

УДК 548.732

## РАЗОГРЕВ ЛОКАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ ПРИ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

*В. Н. Абакумов, А. А. Пахомов, И. Н. Ясиевич*

Исследована неравновесность, возникающая в системе локальных фононов при рекомбинации через глубокие примесные центры. Показано, что «хвост» энергетического распределения локальных фононов существенно отличается от равновесного вплоть до энергий порядка ширины запрещенной зоны  $E_g$ . Рассмотрены процессы захвата электронов и дырок сильно возбужденными примесными центрами. Показано, что вероятность этих процессов велика и при больших уровнях инжекции неравновесных носителей именно эти процессы становятся определяющими. Характер рекомбинации при этом уже не описывается теорией Шокли—Рида—Холла. Обсуждается новый «электронный» механизм релаксации сильно возбужденных дефектов, обусловленный многократным последовательным выбросом «горячих» и захватом «холодных» электронов (дырок).

Процессы безызлучательной рекомбинации через глубокие примесные центры обычно рассматриваются в рамках модели Шокли—Рида—Холла [1, 2]. В основе этой модели лежит предположение о последовательном захвате на центр разноименных носителей. Считается, что система примесных центров находится в термодинамическом равновесии с решеткой.

Существуют, однако, процессы, свидетельствующие о неравновесности системы локальных фононов, возникающей в ходе рекомбинации. Ярким примером таких процессов может служить открытая Кимерлингом и Лэнгом рекомбинационно-стимулированная диффузия дефектов [3].

Данная работа посвящена исследованию неравновесности, возникающей в системе локальных фононов при рекомбинации, и выяснению условий, при которых эта неравновесность может существенно влиять на сам процесс рекомбинации. В работе использованы результаты теории многофононных переходов [4, 5]. Существенным является тот факт, что процесс захвата носителя может быть разбит на две стадии. На первой стадии система «свободный носитель + невозбужденный центр» переходит без изменения энергии в состояние «связанный носитель + сильно возбужденный центр». На второй стадии это возбуждение диссипирует в решетку. Таким образом, в каждом акте захвата в систему локальных колебаний вносится энергия  $E \geq \varepsilon_T$  ( $\varepsilon_T$  — термическая энергия ионизации центра,  $\varepsilon_T \gg kT$ ). Это приводит к тому, что «хвост» энергетического распределения локальных фононов при больших энергиях существенно отличается от равновесного даже при быстрой диссипации. Наличие этого неравновесного «хвоста» существенно влияет на процессы, характеризующиеся большой энергией активации, в частности на диффузию дефектов.

В разделе 1 получена система кинетических уравнений для нахождения неравновесных функций распределения в системе локальных фононов с учетом многофононных процессов рекомбинации и ионизации; разделы 2—5 посвящены подробному рассмотрению двух конкретных примеров: полужизолирующего полупроводника и сильно легированного полупроводника  $p$ -типа. Показано, что наличие неравновесности в «хвосте» энергетического распределения может изменить темп рекомбинации. Обсуждается

новый «электронный» механизм энергетической релаксации сильно возбужденных дефектов.

В Приложении проведен расчет вероятности захвата и выброса электронов и дырок при большой энергии колебаний для области классически разрешенных многофононных переходов. Получено распределение по энергии вылетающих при этом носителей.

## 1. Система кинетических уравнений

Получим систему уравнений, описывающую кинетику заселенности примесных центров с учетом многофононных процессов рекомбинации и ионизации носителей. Будем для определенности считать, что эти центры имеют единственный глубокий донорный уровень, отстоящий от дна зоны проводимости на энергию  $\epsilon_{TC}$  (термическая энергия ионизации электрона), а от валентной зоны — на энергию  $\epsilon_{TV}$  (термическая энергия ионизации дырки,  $\epsilon_{TV} = \epsilon_g - E_{TC}$ ). Донорный центр может находиться в двух состояниях: состоянию 1 отвечает центр, занятый электроном; состоянию 2 — пустой донорный центр. Соответственно ве-

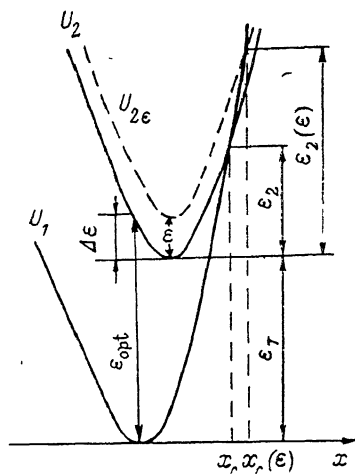


Рис. 1. Система адиабатических термов в модели Хуанга и Рис [6].

Терм  $U_1$  отвечает заполненному центру, терм  $U_{2\epsilon}$  — пустому центру и свободному носителю с энергией  $\epsilon$  (терм  $U_{20}$ , отвечающий нулевой кинетической энергии носителя, показан сплошной линией);  $\epsilon_T$ ,  $\epsilon_{opt}$  — термическая и оптическая энергии ионизации центра.

дем две функции распределения  $f_1(E_1)$ ,  $f_2(E_2)$ , где  $E_1$ ,  $E_2$  — энергии колебаний примесного центра в состояниях 1, 2. Функции  $f_1$ ,  $f_2$  нормированы условием

$$\int_0^{\infty} dE_1 f_1(E_1) \rho_1(E_1) = f, \quad \int_0^{\infty} dE_2 f_2(E_2) \rho_2(E_2) = 1 - f. \quad (1)$$

Здесь  $f$  — степень заполнения донорного центра электронами;  $\rho_1$ ,  $\rho_2$  — плотности состояния в системе локальных колебаний. В рамках одномодовой модели, которая будет использоваться в настоящей работе,  $\rho_{1,2} = 1/\hbar\omega_{1,2}$ , где  $\omega_{1,2}$  — частоты локальных колебаний в состояниях 1, 2.

Многофононные переходы удобно описывать с помощью системы адиабатических колебательных потенциалов (термов). Рассмотрим в качестве примера многофононную ионизацию электрона с глубокого донорного центра. Система «примесный центр («ядро») + электрон» может находиться в состоянии  $|1\rangle$  (электрон связан на доноре) и в состоянии  $|2, \epsilon\rangle$ , отвечающему пустому донорному центру и свободному электрону с кинетической энергией  $\epsilon$ . Состоянию  $|1\rangle$  отвечает адиабатический потенциал  $U_1(x)$  ( $x$  — конфигурационная координата локальных колебаний), состоянию  $|2, \epsilon\rangle$  — адиабатический потенциал  $U_{2\epsilon}(x) = U_{20}(x) + \epsilon$ . На рис. 1 представлена схема адиабатических потенциалов, соответствующая модели Хуанга и Рис [6], в которой потенциалы  $U_1(x)$ ,  $U_2(x)$  представляют собой одинаковые параболы со смещенными положениями равновесия. (Соответственно  $\omega_1 = \omega_2$ ). В [5] была показана применимость этой модели для описания рекомбинации через глубокий донорный уровень симметрии  $A_1$  в прямозонных полупроводниках  $A^3B^5$ . В рамках классического описания движения «ядра» переход системы из состояния  $|1\rangle$  в состояние  $|2, \epsilon\rangle$  имеет место в точке встречи термов  $x_c(\epsilon)$  ( $U_1(x_c(\epsilon)) = U_{2\epsilon}(x_c(\epsilon))$ ) (рис. 1). Такой переход возможен, если энергия колебаний в состоянии 1  $E > \epsilon_{TC} +$

