

## НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ДВИЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ КАК ВОЗМОЖНЫЙ МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ОДНОМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СТРУКТУР В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛАХ

*Н.И.Тарбаев<sup>1)</sup>, Г.А.Шепельский, Е.А.Сальков*

*Институт физики полупроводников НАН Украины*

*252650 Киев, Украина*

Поступила в редакцию 14 июля 1997 г.

После переработки 15 октября 1997 г.

Предложен новый механизм образования одномерных электронных структур в полупроводниковых кристаллах, основанный на низкотемпературном контролируемом скольжении дислокаций. Движущиеся дислокации генерируют ассоциаты собственных точечных дефектов в виде одномерных цепочек, при этом низкая температура препятствует распаду ассоциатов. Приведены результаты экспериментов и численных оценок, выполненных для кристаллов сульфида кадмия.

PACS: 62.20.Fe, 73.20.Dx, 78.50.Ge, 78.55.Et

Линейные дефекты кристаллической структуры – дислокации в последнее время вызывают специальный интерес, так как длинные прямолинейные участки дислокаций могут рассматриваться как одномерные упорядоченные электронные системы в кристаллической решетке полупроводника. В настоящей работе рассматривается другой, менее очевидный механизм образования одномерных электронных структур в полупроводниковых кристаллах, также связанный с дислокациями. Он основан на генерации цепочек собственных точечных дефектов движущимися дислокациями.

Как известно, движение дислокаций приводит к образованию в кристалле значительного числа собственных точечных дефектов: вакансий и междоузлий. Согласно принятым представлениям, дефекты генерируются дислокациями в виде ассоциатов точечных дефектов. Можно полагать, что пространственное распределение таких ассоциатов непосредственно после похождения дислокации будет упорядоченным и будет иметь определенную периодическую структуру в силу периодичности самого кристалла. Однако поскольку энергия связи таких ассоциатов, как правило, невелика, то их распад происходит уже при относительно низких температурах. Силовые поля вокруг дислокаций такой распад могут только ускорить. Таким образом, пространственное распределение дефектов, образованных движущимися дислокациями, оказывается нестабильным. Поэтому особый интерес представляет низкотемпературный режим движения дислокаций в полупроводниках. Низкотемпературная пластическая деформация (НТПД) дает первичную картину дефектообразования движущимися дислокациями, поскольку подавляются термоактивационные механизмы взаимодействия дефектов.

Наши экспериментальные исследования НТПД в полупроводниковых соединениях  $A_2B_6$  (CdS, CdTe, CdSe) показали, что движение дислокаций при низких температу-

<sup>1)</sup> e-mail: class@class.semicond.kiev.ua

рах ( $T = 1.8 - 78 \text{ K}$ ) действительно приводит к появлению в физических свойствах кристаллов характерных особенностей, которые не проявляются при любых других воздействиях [1]. Так, в спектрах оптического поглощения (ОП) и излучения появляются особые характеристические линии малой ширины. Эти линии не имеют аналогов в исходных кристаллах  $A_2B_6$  и ранее не наблюдались. Кроме того, они не появляются и после пластической деформации при высоких ( $T > 300 \text{ K}$ ) температурах. Наконец, указанные оптические линии не обнаруживаются после введения в кристалл, в том числе при низких ( $T < 78 \text{ K}$ ) температурах, собственных точечных дефектов, например, посредством облучения высокоэнергетичными частицами. В последнем случае распределение дефектов может быть равномерным по объему, однако остается хаотическим.

Результаты исследования спектров ОП и фотолюминесценции, полученные в результате НТПД в кристаллах сульфида кадмия, представленные на рис.1, соответствуют деформированию образца одноосным сжатием вдоль направления  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  при  $T = 4.2 \text{ K}$ . При  $T = 4.2 \text{ K}$  дислокационное излучение (ДИ) состоит из ряда характерных полос излучения, которые будут именоваться дислокационными полосами. Будем рассматривать три наиболее интенсивные полосы с энергиями: 2.447, 2.440 и 2.435 эВ. Отметим, что полуширина дислокационных полос в диапазоне температур 1.8 – 100 К оказывается порядка  $kT$  и близка к полуширине линий излучения связанных экситонов.

