

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ТА ТЕОРЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ

УДК 537.226+537.311/0.1

Баран М.М., Пелещак Р.М.

Дрогобицький державний педагогічний університет ім. Івана Франка

ЗМІНА ЕНЕРГІЇ ЛОКАЛІЗОВАНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ КРИСТАЛА З ДИСЛОКАЦІЄЮ ПІД ДІЄЮ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ

© Баран М.М., Пелещак Р.М., 2000

У межах електрон-деформаційної моделі показано, що енергія локалізованих електронних станів кристала з крайовою дислокацією зі зростанням електричного поля зростає у випадку, коли вектор напруженості електричного поля $\vec{\mathcal{E}}$ збігається з напрямком електрон-деформаційного дипольного моменту \vec{P}_{el-d} . У разі коли напрямки $\vec{\mathcal{E}}$ і \vec{P}_{el-d} не збігаються, існує протилежний ефект.

In the framework of electron-deformation model it is shown, that the energy of localized electron states in crystal with edge dislocation increases with the growth of electric field in the case that directions of electric field vector $\vec{\mathcal{E}}$ and vector of electron-deformation dipole moment \vec{P}_{el-d} coincide. Opposite effect takes place if these vectors do not coincide.

Вступ

У роботі [1] показано, що повільно змінна механічна деформація, зумовлена наявністю дислокації, призводить до появи локалізованих електронних станів, рівні енергії яких знаходяться в забороненій зоні. Як показано в роботі [2], характер локалізації цих рівнів можна змінювати, міняючи ступінь заповнення зони провідності ($0 \leq \bar{n} < 2$), наприклад фотозбудженням. Це пов'язано з тим, що під час зміни ступеня заповнення зони змінюється значення внеску “електронної” складової у сумарну деформацію ґратки (“електронна” складова – це складова деформації, зумовлена локальним електронним перерозподілом внаслідок електрон-деформаційної взаємодії [3]).

Мета цієї роботи – дослідити вплив зовнішнього електричного поля на локалізовані електронні стани кристала з дислокацією.

Електрон-деформаційна модель кристала з дислокацією в електричному полі

Розглядаємо кристал з крайовою дислокацією у площині YOZ з вектором Бюргерса $\vec{b} = (b, 0, 0)$ (рис.1). На кристал накладене електричне поле, вектор напруженості $\vec{\varepsilon}$ якого паралельний осі OY. Крайова дислокація (вісь дислокації збігається з віссю OZ) створює механічну деформацію, яка у циліндричних координатах описується виразом

$$U_{mech}(\rho, \varphi) = -\frac{1-2\nu}{1-\nu} \cdot \frac{b}{\rho} \cos \varphi, \quad (1)$$

де ν – коефіцієнт Пуассона; ρ, φ – полярні координати; кут φ відраховується від додатково-вставленої дислокаційної площини (ДП) до радіуса вектора $\vec{\rho} = (x, y)$. Як показано у [2], самоузгоджена взаємодія механічної деформації з електронною підсистемою призведе до локального перерозподілу електронів. Внаслідок цього у верхній півплощині $\left(-\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}\right)$, яка містить додатково вставлену дислокаційну площину, виникне надлишок електронної густини ($\Delta n(\rho, \varphi) > 0$), а в нижній $\left(\frac{\pi}{2} < \varphi \leq \frac{3\pi}{2}\right)$ – її недостача ($\Delta n(\rho, \varphi) < 0$).

Отже, електрон-деформаційна взаємодія [4] призведе до перенормування вихідної механічної деформації доданком

$$\Delta U_{el}(\rho, \varphi) = -\frac{S}{K} \Delta n(\rho, \varphi), \quad (2)$$

де S – константа деформаційного потенціалу; K – пружна стала;

$$\Delta n(\rho, \varphi) = -SDR_S \cos \varphi \left[\frac{2}{\rho_0} I_1(g\rho_0) K_1(g\rho) - \frac{1}{\rho} \right], \rho > \rho_0, \quad (3)$$

зміна локального перерозподілу електронів в околі дислокації, де $D = \frac{1-2\nu}{1-\nu} \cdot b$; $\rho_0 = (2-3)b$ –

радіус ядра дислокації; $g^2 = \frac{e^2 R_S}{\varepsilon \varepsilon_0}$; R_S – функція, яка залежить від параметрів n_0, S, K

[5]; $K_1(g, \rho), I_1(g, \rho_0)$ – функція Макдональда і Бесселева функція першого роду порядку одиниці.

Тобто, вздовж вісі дислокації (OZ) внаслідок електрон-деформаційної взаємодії утворюється знакозмінний перерозподіл зарядів у вигляді електрон-деформаційного диполя (ЕДД), що має форму вісімки (рис.1, штрихова лінія).

