

нитных обменных взаимодействий в исследованных кристаллах  $\text{CuM}_2\text{Cl}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  и подтверждает высказанное ранее [1] предположение о важной роли антиферромагнитного взаимодействия вторых соседей вдоль тетрагональной оси, что наиболее явно проявляется с ростом давления.

## Л и т е р а т у р а

- [1] Дьяконов В. П., Зароченцев Е. В., Левченко Г. Г., Маркович В. И. ФТТ, 1987, т. 29, № 10, с. 2894—2901.
- [2] Looyestijn W. J., Klaasen T. O., Pouliis N. I. Physica, 1980, vol. 101B, N 1, p. 53—70.
- [3] Дорошев В. Д., Ковтун Н. М., Молчанов А. И., Поляков П. И., Сынков В. Г. ПТЭ, 1984, № 4, с. 195—199.
- [4] Берман И. В., Брандт Н. Б., Гинзбург Н. И. ЖЭТФ, т. 53, № 1, с. 123—133.
- [5] Галкин А. А., Дьяконов В. П., Цинцадзе Г. А., Фита И. М. ФТТ, 1976, т. 18, № 6, с. 1596—1602.
- [6] Герман Б. Р., Дьяконов В. П., Маркович В. И., Цинцадзе Г. А. ФТТ, 1984, т. 26, № 12, с. 3705—3706.
- [7] Герман Б. Р., Дьяконов В. П., Маркович В. И., Черныш Л. Ф., Цинцадзе Г. А. ФТТ, 1984, т. 26, № 11, с. 3458—3459.

Донецкий физико-технический  
институт АН УССР  
Донецк

Поступило в Редакцию  
19 января 1988 г.

УДК 546.28

Физика твердого тела, том 30, в. 6, 1988  
*Solid State Physics, vol. 30, № 6, 1988*

## ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА ДИСЛОКАЦИЯМИ С ДЕФЕКТАМИ

*M. И. Молоцкий*

В существующих теориях дислокационного поглощения (ДП) света предполагается, что при оптическом возбуждении сохраняется проекция волнового вектора вдоль оси дислокации [1—3]. Такое предположение не выполняется в непрямозонных полупроводниках. Как показали недавние расчеты [4, 5], непрямой характер запрещенной зоны в кремнии сохраняется в проекции на ось дислокации. Поэтому ДП в кремнии возможно только при передаче возбуждаемому электрону дополнительного импульса от внешнего источника, например, от точечного дефекта (ТД) или фонона. Если поглощение света обусловлено электрон-фононным взаимодействием, то его интенсивность сильно зависит от температуры. Однако опыты [6, 7] по ДП кремния указывают на слабую температурную зависимость. В то же время интенсивность ДП резко падает после отжига ТД, возникающих наряду с дислокациями, при пластической деформации кристалла. Это говорит о том, что ДП в кремнии обусловлено не электрон-фононным взаимодействием, а наличием ТД на линии дислокации.

Авторы работы [7] предположили, что роль ТД сводится к передаче электронам недостающего импульса при их рассеянии в поле ТД. В этом случае коэффициент ДП при переходах между состояниями объемных и дислокационных зон будет пропорционален комбинированной плотности состояний обеих зон

$$K_d(\omega) \propto \int g_d(E) g_b(E + \hbar\omega) dE.$$

Поскольку для объемных зон плотность состояний  $g_b(E) \propto E^{1/2}$ , а для дислокационных  $g_d(E) \propto E^{-1/2}$ , то  $K_d(\omega) \propto (\hbar\omega - E_l)$ , где  $E_l$  — расстояние между краями зон. Линейная зависимость  $K_d(\omega)$  действительно наблюдалась в ДП кремния для переходов со значениями  $E_l$  вблизи 1 и 1.1 эВ [6, 7]. Эти переходы, по-видимому, связаны с возбуждением но-

сителей, локализованных полем деформационного потенциала дислокации.