$+\varepsilon_{2c}(\varepsilon)+\varepsilon$ , где  $\varepsilon_{2c}(\varepsilon)$  — энергия колебаний в состоянии  $|2, \varepsilon\rangle$ , отвечающая точке встречи  $x_c(\varepsilon)$  (рис. 1). В области  $\varepsilon_{TC}+\varepsilon < E < \varepsilon_{2c}(\varepsilon)+\varepsilon_{TC}+\varepsilon$  переход из состояния  $|1\rangle$  в состояние  $|2, \varepsilon\rangle$  возможен лишь туннельным образом, что сильно уменьшает вероятность ионизации. При меньших энергиях ионизация с вылетом электрона с энергией  $\varepsilon$  вообще не имеет места.

Наряду с процессом ионизации центра может происходить и обратный процесс захвата свободного электрона с кинетической энергией  $\varepsilon$ . При этом система «электрон+ядро» переходит из состояния  $|2, \varepsilon\rangle$  в состояние  $|1\rangle$ . Процессы ионизации и захвата дырок могут быть рассмотрены аналогичным образом.

Систему кинетических уравнений для функций  $f_{1,2}(E)$  можно представить в виде

$$\begin{aligned} \rho_1(E) \frac{\partial f_1(E)}{\partial t} = & \int d\varepsilon W_n(E; \varepsilon) \rho_1(E) [n \mathcal{F}_n(\varepsilon) f_2(E - \varepsilon_{TC} - \varepsilon) - f_1(E)] + \\ & + \int d\varepsilon W_p(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_2(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon) \times \\ & \times [f_2(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon) - p \mathcal{F}_p(\varepsilon) f_1(E)] + I_R[f_1], \end{aligned} \quad (2a)$$

$$\begin{aligned} \rho_2(E) \frac{\partial f_2(E)}{\partial t} = & \int d\varepsilon W_p(E; \varepsilon) \rho_2(E) [p \mathcal{F}_p(\varepsilon) f_1(E - \varepsilon_{TV} - \varepsilon) - f_2(E)] + \\ & + \int d\varepsilon W_n(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_1(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon) \times \\ & \times [f_1(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon) - n \mathcal{F}_n(\varepsilon) f_2(E)] + I_R[f_2]. \end{aligned} \quad (2b)$$

Первый член в правой части уравнения (2a) описывает приход центров из состояния 2 в состояние 1 за счет захвата электронов и их уход из состояния 1 за счет эмиссии электронов;  $W_n(E; \varepsilon)$  — вероятность ионизации в единицу времени центра с энергией колебаний  $E$  с вылетом электрона с кинетической энергией  $\varepsilon$ . При этом учтено, что скорости эмиссии и захвата носителей связаны между собой в силу квантовомеханического принципа обратности [7]. Второй член в правой части (2a) описывает приход центров в состояние 1 за счет эмиссии и их уход в состояние 2 за счет захвата дырки;  $W_p(E; \varepsilon)$  — вероятность ионизации центра с энергией  $E$  с вылетом дырки с энергией  $\varepsilon$ . Первый член в уравнении (2b) описывает переходы центра за счет захвата и испускания дырок, а второй член — за счет испускания и захвата электронов.

Функции  $\mathcal{F}_{n,p}(\varepsilon)$  описывают энергетическое распределение электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне;  $n$  и  $p$  — их концентрации. Здесь и далее мы предполагаем, что эти распределения равновесные. Такое предположение оправдано, когда энергетическая релаксация свободных электронов и дырок является наиболее быстрым процессом. Функции  $\mathcal{F}_{n,p}(\varepsilon)$  нормированы условиями

$$\int_0^{\infty} d\varepsilon \rho_n(\varepsilon) \mathcal{F}_n(\varepsilon) = 1, \quad \int_0^{\infty} d\varepsilon \rho_p(\varepsilon) \mathcal{F}_p(\varepsilon) = 1, \quad (3)$$

где  $\rho_n(\varepsilon)$ ,  $\rho_p(\varepsilon)$  — плотности состояний в зоне проводимости и в валентной зоне.

Члены  $I_R[f_1]$ ,  $I_R[f_2]$  описывают энергетическую релаксацию системы локальных колебаний в состояниях 1, 2. Будем предполагать, что эта релаксация происходит за счет развала локальных колебаний на решеточ-

<sup>1</sup> При выводе системы (2) пренебрегалось взаимодействием свободных электронов и дырок между собой.

ные. Предполагая, что потеря энергии происходит малыми порциями, запишем члены  $I_R [f_{1, 2}]$  в приближении Фоккера—Планка [7]

$$I_R [f_i] = \frac{\partial}{\partial E} \left\{ B_i (E) \left[ f_i (E) + kT \frac{\partial f_i (E)}{\partial E} \right] \right\}; \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

где  $B_i$  — коэффициент динамического трения  $B_i (E) = E \rho_i (E) / \tau_{iE}$ ;  $\tau_{iE}$  — время энергетической релаксации локальных колебаний центра в состояниях 1, 2. Здесь и далее будем предполагать это время одинаковым для состояний 1, 2 и не зависящим от энергии колебаний:  $\tau_{1E} = \tau_{2E} \equiv \tau_E$ . Удобно ввести вероятности эмиссии электронов и дырок в единицу времени при энергии колебаний  $E$

$$e_n (E) = \int d\varepsilon W_n (E; \varepsilon), \quad e_p (E) = \int d\varepsilon W_p (E; \varepsilon). \quad (5)$$

Введем также коэффициенты захвата электронов  $C_n (E)$  и дырок  $C_p (E)$ , характеризующие вероятность захвата носителей в единицу объема в единицу времени свободным центром с энергией колебаний  $E$

$$C_n (E) = \int d\varepsilon W_n (E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon; \varepsilon) \mathcal{F}_n (\varepsilon) \frac{\rho_1 (E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon)}{\rho_2 (E)},$$

$$C_p (E) = \int d\varepsilon W_p (E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon; \varepsilon) \mathcal{F}_p (\varepsilon) \frac{\rho_2 (E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon)}{\rho_1 (E)}. \quad (6)$$