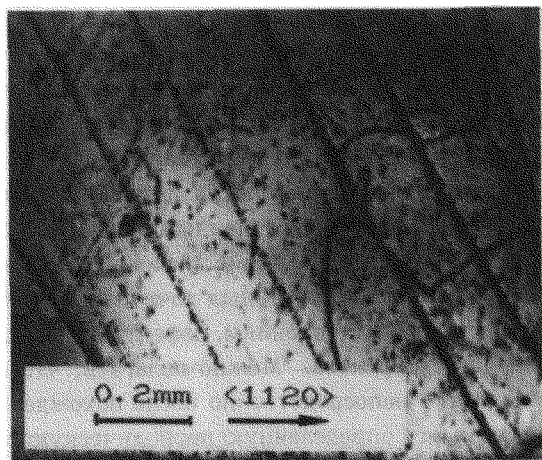
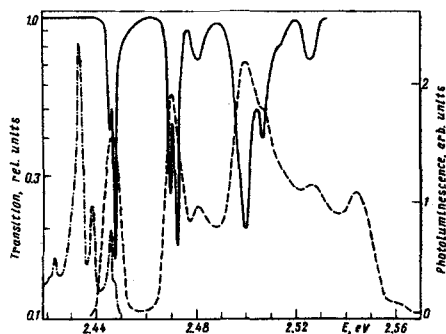


Рис.1. Характеристические линии приведенного оптического пропускания (сплошная кривая), дислокационного излучения (штрих-пунктир) и возбуждения ДИ (штриховая линия).  $T = 4.2 \text{ K}$

Рис.2. Полосы скольжения дислокаций в результате НТПД

Как видно из данных рис.1, спектральные позиции полос оптического пропускания, из которого рассчитывался коэффициент ОП, полностью совпадают с положением полос спектра возбуждения ДИ. Такое детальное совпадение означает, что линии ОП и ДИ соответствуют оптическим переходам между электронными состояниями одной и той же системы энергетических уровней. При том коэффициент поглощения  $\alpha$  достигает значений  $10^2 \text{ см}^{-1}$  уже при незначительной степени НТПД ( $\epsilon < 10^{-4}$ ).

Полученные нами данные по оптическому поглощению  $\alpha(\nu)$  дают возможность сделать оценки средней плотности генерируемых НТПД оптически активных цент-

ров  $N$  с помощью известного соотношения [2]

$$fN = \frac{ncm}{\pi e^2 \hbar} \int \alpha(\nu) d\nu, \quad (1)$$

где  $f$  – сила осциллятора,  $\nu$  – частота,  $n$  – коэффициент преломления,  $c$  – скорость света в вакууме,  $e$  и  $m$  – заряд и масса электрона. Подставляя численные значения величин и экспериментальные значения  $\alpha$ , имеем:

$$fN \approx 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}. \quad (3)$$

Оценка сделана для средней плотности дислокаций, сосредоточенных в полосах скольжения, на грани (0001) деформированного при 77 К кристалла  $N_d = 10^5 \text{ см}^{-2}$  (рис.2), чему соответствовало поглощение  $\alpha = 10 \text{ см}^{-1}$ .

Здесь следует сделать важное замечание относительно природы электронных состояний, индуцированных НТПД, а именно: модель электронных состояний непосредственно дислокационных ядер [3] не может удовлетворить этому соотношению. Действительно, предположим, что эти состояния относятся непосредственно к ядрам дислокаций. Максимальная плотность состояний в расчете на единицу длины дислокации не может превышать числа атомов с нарушенной координацией химических связей в дислокационном ядре  $\approx 10^7 \text{ см}^{-1}$ . Тогда для объяснения наблюдаемой в нашем эксперименте большой величины оптического поглощения потребовалась бы сила осциллятора  $f \approx 10^3$ , что совершенно нереально и указывает на несостоятельность "ядерной" модели ДИ и ОП.

Степень поляризации линий ОП и ДИ (соотношение интенсивностей при направлении поляризации перпендикулярно и вдоль и оси  $C$ ) оказывается незначительной и лежит в пределах 1.1 – 1.3 для различных образцов. Действительная анизотропия оказывается скрытой прежде всего из-за установленного экспериментально ориентационного вырождения "дислокационных" состояний [1]. Кроме того, следует учитывать сильное деполаризационное воздействие двулучепреломления, вызываемого полями упругих напряжений вблизи дислокаций.