Кроме этих полос в ДП кремния также наблюдается полоса  $E_l = -0.80$  эВ [6]. Авторы [6] связывают ее с возбуждением электронов, локализованных в ядре дислокации, в состояния зоны проводимости. Однако спектральная зависимость  $K_{\text{ок}}(\omega) \propto (\hbar\omega - E_l)^{1/2}$ , полученная в [6], существенно отличается от линейной. Поэтому полоса поглощения вблизи 0.80 эВ не может быть связана с рассеянием дислокационных электронов в поле ТД. К тому же это поглощение вряд ли связано вообще с поглощением протяженных участков дислокаций. Согласно [8], протяженные участки ядра дислокации создают узкую зону с энергией  $E_g + 0.42$  эВ, в то время как при ширине запрещенной зоны  $E_g = 1.14$  эВ при  $T = 77$  К поглощение  $E_l = 0.80$  эВ обусловлено состояниями с энергией  $E_g + 0.34$  эВ.

Такие состояния обнаружены во многих опытах [9]. Они обусловлены оборванными связями ядра дислокации, искаженными в поле дефекта. Состояния сильно локализованы, и поэтому соответствующие электроны могут быть возбуждены в любую точку зоны Бриллюэна. Покажем, что их оптическое возбуждение способно объяснить основные закономерности полосы  $E_l = 0.80$  эВ. Для этого воспользуемся простой моделью глубоких центров, предложенной Луковским [10]. Однако в отличие от [10] будем рассматривать оптические переходы между состояниями различных зон. Заполненные состояния ТД на линии дислокации будем считать отшепившимися от потолка валентной зоны

$$\psi_l(r) = \sqrt{\frac{z}{2\pi}} \frac{e^{-ir}}{r} u_{kr}(r),$$

а конечные состояния в зоне проводимости будем описывать функциями

$$\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} u_{kc}(r).$$

Здесь  $(2z)^{-1}$  — радиус локализованного состояния,  $\hbar k$  — импульс электрона,  $u_{kr}$  и  $u_{kc}$  — модулирующие блоховские множители,  $V$  — нормировочный объем. Вычисления, аналогичные [10], дают сечение поглощения в виде

$$\sigma_l(\omega) = \frac{16\sqrt{2}\pi}{3} \frac{e_0^2}{\hbar^2 C} \left( \frac{\xi_{ef}}{\xi_0} \right)^2 \frac{P_{cr}^2 m_e^{3/2} \sqrt{\hbar\omega - E_l}}{m_0^2 \hbar\omega \sqrt{\varepsilon} (z^2 + \delta k_{cr}^2)^2}, \quad (1)$$

где  $P_{cr}$  — матричный элемент дипольного перехода между состояниями объемных зон,  $m_e$  — эффективная масса электрона в зоне проводимости,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость,  $\xi_{ef}/\xi_0$  — множитель, учитывающий поправку на эффективное поле. В модели Лоренца—Лоренца  $\xi_{ef}/\xi_0 = (\varepsilon + 2)/3$ .  $\delta k_{cr}$  — сдвиг экстремумов зон. При выводе выражения (1) предполагалось, что  $\hbar\omega - E_l \ll \hbar^2 \delta k_{cr}^2 / 2m_e$ .

Если ТД расположены с плотностью  $n_l$  вдоль линий дислокаций, то при плотности дислокаций  $\Lambda$  коэффициент ДП равен

$$K_l(\omega) = n_l \Lambda \sigma_l(\omega).$$

Полученная спектральная зависимость  $K_l(\omega) \propto (\hbar\omega - E_l)^{1/2}/\omega$  близка к экспериментальной [6]. Теория находится также в разумном количественном согласии с экспериментом. В кремнии при значении радиуса оборванной связи  $(2z)^{-1} = 1.17$  Å,  $\varepsilon = 12$ ,  $m_e = 0.26m_0$ ,  $\delta k_{cr} = 9.85 \cdot 10^7$  см<sup>-1</sup>,  $P_{cr}^2 \approx 10m_0E_g$  сечение  $\sigma_l \approx 10^{-17}$  см<sup>2</sup> при  $\hbar\omega = 1$  эВ. Согласно [11], дефекты на линии дислокации в кремнии расположены на расстоянии 50–200 Å. Если взять для неотожженных кристаллов нижнее значение, то  $n_l = 2 \cdot 10^6$  см<sup>-1</sup>. Тогда при  $\Lambda = 2 \cdot 10^9$  см<sup>-2</sup> получаем  $K_l \approx 0.04$  см<sup>-1</sup>, что по порядку величины согласуется с экспериментальным значением  $K_{\text{ок}} \approx$

$\approx 0.1$  см $^{-1}$  [6]. Для дальнейшего развития теории ДП необходимо определение деталей электронной структуры ТД на линии дислокации.

