

© 1992

ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ, ВЫЗВАННОЕ НЕРАВНОВЕСНЫМИ ЭКСИТОНАМИ

С. Е. Вавилов, В. Г. Левандовский, Г. Е. Чайка

Рассчитывается вероятность образования дефекта Френкеля с участием экситонов, разогретых неоднородным электрическим полем. Показано, что эта вероятность зависит от величины поля и градиента E (dE/dx). Проанализированы зависимости вероятности дефектообразования от степени неравновесности функции распределения экситонов.

В целом ряде работ, появившихся в последние годы, отмечается, что в высокоомных материалах электрическое поле напряженностью $E = 10^5 \div 10^7$ В/см существенно способствует образованию новых локальных центров. Эффект наблюдается как в темноте, так и (в более значительной степени) при ионизации материала; он хорошо выражен для приповерхностной области кристалла или вблизи границы раздела.

Объяснение этого явления предложено в работах [1-5] на основе теории поляронов [6], являющейся концептуальной теорией, в которой системой со многими степенями свободы является система фононов. Было показано, что недостающая энергия, имеющаяся у системы атом + фононы, необходимая для образования дефектов, заимствуется у свободного электрона. При этом вследствие закона сохранения всей энергии системы атом + фононы + электрон при квантовых переходах эффективное образование дефекта требует наличия электрона с энергией, значительно превосходящей среднюю энергию электронного газа. Поэтому, разогревая электронный газ любым способом (электрическим полем, действием света либо еще каким-то другим), можно увеличить вероятность образования дефектов на много порядков.

Вместе с тем в [7] высказывалось мнение, что электроны (дырки) не являются единственной «легкой» подсистемой, способной эффективно участвовать в дефектообразовании. Другой такой подсистемой могут быть экситоны. В работе [8] учитывалось влияние неоднородного электрического поля на разогрев экситонного газа. Поэтому нам представляется целесообразным оценить влияние разогрева экситонного газа на дефектообразование в неметаллических кристаллах.

Расчет проведем в соответствии с методом, апробированным в [2-5]. Рассмотрим систему «диэлектрический кристалл + экситон» и вычислим вероятность перехода между двумя состояниями системы: 1) все атомы диэлектрика и более легкий атом примеси f (i -состояние) находится в узлах кристаллической решетки, экситон имеет волновой вектор k ; 2) атом f находится в междуузлии (f -состояние), занимаемый им ранее узел остается вакантным, экситон распадается на дырку, локализованную на локальном уровне вакансии, и электрон, переходящий в зону проводимости.

Для вычисления вероятности перехода W_{if} будем пользоваться следующими координатами: нормальными координатами q_x для описания всех атомов, кроме выбранного, вероятность удаления которого мы будем вычислять: тремя координатами атома f — R , описывающими движение удаляемого атома вместе с

волной смещений, окружающих его атомов, сопровождающих это движение, тремя координатами экситона \mathbf{r}_1 , электрона \mathbf{r}_2 и дырки \mathbf{r}_3 .

Волновые функции выберем в виде смещенных осцилляторных функций для собственных атомов диэлектрика $\Phi_{i n_x}(q_x - q_{x0})$, волновых функций $\varphi_l(\mathbf{R})$ примесного атома, волновых функций свободной микрочастицы для экситона и свободного электрона $\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и $\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2)$ и водородоподобной волновой функции $\psi_s(\mathbf{r}_3)$ для электрона в связанном состоянии на локальном уровне, соответствующей захвату дырки.

Вычисление вероятности атомного скачка, стимулированного электронными переходами, производится на операторе неадиабатичности в движении дефектного атома, найденного в [9]

$$\hat{H}_{\text{int}} = - \frac{\hbar^2}{2M_f} \Phi_{i \dots n_x} \frac{\partial \Phi_{k_1}(r_1)}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial \varphi_c(R)}{\partial \mathbf{R}}. \quad (1)$$

Вычисление вероятности перехода в новое состояние с квантовыми числами k_2 , s для электронов, дефектного атома f и колебаний n'_x проводится по всем переходам, при которых сохраняется разность

$$\sum_x (n'_x - n_x) = (\varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_2} + \varepsilon_s - W) / \hbar\omega,$$