В спектральном распределении фотопроводимости в результате НТПД также возникают узкие полосы, которые совпадают по энергетическому положению с пиками ОП.

Важно также отметить, что все характерные полосы после выдержки кристалла при комнатной температуре уже в течении одного часа сильно ослабляются или практически полностью исчезают.

Таким образом, низкотемпературное скольжение дислокаций в полупроводнике вызывает образование особых электронных состояний, которые имеют очень большие силы осцилляторов оптических переходов и оказываются нестабильными. Можно предполагать, что указанные состояния относятся к некоторым метастабильным ассоциатам точечных дефектов, расположенным упорядоченно.

Рассмотрим наиболее вероятную модель образования точечных дефектов движущимися дислокациями. В [3, 4] установлено преобладание винтовой компоненты у дислокаций в CdS, скользящих по призматической системе. Известен механизм образования точечных дефектов при движении именно винтовых дислокаций со ступеньками [5]. При деформации ступеньки порождают либо междоузельные атомы,

либо вакансии. Для определенности рассмотрим случай вакансий. Ступенька при своем движении образует непрерывную цепочку дефектов. В результате возникают цепочки вакансий типа  $V_{Cd} - V_s - V_{Cd} - V_s - \dots$  и так далее, образующие одномерные структуры, ориентированные вдоль оси  $C$ . При этом на каждый элементарный акт переползания единичной 60- или 30-градусной ступеньки будет образовываться по две пары вакансий.

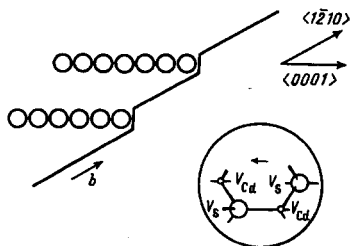


Рис.3. Схема образования одномерных цепочек дефектов

На рис.3 схематически представлен механизм образования цепочек ассоциатов собственных точечных дефектов движущимися винтовыми дислокациями со ступеньками. Структура ассоциата (период цепочки) показана только на увеличенном фрагменте. Обозначим среднее значение линейной плотности ступенек вдоль винтовых сегментов  $N_j$ . Наши металлографические исследования показывают, что полосы скольжения при НТПД пересекают весь образец с примерно однородным распределением плотности выходов дислокаций (ямок травления) по длине полосы скольжения, так что средняя длина пробега дислокации – 0.5 длины полосы скольжения (рис.2). Это согласуется также с достаточно высокой скоростью движения винтовых дислокаций в CdS, которая при 77 К может достигать  $5 \cdot 10^{-2}$  см/с [3]. Отсюда вклад в среднюю объемную плотность дефектов каждой ступеньки на дислокации, проходящей среднюю длину пути, будет составлять  $0.5 \cdot 10^7$ . Таким образом, средняя объемная плотность дефектов  $N$ , собранных в цепочки, может быть рассчитана как

$$N \approx 0.5 N_d N_j 10^7 \text{ см}^{-3}. \quad (3)$$

Величину, взятую из (3), следует приравнять к значению  $N$ , полученному из ОП (2):  $N = 2 \cdot 10^{15} / f \text{ см}^{-3}$ . Беря экспериментальное значение  $N_d = 10^5 \text{ см}^{-2}$ , получаем соотношение, связывающее  $N_j$   $f$ :

$$N_j \approx (1/f) \cdot 2 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}. \quad (4)$$

Оценим  $N_j$  на основании (4), сделав предварительно разумные допущения о силе осциллятора  $f$ . Как известно, максимальные значения  $f$  соответствуют состояниям связанных экситонов и находятся для кристаллов  $A_2B_6$  в пределах от 1 до 10 [6]. Нам следует выбрать нижнюю границу этой величины  $f = 1$ , учитывая значительную локализацию экситонов. Отсюда получаем значение  $N_j = 2 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$ . Это оценка нижней границы  $N_j$ .

