nabla U_c)^2 + \beta_v (\nabla U_v)^2$ , где  $\beta = \beta_c + \beta_v$ ,  $\beta_c = \hbar^2/2m_c$ ,  $\beta_v = \hbar^2/2m_v$ ,  $m_c$  и  $m_v$  — эффективные массы электронов и дырок.

Таким образом, возможны следующие два предельных случая поглощения в плавном поле. Если  $U_{cv}$  не мало, то в (2) можно пренебречь вкладом всех производных, т. е. считать кристалл локально-однородным. Движение носителей в этом случае рассматривается классически, поэтому такое поглощение будем называть классическим. Его механизм — поглощение в условиях локального изменения ширины запрещенной зоны.

Если  $U_{cv}$  равно нулю (или мало), то в (2) необходимо учесть только первые производные от потенциала, т. е. локально аппроксимировать потенциал линейным. Такое поглощение будем называть туннельным. Его механизм — поглощение с туннелированием в условиях локального изгиба зон.

## 2. Механизмы взаимодействия носителей с дислокацией. Типы дислокационного поглощения

Будем интересоваться дальнедействующей частью взаимодействия носителей с дислокацией. Возможные механизмы такого взаимодействия в настоящее время известны. Оно может быть обусловлено полем деформаций либо электрическим полем дислокации, которые будем учитывать в приближении сплошной среды. Компоненты тензора деформаций прямолинейной краевой дислокации в цилиндрической системе координат, связанной с дислокационной линией, убывают как  $1/r$ . Поэтому деформационный потенциал для невырожденных зон может быть записан в виде

$$U_{cc}(\mathbf{r}) = \Delta_{cc} b f(\varphi)/r, \quad (3)$$

где  $\Delta_{cv}$  — константа размерности энергии,  $b$  — модуль вектора Бюргерса, а  $f(\varphi)$  — функция с нулевым средним, которую можно считать нормированной условием

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f^2(\varphi) d\varphi = 1. \quad (4)$$

В частности, в кубическом кристалле для простых изотропных зон в приближении изотропной упругой среды

$$U_i = \Delta_i b \cos \varphi / r, \quad \Delta_i = D_i (1 - 2\nu_p) / 2\pi (1 - \nu_p), \quad (5)$$

где  $i=c, v$ ,  $D_c$  и  $D_v$  — константы деформационного потенциала для зоны проводимости и валентной зоны,  $\nu_p$  — коэффициент Пуассона. В формуле (3) в этом случае следует положить  $\Delta_{cv} = \Delta_c - \Delta_v$ ,  $f(\varphi) = \cos \varphi$ .

Электрическое поле дислокации может быть связано с наличием линейного заряда (заряженная дислокация), а в пьезоэлектриках — с пьезоэффектом. И в том, и в другом случаях электрическое поле без учета экранирования убывает как  $1/r$ . Поэтому для электрически активной дислокации полагаем

$$\nabla U = eE(r, \varphi) = ebE(b, \varphi)/r. \quad (6)$$

Для заряженной дислокации с зарядом  $q_0$  на единицу длины в приближении изотропной диэлектрической проницаемости имеем

$$bE(b, \varphi) = 2q_0 e_r / \varepsilon_l, \quad (7)$$

где  $e_r$  — цилиндрический орт,  $\varepsilon_l$  — продольная статическая диэлектрическая проницаемость. Расчеты пьезоэлектрических полей дислокации выполнены в работах [13, 14]. Электрическое поле создают не все типы дислокаций.

Таким образом, в зависимости от основного механизма взаимодействия носителей с дислокацией — через деформационный потенциал ( $d$ ) или через электрическое поле ( $e$ ), а также от того, является ли поглощение классическим ( $c$ ) или туннельным ( $t$ ), можно выделить три типа межзонного дислокационного поглощения в квазиклассической области: деформационное классическое ( $dc$ ), деформационное туннельное ( $dt$ ) и электротуннельное (пьезотуннельное) ( $et$ ).

### 3. Поглощение света ансамблем дислокаций

При расчете ДП, вообще говоря, необходимо учитывать, что оно обусловлено не просто отдельными дислокациями, а происходит в поле ансамбля дислокаций определенной структуры. Иначе невозможно описать непрерывный переход спектра ДП в спектр ФП.