где $\hbar\omega$ — энергия фонона; ε_{k_1} — энергия экситона, включающая в себя энергию его поступательного движения и внутреннюю энергию: ε_{k_2} — кинетическая энергия электрона; ε_s — энергия электрона в связанном состоянии на локальном дефекте; W — высота потенциального барьера, который преодолевает атом при скачке. Воспользовавшись результатами [3-5], можно получить вероятность перехода

$$W_{if} = \frac{\pi \hbar^2}{2M_f \omega} [J_{l_f, k_2, s; l_i, k_1}]^2 R_p, \quad (2)$$

$$R_p = (1 + 1/\bar{n})^2 I_p(z) \exp[-a(\bar{n} + 1/2)]. \quad (3)$$

Здесь I_p — бесселева функция порядка p от мнимого аргумента,

$$p = (\varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_2} + \varepsilon_s - W) / \hbar\omega,$$

$$a = \sum_x (q_{x_i}^0 - q_{x_f})^2,$$

\bar{n} — равновесное число фононов, $z = a \sqrt{\bar{n}(\bar{n} + 1)}$. Ограничимся случаем высоких температур $kT \gg \hbar\omega$ и больших смещений от положения равновесия. Тогда $z \gg \gg 1$, $z \gg p$ и

$$I_p = (2\pi z)^{-1/2} \exp(z - p^2/2z),$$

а R_p приводится к виду

$$R_p = \frac{1}{2\pi z} \exp(-(p - p_M)^2/2z), \quad (4)$$

$$p_M = \frac{z}{2} \ln(1 + 1/\bar{n}). \quad (5)$$

Последнее выражение демонстрирует зависимость вероятности скачка от энергии экситона ε_{k_1} через величину p . Следует отметить, что предэкспоненциальный интеграл $J_{l_f, k_2, s; l_i, k_1}$ также зависит от ε_{k_1} , однако, как показывают вычисления, проведенные в [3-5], эта зависимость будет более слабой, нежели экспоненциальная зависимость, проявляющаяся через R_p . В настоящем сообщении нас интересует прежде всего зависимость дефектообразования от электрического поля, поэтому мы будем считать константой $J_{l_f, k_2, s; l_i, k_1}$.

Полученная величина вероятности перехода W_{it} должна быть усреднена по всем волновым векторам высвобождающегося электрона. Считая, что этот электрон имеет близкую к нулю энергию, проведем усреднение только по волновым векторам экситона

$$\gamma = \int W_{it}(\mathbf{k}_1) f(\mathbf{k}_1, T) d\mathbf{k}_1, \quad (6)$$

где f — функция распределения экситонов. Предполагая последнюю равновесной, найдем аналогично [3, 4]

$$\gamma = C \exp\left(-\frac{W - \varepsilon_v + p_M}{kT_0}\right), \quad (7)$$

где T_0 — равновесная температура экситонного газа, ε_v — разность энергий локального уровня для дырки и энергии связи экситона.

В нашей работе [8] был рассмотрен разогрев экситонного газа неоднородным электрическим полем. Показано, что функция распределения экситонов по энергиям может быть принята равной

$$f(\varepsilon, \beta) = \frac{n(x) \left(\beta + \frac{\varepsilon k_2}{kT_0}\right)^\beta \exp\left(-\frac{\varepsilon k_2}{kT_0}\right)}{(2\pi m k T_0)^{3/2} \beta^{\beta + 3/2} \Psi\left(\frac{3}{2}, \beta + \frac{5}{2}, \beta\right)}, \quad (8)$$

где $n(x)$ — концентрация экситонов,

$$\beta = \left(\alpha E \frac{dE}{dx}\right) \frac{l^2}{8}.$$

Согласно [8], разогрев экситонного газа неоднородным электрическим полем приводит к увеличению концентрации экситонов на поверхность кристалла при $x=0$, где β достигает максимального значения, что должно проявиться в интенсивности люминесценции. Вместе с тем параллельно с этим процессом будет проходить процесс образования дефектов на поверхности кристалла. Подставляя в (6) функцию распределения (8) при $x=0$ и вычисляя интеграл приближенно методом перевала, найдем

$$\gamma \approx C_\beta \left(1 + \frac{t_1}{\beta}\right)^\beta \left(1 + \frac{t^2}{\beta}\right)^{-\beta} \exp\left[-t_2 - \frac{(W - \varepsilon_v - t_1 k T_0)^2}{2\hbar\omega k T_0}\right], \quad (9)$$