Экспоненциально убывающие функции распределения  $\mathcal{F}_{n,p} (\varepsilon)$  ограничивают область интегрирования по  $\varepsilon$  масштабом  $\varepsilon \sim kT$ , что позволяет члены в уравнениях (2), описывающие приход центров в состояние 1 за счет захвата электронов и приход центров в состояние 2 за счет захвата дырок, приближенно представить в виде

$$\int d\varepsilon W_n (E; \varepsilon) \mathcal{F}_n (\varepsilon) f_2 (E - \varepsilon_{TC} - \varepsilon) \rho_1 (E) \approx C_n (E - \varepsilon_{TC}) f_2 (E - \varepsilon_{TC}) \rho_2 (E - \varepsilon_{TC}),$$

$$\int d\varepsilon W_p (E; \varepsilon) \mathcal{F}_p (\varepsilon) f_1 (E - \varepsilon_{TV} - \varepsilon) \rho_2 (E) \approx C_p (E - \varepsilon_{TV}) f_1 (E - \varepsilon_{TV}) \rho_1 (E - \varepsilon_{TV}). \quad (7)$$

Таким образом, для системы (2) с учетом (4)—(7) имеем

$$\rho_1 (E) \frac{\partial f_1 (E)}{\partial t} = n C_n (E - \varepsilon_{TC}) f_2 (E - \varepsilon_{TC}) \rho_2 (E - \varepsilon_{TC}) -$$

$$- p C_p (E) f_1 (E) \rho_1 (E) - e_n (E) f_1 (E) \rho_1 (E) +$$

$$+ \int d\varepsilon W_p (E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_2 (E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon) f_2 (E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial E} \left\{ B_1 (E) \left[ f_1 (E) + kT \frac{\partial f_1 (E)}{\partial E} \right] \right\}, \quad (8a)$$

$$\rho_2 (E) \frac{\partial f_2 (E)}{\partial t} = p C_p (E - \varepsilon_{TV}) f_1 (E - \varepsilon_{TV}) \rho_1 (E - \varepsilon_{TV}) -$$

$$- n C_n (E) f_2 (E) \rho_2 (E) - e_p (E) f_2 (E) \rho_2 (E) +$$

$$+ \int d\varepsilon W_n (E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_1 (E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon) f_1 (E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial E} \left\{ B_2 (E) \left[ f_2 (E) + kT \frac{\partial f_2 (E)}{\partial E} \right] \right\}. \quad (8b)$$

Уравнение для колебательной функции распределения  $f (E)$  с учетом многофононных процессов захвата и ионизации впервые было получено в [8]. При этом, однако, в отличие от (2), (8) не различались свободные и занятые состояния центра; так что оба зарядовых состояния описывались одной функцией распределения.

В уравнения (8) в качестве параметра входят значения концентраций электронов  $n$  и дырок  $p$ . Для получения замкнутой системы уравнения (8) следует дополнить уравнением баланса частиц в одной из зон <sup>2</sup> и условием электронейтральности. Ниже в стационарных условиях ( $\partial f_{1,2}/\partial t=0$ ) будут подробно рассмотрены два случая: полуизолирующего полупроводника и сильно легированного полупроводника  $p$ -типа.

## 2. Полуизолирующий полупроводник

Рассмотрим для определенности полуизолирующий полупроводник с глубокими донорами, в котором в термодинамическом равновесии доли заполненных центров  $f_0$  и пустых  $1-f_0$  соизмеримы. Концентрации свободных носителей в равновесных условиях пренебрежимо малы,  $n_0 \approx p_0 \approx 0$ . В режиме стационарного возбуждения устанавливаются концентрации свободных электронов  $n$ , дырок  $p$  и степень заполнения центров  $f$ , связанные между собой уравнением электронейтральности

$$n - (f_0 - f)N = p, \quad (9)$$

где  $N$  — концентрация глубоких доноров. Уравнения баланса избыточных носителей в зонах соответственно имеют вид

$$G = nN(1-f)\langle C_n \rangle - \langle e_n \rangle Nf + \gamma np, \quad G = pNf\langle C_p \rangle - N(1-f)\langle e_p \rangle + \gamma np. \quad (10)$$

Здесь  $G$  — темп внешней генерации;  $\langle e_n, p \rangle$ ,  $\langle C_n, p \rangle$  — средние коэффициенты эмиссии и захвата электронов и дырок, связанные с коэффициентами  $e_n, p(E)$ ,  $C_n, p(E)$  соотношениями

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{C_n}{e_p} \right\rangle &= \frac{1}{1-f} \int \rho_2(E) f_2(E) \left\{ \frac{C_n(E)}{e_p(E)} \right\} dE, \\ \left\langle \frac{C_p}{e_n} \right\rangle &= \frac{1}{f} \int \rho_1(E) f_1(E) \left\{ \frac{C_p(E)}{e_n(E)} \right\} dE. \end{aligned} \quad (11)$$

Член  $\gamma np$  описывает межзонную излучательную рекомбинацию электронов и дырок, которая вносит существенный вклад в общий рекомбинационный поток в полупроводниках  $A^3B^5$  при большой накачке.

Для определения вида функций распределения  $f_{1,2}$  будем решать систему (8) в стационарных условиях ( $\partial f_{1,2}/\partial t=0$ ) совместно с уравнениями (9), (10) с учетом соотношений (11). Отметим, что члены, описывающие энергетическую релаксацию в (8), имеют порядок  $f_{1,2}/\tau_E$ , в то время как члены, описывающие изменение заселенности центров за счет процессов захвата, имеют порядок  $p\langle C_p \rangle f_1$ ,  $n\langle C_n \rangle f_2$ . Концентрации  $n$  и  $p$  зависят от скорости внешней генерации  $G$ , поэтому уравнение (8) для случая достаточно малой генерации можно решать методом последовательных приближений. В первом приближении можно пренебречь в (8) генерационными и рекомбинационными потоками. Тогда приходим к равновесным энергетическим распределениям

$$f_1^{(1)}(E) = \frac{f^{(1)}}{\rho_1 kT} \exp\left\{-\frac{E}{kT}\right\}, \quad f_2^{(1)}(E) = \frac{1-f^{(1)}}{\rho_2 kT} \exp\left\{-\frac{E}{kT}\right\}. \quad (12)$$

Для нахождения степени заполнения глубокого уровня  $f^{(1)}$  и концентраций  $n$  и  $p$  следует использовать уравнения (9), (10). Это приближение соответствует рекомбинационной схеме Шокли—Рида—Холла [1, 2], где предполагается существование термодинамического равновесия между системой центров и решеткой. Темп рекомбинации определяется наиболее медленным из времен захвата  $\tau_n = (N\langle C_n \rangle)^{-1}$ ;  $\tau_p = (N\langle C_p \rangle)^{-1}$ .

<sup>2</sup> Из трех уравнений баланса частиц в зоне проводимости, валентной зоне и на центре независимы лишь два. После интегрирования любого из уравнений (8) по энергии колебаний  $E$  получаются уравнения, определяющие баланс частиц на центре.