Не ставя себе целью исследовать все типы дислокационных ансамблей, мы ограничимся здесь задачей лишь очертить границы влияния структуры ансамбля на спектр ДП в принципе. Как будет показано ниже, структура дислокационного ансамбля в действительности является существенной лишь в определенной переходной области вблизи  $\hbar\omega = \varepsilon_g$ . С длинноволновой стороны от нее, в запрещенной зоне, работает механизм поглощения в поле отдельных центров, а с коротковолновой, в глубине ФП, механизм поглощения соответствует кристаллу, который практически однороден, но вблизи каждой дислокации некоторая область в поглощении не участвует.

В качестве основной рассмотрим модель полностью хаотического расположения дислокаций, причем для определенности будем считать, что все дислокации параллельны и векторы Бюргерса их одинаковы (с точностью до знака).

Как будет видно из дальнейшего, для классического поглощения ориентация дислокаций в действительности не имеет значения.

Модель хаотического расположения дислокаций дополняет «цилиндрическая модель»: кристалл эффективно заменяется совокупностью цилиндров сечением  $1/\sigma$ , на оси каждого из которых находится единственная дислокация. При этом через радиус цилиндра  $R_\sigma = (\pi\sigma)^{-1/2}$ , зависящий от плотности дислокаций, неявно учитывается наличие в кристалле многих дислокаций одновременно. Аналогичная модель использовалась и при изучении рассеяния рентгеновских лучей [15]. Сопоставление результатов для двух моделей позволяет судить как о влиянии хаотичности в расположении дислокаций, так и о границах влияния структуры ансамбля вообще. Для деформационного поглощения результаты в цилиндрической модели получены в работе [16].

#### 4. Усреднение по случайному расположению дислокаций

В цилиндрической модели коэффициент поглощения находится путем усреднения локального значения по сечению цилиндра

$$K(\omega) = \sigma \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{R_\sigma} K(\omega, r) r dr, \quad (8)$$

где  $K(\omega, r)$  — локальный коэффициент поглощения (2) в поле отдельной дислокации (3) или (6).

В модели хаотического расположения дислокаций локальное значение  $K(\omega, r)$  (2) определяется суммарным полем всех дислокаций, а коэффициент поглощения находится в результате усреднения по случайному расположению дислокаций  $K(\omega) = \overline{K(\omega, r)}$ . В случае  $dc$ -поглощения из (2) получаем

$$K(\omega, r) = \frac{R_0}{2\pi} \int_0^\infty d\tau \sqrt{\tau} \int_{-\infty}^\infty ds \exp\{is(\hbar\omega - \varepsilon_g - \tau)\} \overline{\exp(-isU_{cv})}. \quad (9)$$

Среднее значение экспоненты в (9) можно вычислить, как и в [15, 17, 18]

$$\begin{aligned} \overline{\exp(-isU_{cv})} &= \exp(-T(s)), \\ T(s) &= \sigma \int_0^\infty (1 - \exp\{-isU_{cv}(r)\}) d^2r, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $U_{cv}(r)$  — уже потенциал отдельной дислокации (3).

В случае туннельного поглощения из (2) следует

$$K(\omega, r) = \frac{R_0}{2\pi} \int_0^\infty d\tau \sqrt{\tau} \int_{-\infty}^\infty ds \exp\{is(\hbar\omega - \varepsilon_g - \tau)\} \overline{\exp\left\{-\frac{is^3}{12} \beta (\nabla U)^2\right\}}. \quad (11)$$

Для вычисления среднего в интеграле (11) необходимо факторизовать вклады отдельных дислокаций. Применим для этого преобразование, аналогичное используемому в работе [12]

$$\overline{\exp\left\{-\frac{is^3}{12} \beta (\nabla U)^2\right\}} = \frac{3s}{i\pi} \int \exp(3isq^2) \overline{\exp(is^2 \sqrt{\beta} \mathbf{q} \nabla U)} d^2q. \quad (12)$$

При этом учтено, что все дислокации параллельны. Величину  $\exp(is^2 \sqrt{\beta} \mathbf{q} \nabla U)$  можно теперь вычислить по формулам (10), заменив  $U$  на  $\mathbf{q} \nabla U$

$$\exp(is^2 \sqrt{\beta} \mathbf{q} \nabla U) = \exp(-T(s, \mathbf{q})),$$

$$T(s, \mathbf{q}) = \sigma \int_0^\infty (1 - \exp\{-is^2 \sqrt{\beta} \mathbf{q} \nabla U(r)\}) d^2 r. \quad (13)$$

