Письма в ЖЭТФ, том 26, вып. 1, стр. 3 – 5 *5 июля 1977 г.*

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ НА РАВНОВЕСНУЮ ФОРМУ ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНЫХ КАПЕЛЬ

Б.М.Ашкинадзе, А.В.Субашиев, И.М.Фишман

Образование электронно-дырочных капель приводит к равновесной деформации кристаллической решетки. Показано, что вследствие анизотропии упругих свойств кристалла капли достаточно большого объема должны иметь форму диска.

Влияние внешней деформации на поведение электронно-дырочных капель [ЭДК] изучалось в ряде работ (см., например [1, 2]). Как будет показано ниже, само возникновение капли сопровождается равновесной деформацией кристалла, так что область кристалла, находящаяся внутри капли, оказывается растянутой (в случае кремния и германия), а капли слегка сжатой. Деформация, будучи малой, не сказывается на объемных свойствах ЭДК; однако, в ряде явлений, определяемых поверхностным натяжением, действие на каплю равновесной деформации может оказаться существенным.

Для оценки характерных величин деформации и давления рассмотрим сферическую каплю, помещенную в изотропную упругую среду. Плотность энергии кристалла с ЭДК с учетом электрон-фононного взаимодействия можно записать в виде:

$$E = E_{\text{эл}} + \frac{1}{2}\lambda u^2(\mathbf{r}) - Dn(\mathbf{r})\, u(\mathbf{r}), \qquad (1)$$

где $E_{\text{эл}}$ – электронно-дырочный вклад в энергию (с учетом поверхностной энергии), $\lambda = {}^1/_3(c_{11} + 2c_{12})$, c_{11}, c_{12} – модули упругости, $u(\mathbf{r})$ – деформация, D – суммарный деформационный потенциал электронов и дырок, $n(\mathbf{r})$ – зависящая от координат плотность электронов и дырок ($n(\mathbf{r}) = n_0$ при $|\mathbf{r}| < R$, $n(\mathbf{r}) = 0$ при $|\mathbf{r}| > R$, R – радиус капли).

Электрон-фононное взаимодействие вызывает упругие напряжения $\sigma(\mathbf{r}) = \partial E/\partial u(\mathbf{r})$, приводящие к деформации среды. Определение равновесной деформации аналогично задаче о термоупругих напряжениях, вызываемых в среде однородно нагретой сферой [3]. Область кристалла внутри капли оказывается однородно растянутой (ширина запрещенной зоны внутри капли меньше, чем снаружи), причем величина деформации $u_0 = Dn_0/\lambda$; вне капли относительное изменение объема равно нулю, однако радиальная и тангенциальная составляющие деформации существуют и спадают $\sim 1/r^3$. Тогда вблизи поверхности имеется градиент деформации, приводящий к возникновению давления на каплю. Сила, действующая на элемент поверхностного слоя капли площадью S и толщиной d, равна $F = DnSd\,\mathrm{grad}\,u$. Полагая $\mathrm{grad}\,u \approx u_0/d$, получим

$$p = \frac{F}{S} = \frac{(Dn)^2}{\lambda} . \qquad (2)$$

Для германия, подставляя в (2) $D \approx 3$ *эв*, $\lambda = 10^{12}$ *дин/см*^{2}, $n = 2\cdot 10^{17}$ *см*$^{-3}$ [4], получим, что добавочное давление на поверхность капли $p_0 \approx 1$ *дин/см*^{2}, при этом относительная деформация кристалла $u_0 \approx 10^{-6}$.

Сравним величину p_0 с давлением, обусловленным поверхностным натяжением $p' = 2a/R_0$. Полагая $a = 2\cdot 10^{-4}$ *эрг·см*^{2}, получим, что при радиусе капли $R_0 \gtrsim 4$ *мкм* $p' < p_0$.

