

УДК 621.315.592

РЕКОМБИНАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННЫЕ АТОМНЫЕ СКАЧКИ В КРИСТАЛЛАХ. СЛУЧАЙ ОЖЕ-РЕКОМБИНАЦИИ

В. Л. Винецкий, Г. Е. Чайка

Проанализирован механизм перескока примесного атома между соседними положениями равновесия, стимулированного Оже-процессом, при котором на атоме, содержащем два электрона, рекомбинирует дырка, а второй электрон переходит в зону проводимости. Рассчитана вероятность перескока такого атома в адиабатическом приближении с использованием теории многофононных переходов.

В [1-4] был предложен механизм атомных перескоков в неметаллических кристаллах, стимулированных захватом электрона (или дырки) на уровень образующегося дефекта. Несколько позже подобные процессы были рассмотрены в [5, 6] (рекомбинационно-стимулированные дефектные реакции, РСДР). В настоящей работе вычисляется вероятность атомного скачка при захвате дырки на двухэлектронный дефект, сопровождающегося Оже-переходом электрона из дефекта в зону проводимости. Получены условия эффективного образования или перестройки дефекта в таком процессе.

Вероятность атомного скачка, стимулированного Оже-рекомбинацией, вычисляется на операторе неадиабатичности в движении электрона и дефектного атома, найденного в [3],

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Phi_{i \dots n_x} \frac{\partial \Psi_{s_1, s_2}}{\partial R} \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}, \quad (1)$$

где M — масса атома, совершающего скачок, R — его координата, $\Psi_{s_1, s_2}(r_1, r_2) \varphi_i(R) \Phi_{i \dots n_x}$ — волновые функции электронов, связанных на атоме, самого атома в начальном состоянии и нормальных колебаний атомов кристалла с квантовыми числами n_x . Вычисление вероятности перехода в новое состояние с квантовыми числами электронов (в зонах) k_c, k_v дефектного атома f и колебаний n'_x проводится с суммированием по всем переходам, при которых сохраняется разность $\sum_x (n'_x - n_x) = (\epsilon_g + \epsilon_h - \epsilon_k - J - W)/\hbar\omega$, где $\hbar\omega$ — энергия фонона, ϵ_g — ширина запрещенной зоны, ϵ_h и ϵ_k — энергии рассматриваемых двух электронов в зонах (дырочной и электронной), J — энергия связи пары электронов на дефектном атоме, W — высота потенциального барьера, который преодолевает атом при скачке [7]. Воспользовавшись результатами [3, 7, 8], можно привести вероятность перехода w_{if} к виду

$$w_{if} = \frac{\pi \hbar^2}{2M^2 \omega} |J_{if, k_c, k_v; l_i, s_1, s_2}|^2 R_p, \quad (2)$$

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

I_p — бесселева функция порядка p от мнимого аргумента,

$$p = (\epsilon_h + \epsilon_g - J - W)/\hbar\omega, \quad a = \sum_x (q_{x_i}^0 - q_{x_f}^0)^2,$$

\bar{n} — равновесное число фононов, $z = a\sqrt{\bar{n}(\bar{n}+1)}$ — положения равновесия атомов в начальном i - и конечном f -состояниях. Ограничимся случаем высоких температур $kT \gg \hbar\omega$ и больших смещений от положения равновесия. Тогда $z \gg 1$, $z \gg p$ и $I_p = (2\pi z)^{1/2} \exp[z - p^2/2z]$ и R_p приводится к виду

$$\left. \begin{aligned} R_p &= \frac{1}{(2\pi z)^{1/2}} \exp[-(p - p_M)^2/2z], \\ p_M &= \frac{z}{2} \ln(1 + 1/\bar{n}). \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Последнее выражение демонстрирует зависимость вероятности скачка от волновых векторов электрона и дырки, участвующих в Оже-процессе через величину p . Для сопоставления результатов теории с экспериментом необходимо усреднить (2) по распределению носителей в зоне. Предварительно следует вычислить интеграл $J_{l_i, s_1, s_2, l_f, k_c, k_v}$, также зависящий от k_c, k_v . Эта зависимость слаба по сравнению с экспонентой, входящей в R_p , и вносит вклад лишь в предэкспоненциальный множитель, не отражаясь на величине показателя экспоненты в окончательном выражении для вероятности (см. ниже, формула (13)). Стремясь к численной оценке вероятности, необходимо конкретизировать вид волновых функций, входящих в интеграл J . Для нейтрального двухэлектронного центра функцию ψ_{s_1, s_2} можно выбрать подобной функции атома гелия

$$\psi_{s_1, s_2} = \frac{\lambda^3}{\pi a_0} \left(1 + \frac{r_{12}^2}{r_0^2}\right) \exp[-\lambda(r_1 + r_2)/2a_0] \quad (5)$$