Для  $dc$ -поглощения при вычислении интеграла (10), так же как и в [15, 17, 18], возникает логарифмическая расходимость при интегрировании по  $r$ . То же относится к интегралу (13) для  $et$ -поглощения. Расходимость устраняется заменой верхнего предела интегрирования на характерный размер кристалла, причем удерживается главный член разложения по параметру

$$L_N = \ln \sqrt{N} \gg 1, \quad (14)$$

где  $N$  порядка полного числа дислокаций в кристалле. Процедура выделения главного члена описана в [15].

В результате для  $et$ - и  $dc$ -поглощения величина  $T(s, \mathbf{q})$  оказывается пропорциональной интегралу

$$\int [\mathbf{q} \nabla U(b, \varphi)]^2 d\varphi, \quad (15)$$

который определяет зависимость  $T$  от направления  $\mathbf{q}$ . В системе координат, связанной с главными осями тензора

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} E_i(b, \varphi) E_j(b, \varphi) d\varphi, \quad i, j = x, y, z, \quad (16)$$

$T(s, \mathbf{q})$  для  $et$ -поглощения можно представить в виде

$$T(s, \mathbf{q}) = T(s, q) \lambda(\psi), \quad \lambda(\psi) = 1 + \kappa \cos 2\psi, \quad (17)$$

где

$$\kappa = (\overline{E_x^2} - \overline{E_y^2}) / \overline{E^2}, \quad \overline{E^2} = \overline{E_x^2} + \overline{E_y^2}.$$

Здесь  $\overline{E_x^2}$ ,  $\overline{E_y^2}$  — главные значения тензора (16), а  $\psi$  — угол между  $\mathbf{q}$  и одной из его главных осей.

Таким образом, параметр  $\kappa$  ( $|\kappa| \leq 1$ ) является специфической характеристикой анизотропии электрического поля дислокации для данного случая. Для поля заряженной дислокации (7)  $\kappa = 0$  и  $T(s, \mathbf{q})$  не зависит от направления  $\mathbf{q}$ . В простейших предположениях относительно симметрии и без учета обратного пьезоэффекта пьезополе дислокации имеет вид

$$E(r, \varphi) \sim \frac{\sin 2\varphi}{r} e_\varphi, \quad (18)$$

где  $e_\varphi$  — цилиндрический орт. Тогда  $\kappa = 0$ , хотя поле (18) и не обладает аксиальной симметрией.

Чтобы не загромождать изложение, в случае  $dt$ -поглощения мы ограничимся рассмотрением поля (5), для которого интеграл (15) не зависит от направления  $\mathbf{q}$ .

## 5. Основные результаты

Вычисления показывают, что для каждого из трех типов ДП коэффициент поглощения может быть представлен в виде свертки комбинированной плотности состояний идеального кристалла с некоторой функцией  $\overline{F}$ , описывающей «уширение» отдельного перехода, обусловленное дислокациями

$$K(\omega) = R_0 \sqrt{\Gamma} \int_0^{\infty} d\varepsilon' \sqrt{\varepsilon'} F(\Omega - \varepsilon'), \quad \Omega = (\hbar\omega - \varepsilon_g)/\Gamma, \quad (19)$$

причем функция  $F(\Omega)$  и уширение  $\Gamma$  являются характерными для данного типа поглощения величинами. Уширение  $\Gamma$  в свою очередь выражается через некоторую характерную энергию  $\varepsilon$ , показатель степени  $\nu$  и безразмерную плотность дислокаций  $c = \pi \sigma b^2$  соотношением вида  $\Gamma \sim c^\nu \varepsilon$ ,

$$\Gamma_{dc} = (L_N c)^{1/2} \varepsilon_{dc}, \quad \Gamma_{dt} = c^{1/2} \varepsilon_{dt}, \quad \Gamma_{et} = (L_N c)^{1/2} \varepsilon_{et}, \quad (20)$$