Автор благодарен А. В. Баженову, В. В. Кведеру и В. Я. Кравченко за ряд полезных обсуждений.

### Л и т е р а т у р а

- [1] Беляевский В. И., Свиридов В. В. ФТТ, 1982, т. 24, № 6, с. 1654—1662.
- [2] Стефанович Л. И., Фельдман Э. П. ФТТ, 1985, т. 27, № 4, с. 1205—1212.
- [3] Молоцкий М. И. ФТТ, 1987, т. 29, № 3, с. 838—840.
- [4] Chelikowsky J. R., Spence J. C. H. Phys. Rev., 1984, vol. B 30, N 3, p. 694—701.
- [5] Тайхлер Х., Мархайн К. Изв. АН СССР, сер. физ., 1987, т. 51, № 4, с. 663—667.
- [6] Баженов А. В., Квадер В. В., Красильникова Л. Л., Шалагин А. И. ФТТ, 1986, т. 28, № 1, с. 230—234.
- [7] Баженов А. В., Красильникова Л. Л. ФТТ, 1986, т. 28, № 1, с. 235—241.
- [8] Ossipyan Yu. A. Cryst. Res. Technol., 1981, vol. 16, N 2, p. 239—246.
- [9] Вебер Е. Р., Омлинг П., Кизеловски-Кеммерих К., Александер Х. Изв. АН СССР, сер. физ., 1987, т. 51, № 4, с. 644—651.
- [10] Lucovsky G. Sol. St. Commun., 1965, vol. 3, N 9, p. 299—302.
- [11] Квадер В. В. Автореф. докт. дис. ИФТТ, Черноголовка, 1987. 23 с.

Воронежский государственный  
университет им. Ленинского комсомола  
Воронеж

Поступило в Редакцию  
20 января 1988 г.

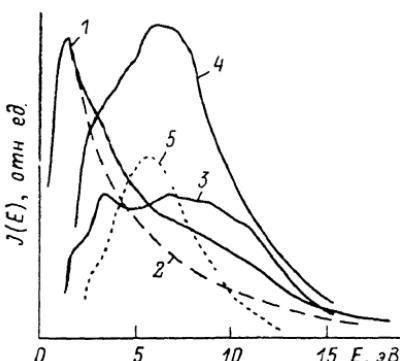
УДК 537.533.8

Физика твердого тела, том 30, в. 6, 1988  
Solid State Physics, vol. 30, N 6, 1988

## РАСПАД ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛАЗМОНОВ НА ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЯХ В КРЕМНИИ

O. M. Артамонов, A. Г. Виноградов, A. Н. Терехов

На спектрометре медленных электронов [1] с угловым разрешением исследованы спектры вторичных электронов (ВЭ) поверхности Si (100) в области малых энергий в зависимости от углов падения, наблюдения, и энергии падающих электронов  $E_p$ . Поверхность имела сверхструктуру  $2 \times 1$ , посторонние примеси в пределах чувствительности Оже-анализа [1] отсутствовали. Оказалось, что форма энергетического распределения ВЭ данной поверхности имеет вид, близкий к традиционному каскадному рас-



Энергетическое распределение ВЭ поверхности Si (100) и спектр тонкой структуры.

1 — распределение ВЭ в направлении нормали; 2 — каскадный фон; 3 — СТС, угол падения  $-30^\circ$ ; 4 — то же, угол падения  $-87.5^\circ$ , 5 — максимум, обусловленный распадом поверхностных плазмонов на поверхностных состояниях.  $E_p = 200$  эВ.

пределению со слабо выраженной тонкой структурой (см. рисунок, кривая 1). Для выделения тонкой структуры нами было проведено вычитание из распределения ВЭ по энергиям каскадного распределения, которое получается после аморфизации исходной поверхности пучком ионов аргона с энергией 900 эВ (доза порядка  $10^{16}$  см $^{-2}$ , кривая 2). В результате вычитания получен спектр тонкой структуры (СТС, кривая 3), который во всех случаях представлял собой широкую полосу в диапазоне энергий 2—13 эВ. Нижняя граница полосы обусловлена методикой выделения