Теоретичне дослідження впливу зовнішнього електричного поля $\vec{\varepsilon}$ на локалізовані дислокаційні електронні стани проводимо в межах такого гамільтоніану:

$$H_{int} = SU_{mech}(\rho, \varphi) + \frac{S^2}{K} \Delta n(\rho, \varphi) \mp e\varepsilon \rho \cos \varphi, \quad (4)$$

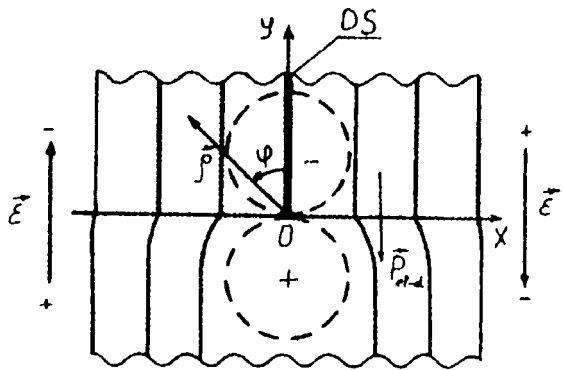


Рис.1. Модель кристала з крайовою дислокацією.

Вісімка, яка позначена штриховою лінією зображає електрон-деформаційний диполь, що існує вздовж вісі дислокації (OZ).

\vec{E} – вектор напруженості електричного поля.

Муфта (1) і $\Delta n(\rho, \varphi)$ (формула (3)), потенціальна енергія електрона у електрон-деформаційній ямі за наявності електричного поля \vec{E} матиме вигляд

$$V(\rho, \varphi) = -\frac{SD}{\rho} \cos \varphi - \frac{S^3 DR_S}{K} \left[\frac{2}{\rho_0} I_1(g\rho_0) K_1(g\rho) - \frac{1}{\rho} \right] \cos \varphi \mp \varepsilon \varepsilon \rho \cos \varphi, \rho \geq \rho_0 \quad (5)$$

В області пружних деформацій при $\frac{\rho}{\rho_0} \gg 1$ формула (5) набуде вигляду

$$V(\rho, \varphi) = \begin{cases} -\frac{SD}{\rho} [1 - q(n_0)] \cdot \cos \varphi \mp \varepsilon \varepsilon \rho \cos \varphi, & -\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} \\ \frac{SD}{\rho} [1 - q(n_0)] \cdot |\cos \varphi| \pm \varepsilon \varepsilon \rho |\cos \varphi|, & \frac{\pi}{2} < \varphi \leq \frac{3\pi}{2} \end{cases} \quad (6)$$

де $q(n_0) = \frac{S^2 R_S(n_0)}{K} \cdot \left(\frac{\sqrt{\pi}}{g\rho_0} I_1(g\rho_0) - 1 \right)$ – параметр, який описує вплив електрон-деформаційної взаємодії на ступінь локалізації електрона в околі дислокації.

Перший доданок першого рядка виразу (6) описує електрон-деформаційну потенціальну яму, а другого рядка – електрон-деформаційний бар'єр.

При накладанні електричного поля \vec{E} , крім спотворення електрон-деформаційної ями (верхня півплощина, що містить додаткову дислокаційну площину, $-\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$) в області додатних енергій виникає додаткова електрон-деформаційна яма, яка знаходиться у нижній півплощині кристалічної ґратки, що не містить дислокаційної площини.

Для плавної потенціальної ями щільність станів згідно з [1] можна записати у вигляді

$$g(E_N) \equiv \frac{\partial N}{\partial E_N} = \int_V g_0(E_N - V) \partial A(E). \quad (7)$$

де перший доданок враховує взаємодію електрона з механічною складовою параметра деформації; другий – з електронною складовою; третій – з електричним полем \vec{E} . Знак “-“ перед третім доданком у формулі (4) відповідає напрямку електричного поля, вектор напруженості якого \vec{E} збігається з додатним напрямком осі OY, тобто $\vec{E} = (0, \varepsilon, 0)$, а “+” – $\vec{E} = (0, -\varepsilon, 0)$.

Внаслідок підстановки в формулу (4) виразів для $U_{mech}(\rho, \varphi)$ (формула (4))

Для двовимірного випадку $g_0(E) = \frac{2\pi m^*}{\hbar^2}$ і тоді

$$\frac{\partial N}{\partial E} = \frac{2\pi m^*}{\hbar^2} A(E) \quad (8)$$

Межі області $A(E)$ визначимо із рівняння

$$A(E) = \iint \rho \partial \rho \partial \varphi \quad (9)$$

Знайдене ρ з рівності $V(\rho, \varphi, \varepsilon) = E$, підставляємо в формулу (9) і інтегруємо.

Інтегрування (9) виконували за умови, що $\frac{4SDe\varepsilon[1-q(n_0)]}{E^2(1+tg^2\varphi)} \ll 1$.