где

$$\varepsilon_{dc} = |\Delta_{cv}|, \quad \varepsilon_{dt} = (\beta_c b^{-2} \Delta_c^2 + \beta_t b^{-2} \Delta_t^2)^{1/2}, \quad \varepsilon_{et} = (\beta e^2 \bar{E}^2 / 6)^{1/2}. \quad (21)$$

Функции  $F(\Omega)$  имеют вид

$$F_{dc}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp\{is\Omega - s^2(1 - \ln|s|/L_N)/2\}, \quad (22)$$

$$F_{dt}(\Omega) = -\frac{3}{\sqrt{\pi}} \frac{d}{d\Omega} \int_0^{\infty} dq \sqrt{q} \exp\{-(3q^2 + \Omega)^2/4q\}, \quad (23)$$

$$F_{et}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\psi F_{et}(\Omega, \psi), \quad (24)$$

где

$$F_{et}(\Omega, \psi) = \frac{1}{\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} ds s \int_0^{\infty} dq q \exp\{is\Omega + isq^2 - s^4 q^2 \lambda(\psi)(1 - \ln(s^2 q)/L_N)\}. \quad (25)$$

Известно, что функция вида (22) описывает форму линий углового спектра рассеяния рентгеновских лучей в кристалле с дислокациями [15], а также так называемое классическое концентрационное уширение дислокационных уровней [17, 18]. Однако в нашем случае величина уширения  $\Gamma_{dc}$  (20) имеет другой смысл. Она характеризует разброс локальных значений ширины запрещенной зоны.

Подробные результаты для цилиндрической модели мы не выписываем отдельно. Они обсуждаются в следующем разделе параллельно с результатами анализа выражений (19)–(25).

## 6. Обсуждение результатов

Как видно из формулы (19), для каждого типа ДП вид спектра определяется величиной уширения  $\Gamma$  (20), а коэффициент поглощения в единицах  $R_0 \sqrt{\Gamma}$  представляет собой универсальную функцию безразмерной частоты  $\Omega = (\hbar\omega - \varepsilon_g)/\Gamma$  (для  $dc$ - и  $et$ -поглощения — еще и безразмерного  $L_N$  (14)). Для цилиндрической модели ситуация аналогична, причем справедливы и формулы (20), но с единственным отличием: в них следует положить  $L_N = 1$ .

Множитель  $\lambda(\psi)$  в формуле (25) можно исключить, переопределив параметр  $\Gamma_{et}$ :  $\Gamma_{et} \rightarrow \Gamma_{et} [\lambda(\psi)]^{1/2}$  и усредняя затем коэффициент поглощения по  $\psi$ . Таким образом, влияние анизотропии электрического поля (исключая случай крайне сильной анизотропии  $\kappa \approx 1$ , который представляется мало реалистичным) является небольшим. В спектре межзонного поглощения кристалла с дислокациями выделяются три существенно разных участка.

а)  $\hbar\omega - \varepsilon_g \gg \Gamma$ . Это область фундаментального поглощения. Асимптотика коэффициента поглощения (19) при  $\Omega \gg 1$  соответствует коэффициенту поглощения идеального кристалла (1) за вычетом малых добавок, пропорциональных плотности дислокаций  $\sigma$  и убывающих по мере продвижения в глубь области ФП.

б)  $|\hbar\omega - \varepsilon_g| \leq \Gamma$ . Эту область, существенно формируемую дислокациями, естественно называть уширенным краем фундаментального поглощения. Собственно, ширина этой области и есть уширение  $\Gamma$ .

Проще всего проанализировать значение коэффициента поглощения на частоте, соответствующей краю ФП идеального кристалла  $\hbar\omega_g = \varepsilon_g$

$$K(\omega_g) = R_0 \sqrt{\Gamma} \xi \sim \sigma^{1/2}, \quad (26)$$

где  $\xi$  — числовой множитель порядка единицы: для хаотического расположения дислокаций  $\xi_{dc} = 0.41$ ,  $\xi_{dt} = 0.23$ ,  $\xi_{et} = 0.32$ , для цилиндрической модели  $\xi_{dc} = 0.51$ ,  $\xi_{dt} = 0.31$ ,  $\xi_{et} = 0.34$ . Из формул (26) и (20) видно, что коэффициент поглощения в области уширенного края нелинейно зависит от плотности дислокаций. Это является проявлением воздействия на носители нескольких или даже многих дислокаций одновременно, создающих в данной точке кристалла поля сравнимой величины. Естественно, что коэффициент поглощения в этой области зависит не только от типа поглощения, но и от структуры дислокационного ансамбля. Так, хаотическому расположению дислокаций и цилиндрической модели отвечают разные значения  $K(\omega_g)$  (26) как за счет разных значений коэффициента  $\xi$ , так и за счет отсутствия множителя  $l_k^*$  для цилиндрической модели в выражениях для  $\Gamma$  (20).