Вычислим теперь следующую поправку к функциям распределения  $f_{1,2}^{(1)}(E)$ . Для этого подставим  $f_{1,2}^{(1)}(E)$  в первые четыре слагаемые системы (8), описывающие рекомбинационные и генерационные потоки. В нашем случае концентрации избыточных носителей  $n, p$  значительно превышает их равновесные значения, поэтому членами в (8), описывающими тепловую генерацию электронов и дырок, можно пренебречь. В результате для определения поправок  $f_{1,2}^{(2)}(E)$  получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{d}{dE} [B_1(E) f_1^{(2)}(E)] + n C_n (E - \varepsilon_{TC}) f_2^{(1)}(E - \varepsilon_{TC}) f_2(E - \varepsilon_{TC}) - \\ - p C_p (E) f_1^{(1)}(E) p_1(E) = 0, \\ \frac{d}{dE} [B_2(E) f_2^{(2)}(E)] + p C_p (E - \varepsilon_{TV}) f_1^{(1)}(E - \varepsilon_{TV}) p_1(E - \varepsilon_{TV}) - \\ - n C_n (E) f_2^{(1)}(E) p_2(E) = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь мы пренебрегаем членами в (5), описывающими диффузионный поток вверх по энергии. (Такое приближение оправдано при  $E \gg kT$ ).

Как отмечалось в разделе 1, при  $E < \varepsilon_2$  переход системы из колебательного состояния 2 в колебательное состояние 1 возможен лишь за счет туннелирования «ядра». Вероятность такого перехода резко (экспоненциально) возрастает с ростом энергии колебаний  $E$ . В то же время заселенность колебательных состояний  $f_{1,2}^{(1)}(E)$  экспоненциально убывает с ростом  $E$ . В результате произведение  $C(E) f^{(1)}(E)$  имеет резкий максимум при энергии  $E = E_0(T)$ ,  $E_0 \ll \varepsilon_2$  — оптимальной энергии термостимулированных переходов [4, 5]. В актуальной области температур ширина этого

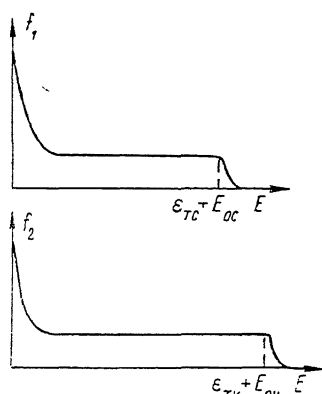


Рис. 2. Схематический вид колебательных функций распределения с учетом неравновесных поправок для случая полужолирующего полупроводника.

пика  $\delta E \ll \varepsilon_T$ , поэтому решения уравнений (13) можно приближенно представить в виде

$$f_1^{(2)}(E) = \frac{n \langle C_n \rangle_1 p \langle C_p \rangle_1}{n \langle C_n \rangle_1 + p \langle C_p \rangle_1} \frac{1}{B_1(E)} [\Theta(E - E_{0c}) - \Theta(E - \varepsilon_{TC} - E_{0c})], \quad (14a)$$

$$f_2^{(2)}(E) = \frac{n \langle C_n \rangle_1 p \langle C_p \rangle_1}{n \langle C_n \rangle_1 + p \langle C_p \rangle_1} \frac{1}{B_2(E)} [\Theta(E - E_{0v}) - \Theta(E - \varepsilon_{TV} - E_{0v})]. \quad (14b)$$

Здесь  $\Theta(E)$  — функция Хевисайда («ступенька»);  $E_{0c}$ ,  $E_{0v}$  — оптимальные энергии термостимулированных туннельных переходов «ядра» при захвате электронов и дырок. При выводе (14) использовалось соотношение

$$n \langle C_n \rangle_1 (1 - f^{(1)}) = p \langle C_p \rangle_1 f^{(1)}, \quad (15)$$

которое следует из (10) в пренебрежении тепловой эмиссии электронов и дырок. Коэффициенты захвата  $\langle C_{n,p} \rangle_1$  получены при усреднении коэффициентов  $C_{n,p}(E)$  с функциями первого приближения  $f_{1,2}^{(1)}(E)$ .

Вычисленные здесь поправки приводят к появлению плавных высокоэнергетических плато в области энергий  $E_{0v} < E < \varepsilon_{TC} + E_{0c}$  для функции  $f_1$  и при  $E_{0c} < E < \varepsilon_{TV} + E_{0v}$  для функции  $f_2$ .

Отличие произведения  $C(E) f^{(1)}(E)$  от  $\delta$ -функции, а также учет диффузионного потока вверх по энергии приводит к появлению дополнительных экспоненциальных малых «хвостов» функций распределения в области энергий  $E > \varepsilon_T + E_0$ , которые в данной работе рассматриваться не будут.

Степень заполнения  $f^{(2)}$  следует теперь находить из уравнений (9), (10), в которых при вычислении коэффициентов захвата по формулам (14) надо использовать функции  $f_{1, 2}$  с учетом найденных поправок:  $f_i(E) = f_i^{(1)}(E) + f_i^{(2)}(E)$ , где  $f_i^{(1)}(E)$  определяются формулами (12), а  $f_i^{(2)}(E)$  — формулами (14). Схематические графики функций распределения приведены на рис. 2.

### 3. Учет излучательного канала захвата

Наряду с безызлучательным каналом захвата носителей существует и излучательный канал. Например, для  $A_1$ -уровня в прямозонных полупроводниках  $A^3B^5$  излучательный захват дырок связан с разрешенными оптическими переходами, в то же время излучательные переходы с захватом электронов оказываются запрещенными. Как отмечалось в [5], коэффициент многофононного захвата электронов на  $A_1$ -уровень значительно превышает коэффициент многофононного захвата дырок. Поэтому представляется вполне реальной ситуация, когда при малых отклонениях от равновесия захват электронов определяется многофононными переходами, а захват дырок — излучательными. В этом случае для описания баланса энергии на примесном центре в уравнении (8а) член  $pC_p(E)f_1(E)\rho_1(E)$  следует заменить на  $j_2(E)$  — скорость ухода центров из состояния 1 с энергией  $E$  в состояние 2 за счет излучательного захвата дырки, а в уравнении (8б)  $pC_p(E - \varepsilon_{TV})f_1(E - \varepsilon_{TV})\rho_1(E - \varepsilon_{TV})$  следует заменить на  $j_1(E)$  — скорость прихода в колебательное состояние 2 за счет того же процесса.