Возникновение деформации приводит к понижению полной энергии капли; как следует из [1], для капли радиуса $R \approx 4$ *мкм* понижение энергии ΔE составляет ~ 1 *эв*.

Упругая деформация среды, в которой находятся капли, может привести к ряду эффектов. Так, например, а) между каплями должны действовать упругие силы, спадающие как $1/r^3$, аналогично силам, действующим между центрами дилатации в кубическом кристалле [5]; б) в кубическом кристалле анизотропия упругих свойств должна приводить (для капель достаточно большого объема) к резкой анизотропии формы. На этом вопросе мы остановимся несколько подробнее.

Равновесная форма капли в кристалле определяется минимумом полной энергии. В анизотропном кристалле от формы капли зависят как энергия поверхностного натяжения, так и объемная энергия упругой деформации решетки. Анизотропия модулей упругости приводит к тому, что минимуму упругой энергии соответствует равновесная форма капли в виде тонкого диска, ориентированного вдоль оси легкого сжатия (в Ge и Si – оси [100]) . (Аналогичное "раскатывание" упругих включений в кубических кристаллах подробно описано в [6]). Превращению капли малого объема в диск препятствует возрастание ее поверхностной энергии. Критический объем, при котором капля скачком приобретает дискообразную форму, можно определить, рассматривая изменение энергии при малых отклонениях формы капли от сферической (т. е. производя разложение энергии по капиллярным колебаниям). Наиболее неустойчивыми оказываются эллипсоидальные отклонения от сферической формы ($n = 2$).

Частота таких колебаний обращается в нуль при $R_c \approx 3$ *мкм*. Оказывается, что при этом происходит перескок в дискообразное состояние с $\delta = d/l \approx 0{,}5$ (d – толщина капли, l – ее диаметр).

Кубическая деформация капли, возникающая при любом объеме и пропорциональная ее среднему радиусу, соответствует капиллярным колебаниям с $n \geqslant 4$. Она оказывается (при $R \leqslant R_c$) относительно малой вследствие большой частоты таких колебаний.

Когда полный объем капли достаточно велик и, следовательно, капля имеет форму диска, ее упругая энергия в нулевом приближении по отношению d/l равна энергии бесконечно тонкой пластины.

Поэтому для диска конечной толщины упругую энергию можно представить в виде суммы энергии бесконечно тонкой пластины и краевого вклада, пропорционального d/l.

При уменьшении d/l краевая упругая энергия падает, а поверхностная растет; следовательно, равновесная форма капли объема V определяется балансом поверхностной и краевой упругой энергии:

$$\frac{(Dn)^2}{c_{11} + 2c_{12}} V \frac{d}{l} \approx l^2 a \,. \tag{3}$$

В формуле (3) учтено, что анизотропия модулей упругости велика, так что анизотропная часть упругой энергии порядка ее самой.

Из формулы (3) следует, что

$$d/l \approx (r_o/R)^{3/5} \,, \qquad \text{где } r_o = a/\lambda u_o^2 \,.$$

Например, капля радиусом 10 *мкм* должна превращаться в диск с отношением $d/l \approx 1/4$.

В заключение заметим, что спонтанной одноосной деформации, связанной с расщеплением электронных (дырочных) состояний, возникнуть не может, поскольку малое расщепление не приводит к понижению полной энергии капли.

Авторы благодарят Э.И.Рашбу за ценную критику первоначального варианта работы.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
6 февраля 1977 г.
16 мая 1977 г.

Литература

[1] Л.В.Келдыш. В сб. „Экситоны в полупроводниках", М., 1971.

[2] Я.Е.Покровский. Phys. Stat., Sol (a) 11, 385, 1972.

[3] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Теория упругости. М.,

[4] П.Г.Баранский и др. Полупроводниковая электроника, М., 1974.

[5] Дж.Эшелби. Континуальная теория дислокаций, ИЛ, 1963, стр. 11.

[6] А.Г.Хачатурян. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов, М., изд. Наука, 1974.