в)  $\varepsilon_g - \hbar\omega \gg \Gamma$ . Отличительной особенностью этой области является линейная зависимость коэффициента поглощения от плотности дислокаций (для заряженных дислокаций — при условии постоянства линейного заряда). Будем называть эту часть спектра дислокационным крылом поглощения. Линейная зависимость от  $\sigma$  свидетельствует о том, что поглощение происходит независимо в поле каждой отдельной дислокации. От структуры дислокационного ансамбля оно не зависит и может быть найдено в однодислокационном приближении. Как и должно быть, вычисление асимптотик выражений для коэффициента поглощения в пределе  $(-\Omega) \gg 1$  для хаотического расположения дислокаций приводит в точности к таким же формулам для дислокационного крыла, как и цилиндрическая модель, которая в данной области частот предполагает поглощение света отдельными дислокациями

$$K(\omega) = R_0 \sqrt{\varepsilon} \eta (\varepsilon'(\varepsilon_g - \hbar(\omega))^\delta), \quad (27)$$

где  $\varepsilon$  — характерные энергии (21);  $\delta$  — показатели степени, связанные с показателями  $\nu$  (20) соотношением

$$\nu^{-1} = \delta + 1/2, \quad (28)$$

т. е.  $\delta_{dc} = 3/2$ ,  $\delta_{dt} = 1$ ,  $\delta_{et} = 5/2$ ,  $\eta$  — числовые коэффициенты:  $\eta_{dc} = \pi/16$ ,  $\eta_{dt} = 1/(4\sqrt{3})$ ,  $\eta_{et} = 3\pi/16$ .

Происхождение степенной асимптотики интеграла (22) детально обсуждается в [15]. Отметим только, что при  $|\Omega| \gg 1$  основной вклад в интегралы (22) и (25) вносит малая окрестность точки ветвления  $s=0$ , т. е. малые  $s$ . Тогда  $T$  (10) и (13) мало и  $\exp(-T) \approx 1 - T$ , откуда и следует линейная зависимость  $K \sim T \sim \sigma$ . Асимптотику интеграла (23) можно найти методом перевала.

Интересно, что анизотропия электрического поля дислокации не влияет на коэффициент поглощения в области крыла,  $K(\omega)$  (27) не зависит от  $\kappa$ , так же как и линейная по  $\sigma$  добавка к поглощению в области ФП. Зависит от  $\kappa$  только поглощение в области уширенного края. Таким образом, анизотропия поля

для отдельной дислокации не проявляется, а проявляется только тогда, когда поля дислокаций складываются.

Таким образом, квазиклассическая часть дислокационного крыла поглощения характеризуется степенным законом убывания коэффициента поглощения с удалением частоты от края ФП в глубь запрещенной зоны с характерным значением показателя степени для каждого типа ДП. При больших значениях  $\epsilon_g - \hbar\omega$  пределы применимости квазиклассического приближения нарушаются. Для описания этой части дислокационного крыла необходимо последовательное квантовомеханическое рассмотрение движения носителей в поле дислокации. Оценки вклада высших производных потенциала в коэффициент поглощения приводят к следующему естественному условию, определяющему длинноволновую границу квазиклассической части ДП

$$\epsilon_g - \hbar\omega \ll \epsilon^*, \quad (29)$$

где  $\epsilon^*$  — величина порядка максимальной глубины уровней носителей в поле дислокации. Эта же величина определяет положение красной границы ДП (без учета состояний оборванных связей). Таким образом, условие (29) означает, что, строго говоря, квазиклассической частью спектра ДП является меньшая его часть, примыкающая к краю ФП, хотя качественного согласия можно ожидать и в более широкой области.