Используя принцип Франка—Кондона, скорость перехода центров из колебательного состояния 1 с энергией  $E$  в состояние 2 с энергией  $E'$  за счет испускания фотона можно приближенно представить в виде

$$W_{изл}(E, E') \approx pC_p^{изл} I(E, E'), \quad (16)$$

где  $C_p^{изл}$  — не зависящий от энергии колебаний коэффициент излучательного захвата дырок, а

$$I(E, E') = \left| \int dx \Psi_1(E, x) \Psi_2(E', x) \right|^2 \quad (17)$$

— квадрат интеграла перекрытия колебательных волновых функций в состояниях 1, 2. При этом для скоростей  $j_{1, 2}(E)$  имеем

$$j_1(E) = \int \rho_1 dE' W_{изл}(E', E) f_1(E') \rho_2, \quad (18)$$

$$j_2(E) = \int \rho_2 dE' W_{изл}(E, E') f_1(E) \rho_1 = pC_p^{изл} f_1(E) \rho_1. \quad (19)$$

При выводе последнего равенства использовано условие полноты колебательных волновых функций  $\int \rho_2 dE' I(E, E') = 1$ . В случае полуизолирующего полупроводника для нахождения функций распределения можно использовать метод последовательных приближений по схеме, изложенной в разделе 2. В первом приближении функции распределения по-прежнему определяются формулами (12), а для нахождения вторых поправок следует использовать уравнения (13), заменив в них член  $pC_p(E) f_1^{(1)}(E) \rho_1$  на  $pC_p^{изл} f_1^{(1)}(E) \rho_1$ , а член  $pC_p(E - \varepsilon_{TV}) \cdot f_1^{(1)}(E - \varepsilon_{TV}) \rho_1$  на

$$j_1^{(1)}(E) = \int \rho_1 dE' W_{изл}(E', E) f_1^{(1)}(E') \rho_2 = pC_p^{изл} f_1^{(1)\varphi}(E), \quad (20)$$

где функция  $\varphi(E)$  в случае сильного электрон-фононного взаимодействия в модели Хуанга и Рис ( $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ ) определяется выражением [9]

$$\varphi(E) = \frac{1}{\sqrt{\pi}Q(T)} \exp \left\{ - \frac{(E - \Delta\varepsilon)^2}{Q(T)} \right\}, \quad (21)$$

где

$$Q(T) = 2\hbar\omega\lambda z \operatorname{cth}(\hbar\omega/2kT),$$

$\Delta\varepsilon$  — энергия Франка—Кондона (разность оптической и термической энергий ионизации), характеризующая силу электрон-фононного взаимодействия. Решения системы (13) для этого случая имеют вид

$$f_1^{(2)}(E) = \frac{n\langle C_n \rangle_1 p C_p^{\text{нэл}}}{n\langle C_n \rangle_1 + p C_p^{\text{нэл}}} \frac{1}{B_1(E)} [\Theta(E) - \Theta(E - \varepsilon_{IC} - E_{0C})], \quad (22a)$$

$$f_2^{(2)}(E) = \frac{n\langle C_n \rangle_1 p C_p^{\text{нэл}}}{n\langle C_n \rangle_1 + p C_p^{\text{нэл}}} \frac{1}{B_2(E)} \Phi\left(\frac{E - \Delta\varepsilon}{\sqrt{Q(T)}}\right), \quad (22б)$$

где

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-z^2} dz.$$

Из (22a) видно, что в случае излучательного захвата дырок неравновесная поправка к функции распределения  $f_1^{(1)}(E)$  практически не изменилась по сравнению с (14a), в то же время поправка  $f_2^{(2)}(E)$  отлична от нуля лишь на интервале  $E \sim \Delta\varepsilon$ , поскольку основная часть энергии, выделившейся при захвате дырки, уносится фотоном.

#### 4. Изменение темпа рекомбинации при возбуждении локальных колебаний

При рекомбинационно-стимулированном разогреве локальных колебаний у функций распределения появляются неравновесные «хвосты» в области больших энергий  $E \sim \varepsilon_T$ . При достаточно сильном электрон-фононном взаимодействии эта область может перекрываться с областью классически разрешенных переходов, где коэффициент захвата возрастает на несколько порядков. Поэтому, даже если неравновесный «хвост» и мал по абсолютной величине, соответствующая ему поправка к коэффициенту захвата  $\langle \delta C \rangle$  может значительно превышать равновесное значение коэффициента захвата  $\langle C \rangle_0$ .

Как уже отмечалось, темп рекомбинации определяется наименьшими из коэффициентов захвата. В используемой нами модели — это коэффициент захвата дырок. Неравновесная добавка к коэффициенту захвата дырок  $\langle \delta C_p \rangle$  определяется выражением

$$\langle \delta C_p \rangle = \int_{\varepsilon_2V}^{\varepsilon_{TC} + E_{0C}} C_p(E) f_1^{(2)}(E) f_1 dE. \quad (23)$$

Подставив (14б) в (23), получим с учетом равенства  $B(E) = E_C \tau_E^{-1}$ , что хвост энергетического распределения начинает играть существенную роль в процессе рекомбинации (т. е. выполняется неравенство  $\langle \delta C_p \rangle \gg \langle C_p \rangle_0$ ) при концентрациях дырок

$$p_0 \geq p_* \equiv \left[ \tau_E \int_{\varepsilon_2V}^{\varepsilon_{TC} + E_{0C}} dE C_p(E)/E \right]^{-1}. \quad (24)$$

Неравенство, обратное (24), определяет область применимости статистики Шокли—Рида—Холла. Выражение для коэффициента захвата приведено в Приложении (формула (П. 9)). Подставив в (П. 9) параметры системы адиабатических потенциалов для уровня  $EL2$  в GaAs [5]:  $\Delta\varepsilon = 220$  мэВ,  $\hbar\omega = 19$  мэВ,  $\varepsilon_{TC} = 0.73$  эВ и приняв для времени энергетической релаксации значение  $\tau_E \sim 10^{-11}$  с, найдем, что статистика Шокли—Рида—Холла для этого уровня становится неприменимой при  $p \geq p_* = 10^{17}$  см<sup>-3</sup>. При этом безызлучательный канал захвата будет определяющим, даже если в равновесных условиях преобладал излучательный захват.



### 5. Сильно легированный полупроводник $p$ -типа

Рассмотрим сильно легированный полупроводник  $p$ -типа, содержащий глубокие донорные уровни. В равновесии все донорные центры опустошены:  $f_1^{(0)}(E) \approx 0$ . Будем предполагать, что равновесная концентрация дырок значительно превышает их избыточную концентрацию, так что  $p \approx p_0 = \text{const}$ . Представляет особый интерес случай, когда концентрация  $p_0$  настолько велика, что опустошение донорных центров со связанными электронами за счет захвата дырок происходит быстрее, чем «решеточная» энергетическая релаксация центров, т. е.

$$pC_p(E) > \tau_E^{-1}. \quad (25)$$

В этом случае возможен захват дырки непосредственно на примесный центр, находящийся в сильно возбужденном колебательном состоянии. При этом в систему локальных колебаний центра вносится энергия  $E$

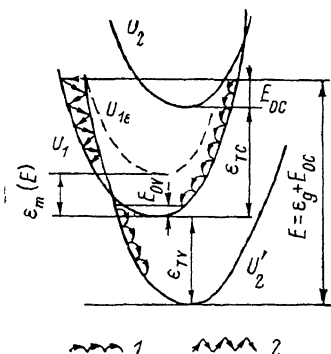


Рис. 3. Энергетическая релаксация локальных колебаний дефекта при многофононной рекомбинации.

1 — «решеточный» механизм релаксации (развал локальных фононов на решеточные), 2 — «электронный» механизм релаксации в сильно легированном полупроводнике  $p$ -типа (захват «холодных» и выброс горячих дырок). Терм  $U_1$  отвечает донорному центру со связанным электроном, терм  $U_2$ ,  $U_2'$  — пустому донорному центру при наличии и отсутствии электрон-дырочной пары соответственно.