В то же время представляется возможность оценить независимо верхнюю границу  $N_j$ . В [7] напряжение торможения дислокаций  $t_d$  единичными ступеньками

связывается с  $N_j$  и энергией образования точечных дефектов  $W$  с помощью соотношения  $t_d = N_j \cdot W/b^2$ , где  $\mathbf{b}$  – вектор Бюргерса. Оценим, начиная с какой величины  $N_j$  пластическое течение кристалла будет контролироваться скольжением винтовых дислокаций со ступеньками. В качестве  $t_d$  возьмем полученную из эксперимента среднюю величину порогового напряжения пластической деформации  $t_{thr}$  для  $T = 77$  К. С учетом наклона плоскости скольжения по отношению к оси сжатия ( $60^\circ$ )  $t_d = 0.5$  кбар. В качестве  $W$  примем суммарную энергию образования двух пар изолированных вакансий [8]:  $W = 2(W_{V_{Cd}} + W_{V_{S}}) - 2(3.5 + 2) \text{ эВ} = 11 \text{ эВ}$ . Для CdS  $b = 0.414 \cdot 10^{-7}$  см. Получим:  $N_j = t_d b^2 / W = 5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ . Это – ограничение сверху для  $N_j$ . Для полученного значения  $N_j$  следует брать, исходя из (4), меньшую силу осциллятора  $f \approx 0.1$ .

Таким образом,  $N_j$  лежит в пределах  $2 \cdot 10^2 - 5 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ . Отсюда следует, что средняя объемная плотность точечных дефектов, расположенных в цепочках, находится в пределах  $2 \cdot 10^{15} - 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  для указанной величины  $\alpha$ , что представляется вполне вероятной величиной.

Исходя из приведенных результатов эксперимента и оценок, предлагается следующая модель электронных переходов, объясняющая совокупность особенностей спектров поглощения и излучения кристаллов сульфида кадмия, подвергнутых НТПД. Переход, ответственный за наиболее длинноволновую полосу оптического поглощения и резонансную с ней полосу ДИ, соответствует возбуждению экситонов, связанных на квазиодномерной структуре вакансий. Экситонный уровень размыт в зону из-за перекрытия волновых функций соседних экситонных состояний вдоль цепочки. Остальные полосы ОП – переходы на возбужденные состояния той же системы. В последнем случае возбуждение быстро релаксирует до основного состояния и не проявляется в излучении. Таким образом, большие силы осцилляторов  $f$  объясняются внутрицепочечным резонансным взаимодействием. Здесь представляется уместной аналогия с молекулярными кристаллами, у которых молекулы уложены в одномерные ориентированные цепочки. Матричный элемент внутрицепочечного взаимодействия в таких кристаллах по крайней мере на два порядка превышает матричный элемент межцепочечного взаимодействия [9].

В пользу существования одномерных структур и связанных с ними узких зон свободной энергии свидетельствуют и важные дополнительные экспериментальные факты. Так, в результате НТПД возникает заметная анизотропия в величине фототока по отношению к ориентации цепочек: отношение  $I_{\parallel}/I_{\perp}$  достигает значений порядка 10. Кроме того, подвижность носителей тока, оцененная из измерений фотопроводимости в дислокационных полосах ОП, имеет значение  $\sim 5 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ . Это по крайней мере на порядок превышает подвижность электронов зоны проводимости сульфида кадмия.

Работа выполнена при поддержке Фонда фундаментальных исследований Миннауки Украины.

1. N.I.Tarbaev, J.Schreiber, and G.A.Shepwlkii, Phys. Stat. Sol. (a) **110**, 97 (1988).

2. А.М.Стоунхэм, *Теория дефектов в твердых телах*, т.1, М.: Мир, 1978. (A.M.Stoneham, *Theory of defects in solids*, Oxford: Clarendon, 1975).

3. V.D.Negry, Yu.A.Osipyan, and N.V.Lomak, *Phys. Stat. Sol. (a)* **126**, 49 (1991).
4. Yu.Osipyan, V.F.Petrenko, G.K.Strukov, and I.I.Khodos, *Phys. Stat. Sol. (a)* **57**, 477 (1980).
5. Дж.Хэрт, И.Лоте, *Теория дислокаций*, М.: Атомиздат, 1972.
6. D.G.Thoas and J.J.Hopfield, *Phys. Rev.* **175**, 1021 (1968).
7. W.G.Jonson and J.J.Gilman, *J. Appl. Phys.* **31**, 632 (1960).
8. T.Taguchi and B.Ray, *Progress in crystal growth and characterization* **6**, 103 (1983).
9. *Экситоны*, под ред. Э.И.Рашбы и М.Д.Серджа, М.: Наука, 1985, гл.15.(Excitons, Eds. E.I.Rashba and M.D.Surge, Amsterdam: North Holland, 1982, chapter 15).