В реальной ситуации одновременно имеются условия для проявления нескольких типов ДП, в частности для заряженных или пьезоактивных дислокаций — всех трех, так как деформационный потенциал и его градиент присутствуют всегда. Поэтому важно ответить на вопрос: какой из типов поглощения будет доминировать в действительности? Тщательный анализ показывает, что ответ для всех случаев является универсальным: данный тип поглощения доминирует тогда, когда соответствующий коэффициент поглощения, рассчитанный, например, по формулам (26) или (27), значительно больше, чем для других типов поглощения. В противном случае реализуется смешанный тип, причем аддитивность вкладов, конечно, отсутствует. Конкуренция  $dc$ - и  $dt$ -поглощения подробно исследована в работе [16]. Деформационное поглощение является туннельным лишь в случае почти параллельного изгиба зон

$$|(D_c - D_v)(D_c + D_v)| \ll 1. \quad (30)$$

В разных областях спектра иерархия типов поглощения может быть различной. Как видно из (27), для квазиклассической части крыла ДП отношение коэффициентов поглощения для разных типов ДП определяется характерными энергиями (21) и удалением от края ФП  $\epsilon_g - \hbar\omega$ , а от плотности дислокаций не зависит. Оценки при типичных значениях параметров дают  $\epsilon_{ic} \approx 0.1 \div 1$  эВ при  $D_{c,v} \approx 1 \div 10$  эВ,  $\epsilon_{dt} \approx 0.2 \div 1$  эВ для тех же  $D_{c,v}$ ,  $b = 3 \cdot 10^{-8}$  см и  $m = m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона;  $\epsilon_{et} \approx 0.2$  эВ при тех же  $m$  и  $b$  как для поля заряженной дислокации (6), (7) при  $q_0 \approx 0.3$   $e/b$  и  $\epsilon_t \approx 6$ , так и для пьезополя дислокации [13, 14]  $\epsilon_{et} \approx 0.2$  эВ. При очень малых массовых коэффициентах  $m \approx 0.01 m_0$  туннельные энергии  $\epsilon_{dt}$ ,  $\epsilon_{et}$  (21) возрастают примерно в 5 раз, а при  $q_0 \approx 0.03e/b$   $\epsilon_{et}$  уменьшается в 5 раз. Заметим, что полученные оценки по порядку величины близки к  $\epsilon^*$ , поэтому в квазиклассической части крыла ДП  $\epsilon/(\epsilon_g - \hbar\omega) \gg 1$ , т. е. в случае близких значений энергий  $\epsilon$  для разных типов ДП больше будет тот коэффициент поглощения, для которого показатель  $\delta$  больше:  $k_{et} > K_{da} > K_{dt}$ .

В области уширенного края, как видно из (26), иерархия типов поглощения полностью определяется величинами  $\Gamma$  (20), т. е. зависит и от энергий  $\epsilon$ , и от плотности дислокаций. Так, при  $b = 3 \cdot 10^{-8}$  см,  $\tau = 3 \cdot 10^8$  см<sup>2</sup> имеем  $c \approx 10^{-6}$ ,  $\Gamma_{et} \approx 10^{-2} \epsilon_{et}$ ,  $\Gamma_{dc} \approx 10^{-3} \epsilon_{dc}$ ,  $\Gamma_{dt} \approx 10^{-4} \epsilon_{dt}$ . Уширение  $\Gamma$  при таких значениях



плотности дислокаций может достигать нескольких миллиэлектронвольт. Отметим, что в случае равных значений  $\Gamma$  для разных типов ДП будет бóльшим в области крыла тот коэффициент, для которого показатель  $\delta$  меньше:  $K_{et} < K_{dc} < K_{dl}$ .

Обращает на себя внимание очень медленное убывание величины уширения и, особенно, коэффициента поглощения на краю ФП для электротуннельного поглощения при уменьшении плотности дислокаций:  $\Gamma_{et} \sim c^{1/3}$ ,  $K_{et}(\omega_g) \sim \sim c^{1/6}$ . Видно, что заряженные и пьезоактивные дислокации даже при низких плотностях порядка  $10^3 - 10^6 \text{ см}^{-2}$  могут оказывать заметное влияние на форму края ФП, если длина экранирования превышает среднее расстояние между дислокациями.