У результаті $A(E)$ матиме вигляд

$$A(E) = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{(SD)^2 [1-q(n_0)]^2}{E^2} \pm \frac{3\pi}{8} \cdot \frac{(SD)^3 [1-q(n_0)]^3 e\varepsilon}{E^4} \quad (10)$$

Підставивши вираз $A(E)$ у формулу (8) і проінтегрувавши, отримаємо рівняння

$$E_N^3 + \frac{W_1}{N} E_N^2 \pm \frac{P(n_0)}{N} \varepsilon = 0, \quad (11)$$

з якого визначається спектр електрона в спотвореній електричним полем, електрон-деформаційній потенціальній ямі та у додатковій електрон-деформаційній потенціальній ямі, яка виникла внаслідок накладання електричного поля. У рівнянні (11) знак "+" відповідає напрямку електричного поля $\vec{\varepsilon} = (0, \varepsilon, 0)$, а знак "-" відповідає $\vec{\varepsilon} = (0, -\varepsilon, 0)$;

$$W_1 = \frac{\pi^2 m^* (SD)^2 [1-q(n_0)]^2}{2\hbar^2}; \quad (12)$$

$$P(n_0) = \frac{\pi^2 m^* (SD)^3 [1-q(n_0)]^3 e}{4\hbar^2}. \quad (13)$$

Числові розрахунки і обговорення результатів

На рис.2 зображені результати числового розв'язку рівняння (11) (при значеннях параметрів, характерних для InSb) залежно від величини і напрямку прикладеного до кристала з дислокацією електричного поля $\vec{\varepsilon}$. Як видно з рис.2, зі зростанням електричного поля енергія основного (E_1^\pm) та збудженого локалізованих станів електрона монотонно зростає при напрямку поля $\vec{\varepsilon} = (0, -\varepsilon, 0)$ (рис.1); у протилежному напрямку поля – спадає. Зокрема, зі зростанням поля до 60 кВ/см енергія основного локалізованого стану електрона змінюється за 3 %; у той час як енергія збудженого стану електрона змінюється на ≈ 10 %. Значить, збуджені локалізовані стани електрона є чутливіші до зміни електричного поля.

Така поведінка енергії основного та збудженого станів електрона залежно від величини і напрямку поля пов'язана зі зміною характеру локального перерозподілу електронів $\Delta n(\rho, \varphi)$. Так, при напрямку поля $\vec{\varepsilon} = (0, \varepsilon, 0)$ перерозподіл зарядів $\Delta n(\rho, \varphi)$ в околі

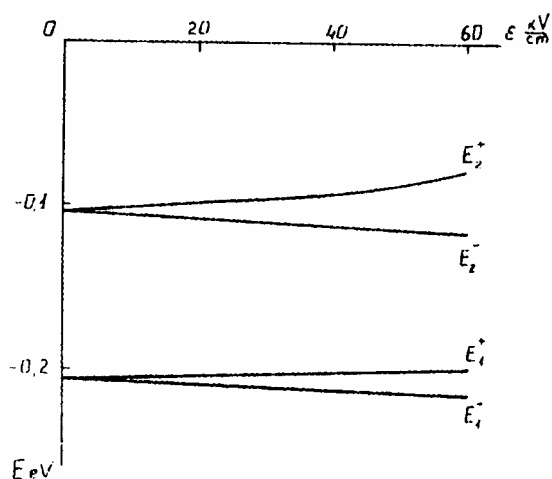


Рис.2. Залежність енергії локалізованих електронних станів від величини і напрямку електричного поля, накладеного на кристал з дислокацією.

дислокації має менш виражений локалізований характер ($\Delta n(\rho, \varphi)$ стає меншим). Це призводить до збільшення глибини електрон-деформаційної ями, а це, своєю чергою, понижує рівні локалізованого стану електрона. У разі напрямку поля $\vec{\varepsilon} = (0, \varepsilon, 0)$, має місце протилежний ефект.

Результати розв'язання задачі дають змогу зробити такі висновки:

1. В межах електрон-деформаційної моделі кристала з дислокацією в зовнішньому електричному полі встановлено, що в області кристала, де відсутня екстраплощина виникає додаткова потенціальна деформаційна яма.

2. Встановлено, що в разі збігу напрямів векторів зовнішнього електричного поля і дипольного моменту електро-деформаційного диполя, енергія основного та збудженого станів електрона зі зростанням поля монотонно спадає. У випадку протилежно напрямлених цих векторів – монотонно зростає.

3. Показано, що енергія основного локалізованого стану електрона, зумовленого дислокацією, при накладанні електричного поля порядку 60 кВ/см змінюється на 3 % щодо енергії цього стану за відсутності поля. У той час як енергія першого збудженого стану змінюється на 10 %.

[1] Лифшиц И.М., Пушкарров Х.И. // Письма в ЖЭТФ. 1970. 11. С.456–459.

[2] Пелещак Р.М. // Укр. фіз. журн. 1998. 43. С.1316–1320.

[3] Белявский В.И., Померанцев Ю.А. // ФТП. 1999. 33. С.451–454.

[4] Стасюк І.В., Пелещак Р.М. // Укр. фіз. журн. 1994. 39. С.856–861.

[5] Пелещак Р.М., Лукиянец Б.А. // Письма в ЖТФ. 1998. 24. С.32–36.