порядка ширины запрещенной зоны  $\epsilon_g$  (рис. 3).<sup>3</sup> Ниже будет показано, что здесь возможно появление своеобразного «электронного» механизма энергетической релаксации сильно возбужденных дефектов, связанного с испусканием горячих носителей. В ходе дальнейшего рассмотрения ограничимся областью классически разрешенных переходов  $E > \epsilon_{2v} + \epsilon_{TV}$ , поскольку при меньших энергиях соответствующие вероятности переходов экспоненциально убывают.

Рассмотрим пустой донорный центр, находящийся в сильно возбужденном колебательном состоянии 2. Из рис. 3 видно, что классически разрешенными являются переходы с терма  $U_2'$  на термы  $U_{1s}$  вплоть до кинетической энергии  $\epsilon_m$ , определяемой равенством<sup>4</sup>

$$\epsilon_m + \epsilon_{2v}(\epsilon_m) + \epsilon_{TV} = E, \quad (26)$$

где  $\epsilon_{2v}(\epsilon)$  определяется соотношением

$$\epsilon_{2v}(\epsilon) = (\epsilon_{TV} + \epsilon - \Delta\epsilon)^2 / 4\Delta\epsilon. \quad (27)$$

Решая уравнение (26) с учетом (27), находим, что максимальная кинетическая энергия вылетевших дырок равна

$$\epsilon_m(E) \approx \frac{2\Delta\epsilon}{\epsilon_{TV} + \Delta\epsilon} (E - \epsilon_{1v}), \quad (28)$$

где  $\epsilon_{1v} = \epsilon_{2v} + \epsilon_{TV}$ ;  $\epsilon_{2v} \equiv \epsilon_{2v}(0)$ . Поскольку для большинства глубоких центров  $\Delta\epsilon \ll \epsilon_{TV}$ , из (28) следует, что вылетевшая дырка уносит лишь небольшую часть энергии колебаний центра.

<sup>3</sup> Возможность передачи системе колебаний дефекта всей энергии рекомбинирующей пары ( $\epsilon \approx \epsilon_g$ ) при рекомбинации через сильно возбужденные колебательные состояния дефекта впервые была исследована Суми [10].

<sup>4</sup> Напомним, что в данной работе система адиабатических термов описывается в рамках модели Хуанга—Рис [8], в которой все термы описываются одинаковыми параболой со смещенными положениями равновесия. Можно, однако, показать, что все качественные выводы данной работы не зависят от вида системы термов.

Поскольку мы положили концентрацию дырок настолько большой, что выполняется неравенство (25), примесной центр после понижения снова захватывает дырку. При этом, однако, его энергия уменьшается на величину порядка  $\epsilon_m$ . (Мы предполагаем, что энергия  $E$  настолько велика, что  $\epsilon_m(E) \gg kT$ , т. е. значительно превышает среднюю тепловую энергию носителей). Таким образом, в сильно легированном полупроводнике  $p$ -типа может иметь место своеобразный «электронный» механизм потерь энергии, связанный с многократным захватом «холодных» и выбросом горячих дырок.

Для количественного описания данного механизма релаксации выведем уравнение, определяющее вид функции распределения в области больших энергий

$$\epsilon_{1V} < E < \epsilon_g + \epsilon_{2c}. \quad (29)$$

Для этого воспользуемся системой уравнений (8) в стационарных условиях ( $\partial f_{1,2}/\partial t = 0$ ). В области энергий (29) основную роль играют классически разрешенные переходы, связанные с захватом и выбросом дырок; переходы с захватом и испусканием электронов при их малой концентрации ( $nC_n(E) \ll \tau_E^{-1}$ ) в данной области несущественны. Сдвинем начало отсчета энергий в уравнении (8а) на величину  $\epsilon_{TV}$ , что соответствует переходу к переменной  $E - \epsilon_{TV}$  (рис. 3). Складывая после этого уравнения (8а) и (8б), получим с учетом сделанных предположений

$$nC_n(E - \epsilon_g) f_2(E - \epsilon_g) + \int_0^\infty dz \{ W_p(E + z; z) f_2(E + z) - W_p(E; z) f_2(E) \} + \tau \frac{1}{\tau_2} \frac{d}{dE} \left\{ \left[ B_2(E) + \frac{\tau_2}{\tau_1} \frac{e_p(E) B_1(E - \epsilon_{TV})}{pC_p(E - \epsilon_{TV})} \right] f_2(E) \right\} = 0, \quad (30)$$

$$j_1(E) = \tau_2 e_p(E + \epsilon_{TV}) f_2(E + \epsilon_{TV}) / \tau_1 pC_p(E). \quad (31)$$

Уравнение (30) определяет вид неравновесной функции распределения в области больших энергий (29). При этом первый член в (30) играет роль источника, зависящего от функции распределения при малых энергиях  $E < \epsilon_{2c}$ , где энергетическое распределение можно считать равновесным. Действительно, в этой области энергий захват и выброс электронов возможны лишь за счет туннелирования «ядра». Скорости таких процессов обычно пренебрежимо малы по сравнению со скоростью энергетической релаксации локальных колебаний (см. раздел 2).

В случае, когда концентрация электронов не слишком велика ( $nC_n(E) \ll \tau_E^{-1}$ ), основная часть функции распределения  $f_2(E)$  сосредоточена в области энергий  $E < \epsilon_{2c}$  (мы предполагаем  $\epsilon_{2c} \gg kT$ ). Как отмечалось в разделе 2, произведение  $C_n(E - \epsilon_g) f_2^{(0)}(E - \epsilon_g)$  имеет резкий максимум при энергии  $E = \epsilon_g + E_{0c}(T)$ . Таким образом, при большой концентрации дырок возникает источник высоковозбужденных дефектов в колебательном состоянии 2 с энергией  $E = \epsilon_g + E_{0c}$ .

Используя малость кинетической энергии вылетевшей дырки ( $\epsilon_m(E) \ll E$ ), уравнение (30) можно свести к уравнению Фоккера—Планка

$$nC_n(E - \epsilon_g) f_2^{(0)}(E - \epsilon_g) + \frac{1}{\tau_2} \frac{d}{dE} \left\{ \left[ \frac{e_p(E) + pC_p(E - \epsilon_{TV})}{pC_p(E - \epsilon_{TV})} B_\epsilon(E) + \frac{\tau_2}{\tau_1} \frac{e_p(E) B_1(E - \epsilon_{TV})}{pC_p(E - \epsilon_{TV})} + B_2(E) \right] f_2(E) \right\} = 0, \quad (32)$$

где

$$B_\epsilon(E) = \frac{pC_p(E - \epsilon_{TV})}{e_p(E) + pC_p(E - \epsilon_{TV})} \frac{\tau_2 E}{\tau^*(E)} \equiv \frac{\tau_2 E}{\tau_\epsilon(E)}, \quad (33)$$

$$\frac{1}{\tau^*(E)} = \frac{1}{E} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon W_p(E; \epsilon). \quad (34)$$

$$\tau_e(E) = \frac{e_p(E) + pC_p(E - \varepsilon_{TV})}{pC_p(E - \varepsilon_{TV})} \tau^*(E) \quad (35)$$

характеризует новый механизм потерь энергии сильно возбужденными дефектами за счет захвата «холодных» и испускания горячих дырок.