с эффективными параметрами λ, a_0, r_0 . Здесь $r_{12} = |r_1 - r_2|$. Волновые функции непрерывного спектра представим в виде собственных функций непрерывного спектра водородоподобного атома, ортогональных к (5). Тогда

$$J_{l_i, s_1, s_2; l_f, k_c, k_v} = \int L(R) \frac{\partial \varphi_f}{\partial R} dR, \quad (6)$$

причем

$$\begin{aligned} L(R) &= \frac{1}{r_0^2} \left\{ \int \psi_{s_1}(r_1) \psi_{k_c}(r_1) r_{12}^2 dr_1 \int \psi_{s_2}(r_2) \frac{\partial \psi_{k_v}}{\partial R} dr_2 + \right. \\ &\quad \left. + \int \psi_{s_1}(r_1) \frac{\partial \psi_{k_c}}{\partial R} dr_1 \int \psi_{s_2}(r_2) \psi_{k_v}(r_2) r_{12}^2 dr_2 \right\}, \quad (7) \\ \psi_s &= \exp[-\lambda r/2a_0]. \end{aligned}$$

Преобразуем интегралы типа $\int \psi_s \frac{\partial \psi_k}{\partial R} d\mathbf{r}$ в интегралы $\int \psi_k \frac{\partial \psi_s}{\partial R} d\mathbf{r}$ и будем считать, что зависимость от R функции ψ_s включается в a_0 , причем $a_0(R)$ считается настолько плавной функцией R , что в разложении $a_0(R)$ достаточно ограничиться только первым членом.

Для оценки интеграла по R будем аппроксимировать собственные функции $\varphi(R)$ функциями трехмерного гармонического осциллятора. Основной вклад в вероятность перехода дают переходы с изменением на единицу квантового числа, определяющего энергию осциллятора. Тогда

$$J_{l_i, s_1, s_2; l_f, k_c, k_v} = \frac{2^{11} a_0^4}{Z^3 r_0^2 L^3} \sqrt{\frac{M\hbar}{\omega}} \frac{da_0}{dR} \{F^{1/2}(1/a_0 k_c) + F^{1/2}(1/a_0 k_v)\}, \quad (8)$$

функция $F(n)$ может быть вычислена интегрированием в комплексной плоскости

$$F(n) = \frac{n^{10} (n^2 + 4n + 5) \exp[-4 \arctg n]}{(n^2 + 1) [1 - \exp(-2\pi n)]}. \quad (9)$$

При дальнейших расчетах можно пользоваться предельными значениями функции

$$\text{при } n \rightarrow 0 \quad F(n) = 2\pi e^{-4} n^3 / 2\pi,$$

$$\text{при } n \rightarrow \infty \quad F(n) = 1/2\pi n.$$

Поскольку $1/a_0 k = \hbar/a_0 \sqrt{2mkT} \sim 10^2$ видно, что в рассматриваемой задаче не следует пользоваться борновским приближением. С учетом сказанного

$$\left. \begin{aligned} |J_{l_i, s_i, z_i; l_f, k_c, k_v}|^2 &= \frac{3^2 2^2 4^2 a_0^8 M \omega}{L^6 \hbar r_0^4} \left(\frac{da_0}{dR}\right)^2 (\sqrt{F_1} + \sqrt{F_2})^2, \\ F_1 &\equiv F(1/a_0 k_c), \quad F_2 \equiv F(1/a_0 k_v). \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Как уже отмечалось, полученная величина вероятности перехода должна быть усреднена по всем свободным состояниям в валентной зоне и зоне проводимости

$$\gamma = \int \int w_{if}(k_c, k_v) f_h(k_c) (1 - f_k(k_c)) dk_c dk_v. \quad (11)$$

Здесь f_h, f_k — функции распределения дырок и электронов. Далее рассматривается равновесие носителей в зонах. При вычислении интеграла (11) считаем предэкспоненциальные полиномиальные функции плавными по сравнению с экспонентами. Это приводит (11) к виду

$$\gamma = \frac{2^{21} \hbar^2 a_0^2 p_h Q_n}{M Z^3 r_0^4 \sqrt{2\pi z}} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{(x-y+b)^2 (kT)^2}{2z\hbar\omega} - y} dx dy, \quad (12)$$