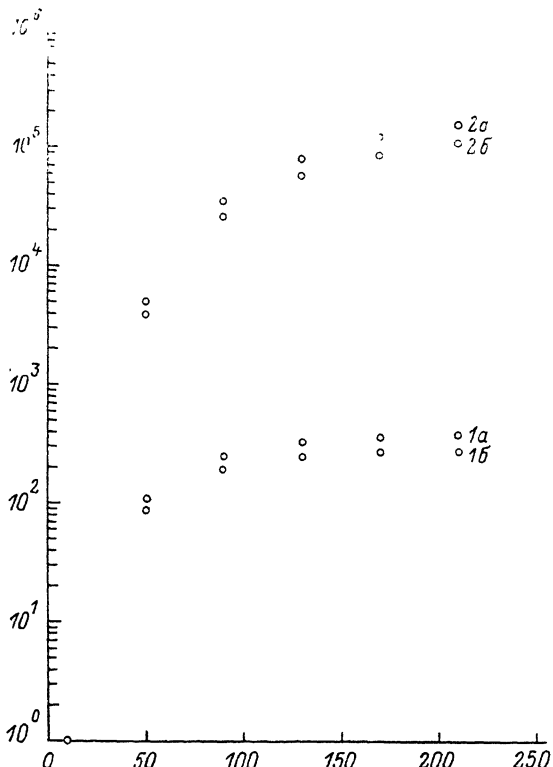
$$t_1 = \frac{W - \varepsilon_v - \hbar\omega}{kT_0} \left(1 + \frac{\hbar\omega (W - \varepsilon_v)}{(W - \varepsilon_v + kT_0 - \hbar\omega) kT_0}\right),$$

$$t_2 = \frac{1}{4} (1 + \sqrt{1 + 8\beta}).$$

Зависимость приведенной вероятности дефектообразования γ/γ_0 от β для $(W-\epsilon_v)/kT_0 = 20$ (1), 30 (2) и $\hbar\omega/kT_0 = 0.1$ (а), 0.5 (б).

Здесь в константу C_β мы включили все предэкспоненциальные множители, слабо зависящие от β .

Результат численного интегрирования в (6) для неравновесной функции распределения (8) изображен на рисунке для $(W-\epsilon_v)/kT_0 = 20$ (1), 30 (2) (что соответствует $W-\epsilon_v = 0.5, 0.75$ эВ) и $\hbar\omega/kT_0 = 0.1, 0.5$ (или $\hbar\omega = 0.0025, 0.125$ эВ). Видно, что формула (9) качественно верно описывает зависимость $\gamma(\beta)$. При этом зависимость $\gamma/\gamma_0 = f(\beta)$ ($\gamma_0 = \gamma$ при $\beta = 0$) достаточно резкая функция для $\beta = 1 \div 100$. Увеличение β на порядок в этом интервале приводит к увеличению вероятности дефектообразования на четыре-пять порядков. Это значит, что эффект может быть существенным.



Список литературы

- [1] Винецкий В. Л., Холодарь Г. А. Статистическое взаимодействие электронов и дефектов в полупроводниках. Киев: Наукова думка, 1969. С. 185.
- [2] Chaika L. E., Vinetskii V. L. // Phys. St. Sol. (b). 1980. V. 98. P. 727—734.
- [3] Винецкий В. Л., Чайка Г. Е. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 7. С. 2170—2175.
- [4] Винецкий В. Л., Чайка Г. Е. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 11. С. 3389—3395.
- [5] Винецкий В. Л., Чайка Г. Е. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 3. С. 780—783.
- [6] Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов. М., Л.: ГИТТЛ, 1951. 256 с.
- [7] Винецкий В. Л., Холодарь Г. А. Радиационная физика полупроводников. Киев: Наукова думка, 1979. 33 с.
- [8] Вавилов С. Е., Гречко Л. Г., Левандовский В. Г., Мальнев В. Л., Чайка Г. Е. // ФТП. 1990. Т. 24. № 2. С. 379—382.
- [9] Кривоглаз М. А. // ЖЭТФ. 1953. Т. 25. № 2 (8). С. 191—207.

Одесский электротехнический институт связи
им. А. С. Попова

Поступило в Редакцию
5 ноября 1991 г.