Для выяснения смысла введенного «электронного» времени энергетической релаксации  $\tau_e$  рассмотрим случай, когда концентрация дырок настолько велика, что «электронный» механизм релаксации превалирует (т. е. когда  $B_e(E) \gg B_{1,2}(E)$ ;  $\tau_e \ll \tau_B$ ). Тогда уравнение (32) с учетом (31) можно переписать в виде

$$nC_n(E - \varepsilon_g) f_2^{(0)}(E - \varepsilon_g) \rho_2 + \frac{d}{dE} \left\{ \frac{E}{\tau_e} \bar{N}(E) \right\} = 0, \quad (36)$$

где первый член играет роль источника сильно возбужденных дефектов. В результате быстрых процессов эмиссии и захвата дырок между состояниями 1, 2 устанавливается динамическое равновесие. Величина  $\bar{N}(E) \equiv \equiv f_1(E - \varepsilon_{TV}) \rho_1 + f_2(E) \rho_2$  играет роль суммарной заселенности колебательных состояний в области больших энергий. Время  $\tau_e$ , согласно (36), характеризует энергетическую релаксацию распределения  $\bar{N}(E)$  как целого за счет передачи энергии электронной подсистеме. В Приложении показано, что «электронное» время релаксации можно представить в виде

$$\frac{1}{\tau_e(E)} = \gamma \frac{\varepsilon_m(E)}{E} pC_p(E - \varepsilon_{TV}), \quad (37)$$

где  $\gamma$  — числовой коэффициент порядка единицы.

Поскольку обычно  $\varepsilon_m/E \sim 0.1$ , «электронный» механизм вступает в действие при концентрации дырок, примерно на порядок большей, чем та, которая соответствует границе применимости неравенства (25). Отметим, что «электронный» механизм релаксации может проявляться не только при возбуждении колебаний центра за счет рекомбинации электрон-дырочной пары, но и при непосредственном возбуждении центров за счет интенсивного светового или ионизирующего излучений.

Поскольку в невырожденном полупроводнике справедливо неравенство<sup>5</sup>

$$pC_p(E - \varepsilon_{TV}) \ll e_p(E), \quad (38)$$

уравнение (32) можно переписать в виде

$$nC_n(E - \varepsilon_g) f_2^{(0)}(E - \varepsilon_g) \rho_2 + \frac{d}{dE} \left\{ \frac{e_p(E)}{pC_p(E - \varepsilon_{TV})} [B_e(E) + B_2(E - \varepsilon_{TV})] f_2(E) \right\} = 0. \quad (39)$$

Используя уравнения (31), (39), найдем функции распределения в интервале энергий  $E > \bar{E}$ , при которых справедливо неравенство (25)

$$f_2(E) = n \langle C_n \rangle_0 \frac{pC_p(E - \varepsilon_{TV})}{e_p(E)} \frac{\theta(\varepsilon_g + E_{00} - E)}{B_2(E - \varepsilon_{TV}) + B_e(E)}, \quad (40a)$$

$$f_1(E) = n \langle C_n \rangle_0 \frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{\theta(\varepsilon_{TC} + E_{00} - E)}{B_2(E) + B_e(E + \varepsilon_{TV})}. \quad (40b)$$

Вне области применимости (25) «решеточная» релаксация становится доминирующим механизмом потерь энергии и для нахождения функций распределения можно использовать методы, развитые в разделах 2, 3. Схематические графики функций распределения приведены на рис. 4.

<sup>5</sup> Неравенство (38) имеет место и в вырожденном случае, если характерная энергия вылетевших носителей  $\varepsilon \sim \varepsilon_m(E) > \varepsilon_F$  — энергии Ферми.

Таким образом, при больших концентрациях дырок функция энергетического распределения «пустых» донорных центров  $f_2(E)$  приобретает неравновесную добавку в области энергий  $E \leq \epsilon_g$ . Величина этой добавки зависит от концентраций электронов и дырок. В рассмотренном нами случае малой концентрации электронов высокоэнергетическая поправка практически не влияет на скорость рекомбинации, однако может играть важную роль в рекомбинационно-стимулированной диффузии дефектов. Отметим также резкую асимметрию энергетических распределений центров в состоянии 1 (донорный центр с электроном) и в состоянии 2 («пустой» донор).

В заключение этого раздела приведем оценку концентраций дырок, при которых справедливо неравенство (25). Подставив данные [5] для уровня  $EL2$  в GaAs ( $\epsilon_{TV} = 0.69$  эВ,  $\Delta \epsilon = -0.22$  эВ) в формулу (П. 9) Приложения и положив  $\tau_E \sim 10^{-11}$  с<sup>-1</sup>, найдем, что это неравенство выполняется при  $p > \bar{p} \sim 10^{19}$  см<sup>-3</sup>. Отметим, однако, что величина этой концентрации определяется коэффициентом захвата дырок в классически разрешенной области энергий. Этот коэффициент для

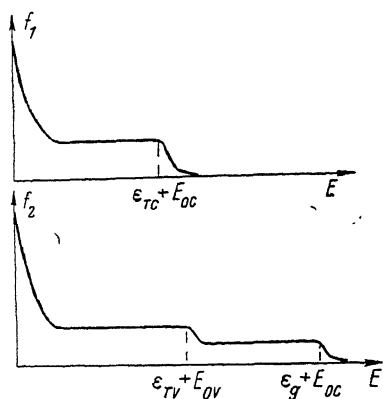


Рис. 4. Схематический вид неравновесных колебательных функций распределения для случая сильно легированного полупроводника  $p$ -типа.

разных центров может меняться на 1—2 порядка. В таких же пределах может изменяться и концентрация  $\bar{p}$ .

В данной работе неравновесность в системе локальных колебаний, возникающая при многофононной рекомбинации, исследована в рамках линейного по концентрациям электронов и дырок приближения. Такой подход позволил установить основные качественные закономерности энергетической релаксации в условиях сильного возбуждения локальных колебаний.

При вычислении коэффициентов захвата и эмиссии носителей в данной работе использовалась модель донорного уровня симметрии  $A_1$  в прямозонных полупроводниках  $A^3B^5$  [5]. Отметим, что для исследования рекомбинационно-стимулированного разогрева локальных колебаний данная модель не является оптимальной, так как приводит к резкой асимметрии коэффициентов захвата электронов и дырок. Выбор этой модели был обусловлен прежде всего ее простотой и наглядностью. Система кинетических уравнений (8) и основные выводы работы не зависят, однако, ни от типа примесных уровней, ни от способа создания неравновесных носителей.

Авторы признательны В. И. Перелю и М. К. Шейнкману за полезные обсуждения.