где $b = (W + J - \varepsilon_g + \hbar \omega_{PM})^2 / (kT)^2$. Интеграл в (12) существенно различен при $b > 0$ и $b < 0$. При $b > 0, b \geq 1$ он равен $2\sqrt{\pi z} (\hbar \omega / kT) \exp \times \times [-(b-1/2)z(\hbar \omega / kT)^2]$. При $b < 0 \sqrt{2\pi z} (\hbar \omega / kT)$. Таким образом, для величины γ получаем соответственно

$$\gamma = \frac{2^{21} \sqrt{2} \hbar^2 a_0^2 p_h Q_n z^{1/2}}{M Z^3 r_0^4 b^{1/2}} \left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) e^{-\frac{W+J-\varepsilon_g}{kT}}, \quad (b > 0), \quad (13)$$

$$\gamma = \frac{2^{21} \hbar^2 Q_0^2 p_h Q_n \hbar \omega}{M Z^3 r_0^4 kT}, \quad (b < 0), \quad (14)$$

p_h — концентрация дырок, Q_n — плотность состояний в s -зоне. Случай $b < 0$ соответствует безактивационному процессу.

Атомный скачок, стимулированный рекомбинацией дырки с электроном, локализованным на рассматриваемом атоме, может происходить и без возбуждения второго электрона в s -зону, т. е. без Оже-процесса. Вероятность такого скачка вычислена в [4] и пропорциональна, в обозначениях настоящей работы $\exp [-(W' + \varepsilon_2 - \varepsilon_g) / kT]$, где W' — высота барьера для скачка однократно заряженного атома, тогда как W , входящее в (13), относится к двухзарядному атому. Различие в предэкспоненциальном множителе при скачках с Оже-рекомбинацией и без нее играет меньшую роль, чем разница между энергиями термической активации, поэтому условие того, что стимулированные атомные скачки преимущественно происходят с участием Оже-рекомбинации, приближенно имеет вид $W' > > W + \varepsilon_1$. Высоты барьеров для скачка одно- и двукратно заряженных дефектов могут различаться, как известно, в пределах нескольких десятых эВ.

Численные оценки при $da_0/dR = 0.1, r_0 = 5a_0/\lambda, a_n = 10^{20} \text{ см}^{-3}, p_h = 10^{17} \text{ см}^{-3}, Z = 2, M = 7M_{H_2}$ дают $\gamma = 3 \cdot 10^9 \exp [-(W + J - \varepsilon_g) / kT]$. Если применить полученные результаты к расчету коэффициента диффузии, стимулированный Оже-рекомбинацией, то $D = d^2 \gamma (d - \text{межатомное расстояние})$ и при приведенных параметрах составляет $(10^{-10} - 10^{-8}) \text{ см}^2/\text{с}$.

Использование неравновесных функций распределения f_h, f_k приводит к возможности значительного увеличения эффективности атомных скачков при наличии греющих полей, обусловленного усилением вклада f_h в вероятность скачка в соответствии с (11) [3, 4].

Л и т е р а т у р а

- [1] *Винецкий В. Л.* В кн.: Радиационная физика неметаллических кристаллов. Киев: Наукова думка, 1967, с. 30—34.
- [2] *Винецкий В. Л.* ФТТ, 1968, т. 10, № 7, с. 867—875.
- [3] *Chaika G. E., Vinetskii V. L.* Phys. St. Sol. (b), 1980, vol. 98, N 7, p. 727—734.
- [4] *Винецкий В. Л., Чайка Г. Е.* ФТТ, 1986, т. 28, № 11, с. 3489—3496.
- [5] *Weeks J. D., Tully G. C., Kimmerling L. C.* Phys. Rev. B, 1975, vol. 12, N 10, p. 3286—3292.
- [6] *Sumi H.* Phys. Rev. B, 1984, vol. 19, N 9, p. 4614—4630.
- [7] *Пекар С. И.* Исследование по электронной теории кристаллов. М.: ГИТТЛ, 1951. 256 с.
- [8] *Кривоглаз М. А.* ЖЭТФ, 1953, т. 25, № 2 (8), с. 191—207.

Одесский электротехнический
институт связи им. А. С. Попова
Одесса

Поступило в Редакцию
15 октября 1986 г.
В окончательной редакции
25 сентября 1987 г.