Результаты для хаотического ансамбля легко обобщить на случай, когда в кристалле имеется несколько различных систем дислокаций, если все они создают ДП одного типа. Величины  $T$  (10) и (13) в этом случае представляют собой суммы независимых вкладов  $T = T_1 + T_2 + \dots + T_n$  от каждой из систем дислокаций, а итоговое выражение (19) содержит эффективное уширение, которое находится по формуле

$$\Gamma^{1/\nu} = \Gamma_1^{1/\nu} + \Gamma_2^{1/\nu} + \dots + \Gamma_n^{1/\nu}. \quad (31)$$

Однако если речь идет о туннельном поглощении, то все дислокации должны быть параллельны между собой. В противном случае поле  $\nabla U$  является трехмерным и в (12) следует переходить к трехмерному интегралу по  $\mathbf{q}$ . Таким же способом можно рассмотреть ансамбль хаотически ориентированных дислокаций.

В заключение остановимся на некоторых результатах работ [2, 3, 9].

В работе [9] для квазиклассического расчета поглощения, обусловленного деформационным полем дислокаций, использована симметричная двухзонная модель полупроводника. Она характерна тем, что в данной модели деформации приводят к параллельному изгибу зон. Как следует из вышеизложенного, в этом случае деформационное поглощение является чисто туннельным, а классическое поглощение вообще отсутствует. Между тем расчет в [9] проведен в классическом приближении. Установить соответствие между результатами настоящей работы для классического поглощения и результатами работы [9] также не удается.

В работах [2, 3] частотная зависимость поглощения в области дислокационного крыла исследовалась экспериментально. Теоретически была получена оценка вида  $K(\omega) \sim (\varepsilon_g - \hbar\omega)^{-2}$  для  $dc$ -поглощения, которая в общем согласовалась с экспериментом, но экспериментальная зависимость убывала несколько быстрее. Как следует из (27), (28), в действительности коэффициент поглощения убывает для  $dc$ -поглощения как  $(\varepsilon_g - \hbar\omega)^{-3/2}$ , а для  $et$ -поглощения — как  $(\varepsilon_g - \hbar\omega)^{-5/2}$ . Поэтому можно предположить, что в [2, 3] на самом деле наблюдалось не  $dc$ -, а  $et$ -поглощение.

#### Список литературы

- [1] Баженов А. В., Осипьян Ю. А., Штейнман Э. А. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 2. С. 389—394.
- [2] Баженов А. В., Красильникова Л. Л. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 2. С. 590—592.
- [3] Баженов А. В., Красильникова Л. Л. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 1. С. 235—241.
- [4] Осипьян Ю. А., Петренко В. Ф. Физика соединений  $A^{III}B^{IV}$  / Под ред. А. Н. Гергобиани и М. К. Шейкмана. М.: Наука, 1986. 320 с.
- [5] Классен Н. В., Осипьян Ю. А. // Кристаллография. 1981. Т. 26. № 5. С. 1106—1114.
- [6] Беляевский В. И., Свиридов В. В. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 6. С. 1634—1660.
- [7] Кленова Т. В., Молоцкий М. И. // ФТП. 1986. Т. 20. № 8. С. 1496—1501.
- [8] Молоцкий М. И. // ФТТ. 1986. Т. 29. № 3. С. 838—840.
- [9] Стефанович Л. И., Фельдман Э. П. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 4. С. 1205—1212.
- [10] Vignaud D., Farvacque J. L. // J. Appl. Phys. 1989. V. 65. N 3. P. 1261—1264.

- [11] Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.
- [12] Бонч-Бруевич В. Л. Статистическая физика и квантовая теория поля. М.: Наука, 1973. С. 337—391.
- [13] Смирнова И. С. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 8. С. 2312.
- [14] Smirnova I. S. // Phys. Stat. Sol. (b). 1984. V. 126. N 1. P. 177—189.
- [15] Кривоглаз М. А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1983. 408 с.
- [16] Хотяинцев В. Н. // Динамика триплетных возбуждений в молекулярных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1989. С. 167—176.
- [17] Канер Э. А., Фельдман Э. П. // ЖЭТФ. 1971. Т. 61. № 7. С. 419—432. Киев: Наукова думка, 1989. С. 167—176.
- [18] Нашик В. Д., Потемина Л. Г. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 6. С. 2398—2412.

Киевский государственный университет  
им. Т. Г. Шевченко

Поступило в Редакцию  
19 сентября 1990 г.  
В окончательной редакции  
6 сентября 1991 г.