## П Р И Л О Ж Е Н И Е

### Вычисление коэффициентов эмиссии и захвата носителей в классически разрешенной области энергий

Рассмотрим донорный уровень симметрии  $A_1$  в рамках модели [5]. Локальные колебания (именуемые в дальнейшем колебаниями «ядра») приводят в силу электрон-фононного взаимодействия к изменению энергии уровня. В определенные моменты времени уровень может выталкиваться в сплошной спектр зоны проводимости и валентной зоны. При этом

становится возможным захват и выброс носителей. Когда уровень приближается к границе сплошного спектра, волновая функция локализованного носителя расплывается в пространстве и может быть описана в приближении эффективной массы. Рассмотрим в качестве примера захват и выброс дырок при выходе уровня  $A_1$  ( $\Gamma_6$  с учетом спина) в валентную зону. Волновая функция  $\Gamma_6$  состояния может быть представлена в виде [11]

$$\Psi_{A_1}(\Gamma_6) = \sqrt{2} (-1)^{M-1/2} R_1(r) \sum_{m\mu} \begin{pmatrix} 1/2 & 1 & 3/2 \\ -M & m & \mu \end{pmatrix} Y_{1m}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) u_{\mu}. \quad (\text{II. 1})$$

Здесь в круглых скобках —  $3j$ -символ Вигнера;  $Y_{1m}$  — сферические гармоники;  $u_{\mu}$  — блоховские амплитуды вершины валентной зоны, преобразующиеся как компоненты спинора ( $\mathcal{J}=3/2$ ). Используя сферический гамильтониан Латтинжера, можно получить уравнение для радиальной функции  $R_1(r)$  [10]

$$-\frac{\hbar^2}{2m_l} \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] R_1 + \left[ \frac{\hbar^2}{m_l r^2} - V_0(r) \right] R_1 = \varepsilon R_1, \quad (\text{II. 2})$$

где  $m_l$  — эффективная масса легких дырок.

Уравнение (II. 2) имеет вид обычного радиального уравнения Шредингера, которое наряду с короткодействующим потенциалом примесного центра  $V_0$  содержит центробежный член  $\hbar^2/m_l r^2$ , что приводит к образованию барьера, препятствующего развалу стационарного состояния при выходе уровня в сплошной спектр валентной зоны. В результате при выходе уровня в сплошной спектр связанное состояние не исчезает, а становится квазистационарным с конечной шириной уровня

$$\Gamma_V(\varepsilon) = (R_0/\hbar) \sqrt{2m_l} \varepsilon^{3/2} \quad (\text{II. 3})$$

и временем жизни  $\tau_V = \hbar/\Gamma_V(\varepsilon)$ , где  $\varepsilon$  — кинетическая энергия вылетающей при ионизации дырки;  $R_0$  — эффективный радиус потенциала центра, который обычно полагают величиной порядка постоянной решетки ( $R_0 \sim a \sim 5 \text{ \AA}$ ). Поскольку при  $\varepsilon \leq 1 \text{ эВ}$   $\Gamma_V(\varepsilon) \ll \varepsilon$ , при вычислении вероятности ионизации можно использовать адиабатическое приближение. Вероятность вылета дырки за время  $dt$  в интервал энергий  $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$  равна

$$P(E, \varepsilon) d\varepsilon = \frac{\Gamma_V(\varepsilon)}{\hbar} \frac{dt}{d\varepsilon} d\varepsilon. \quad (\text{II. 4})$$

Как показано в разделе 1, переход из состояния 2, соответствующего связанной на центре дырке, в состояние  $|1, \varepsilon\rangle$ , соответствующее свободной дырке, может произойти лишь в точке  $x_V(\varepsilon)$ , в которой пересекаются соответствующие адиабатические термы. Таким образом, каждому значению энергии вылетевшей дырки можно сопоставить определенное значение координаты  $x$ . Вычисление в рамках модели Хуанга—Рис [5] дает

$$\varepsilon(x) = \frac{2\Delta\varepsilon}{\varepsilon_{\text{пр}} + \Delta\varepsilon} M \omega^2 x_{V0} (x - x_{V0}), \quad (\text{II. 5})$$

где  $M$  — эффективная масса «ядра»;  $\omega$  — частота его колебаний;  $x_{V0}$  — точка встречи термов 1, 2, отвечающая нулевой кинетической энергии дырок. Производную  $dt/d\varepsilon$  можно преобразовать к виду

$$\frac{dt}{d\varepsilon} = \frac{dt}{dx} \frac{dx}{d\varepsilon} = \frac{1}{v_2(E, \varepsilon)} \frac{dx}{d\varepsilon}, \quad (\text{II. 6})$$

где

$$v_2(E, \varepsilon) = \sqrt{2[E - U_2(x(\varepsilon))]/M}$$

— скорость движения «ядра» в потенциале  $U_2$ . Зависимость  $x(\varepsilon)$  можно получить, обратив зависимость  $\varepsilon(x)$  (II. 5). Чтобы найти средний темп

выброса дырок, величину  $P(E, \varepsilon)$  нужно умножить на число проходов «ядра» в единицу времени за точку  $x_{T0}$ , равное  $\omega/2\pi$ . Кроме того, в формулу (П. 4) необходимо ввести множитель 2, поскольку за период колебаний «ядро» проходит через точку  $x_{T0}$  дважды. В результате получим

$$W_p(E; \varepsilon) = \frac{\omega}{2\pi} \cdot 2 \frac{\Gamma_V(\varepsilon)}{\hbar} \frac{1}{v_2(E, \varepsilon)} \frac{dx}{dz}$$

или

$$W_p(E; \varepsilon) = \begin{cases} \frac{R_0}{2\pi\hbar^2} \frac{\varepsilon^{3/2}\sqrt{m_l}}{\sqrt{(\varepsilon_{TV} + \Delta\varepsilon)(\varepsilon_m(E) - \varepsilon)}}, & \varepsilon < \varepsilon_m(E), \\ 0, & \varepsilon \geq \varepsilon_m(E), \end{cases} \quad (\text{П. 7})$$

где  $\varepsilon_m(E)$  определяется формулой (28).

Используя определение (6), получим для вероятности эмиссии дырки в единицу времени

$$e_p(E) = \int_0^{\infty} W_p(E; \varepsilon) d\varepsilon = \frac{3R_0\sqrt{m_l}}{8\hbar^2} \frac{\varepsilon_m^2(E)}{\sqrt{\varepsilon_{TV} + \Delta\varepsilon}}. \quad (\text{П. 8})$$

Коэффициент захвата дырок  $C_p(E)$  в силу (7) равен

$$C_p(E) = \frac{3\pi}{2\sqrt{2}} \frac{\hbar R_0}{m_l} \left(\frac{m_l}{m_h}\right)^{3/2} \frac{kT}{\sqrt{(\varepsilon_{TV} + \Delta\varepsilon)\varepsilon_m(E)}}. \quad (\text{П. 9})$$

Множитель  $(m_l/m_h)^{3/2}$  появился в (П. 9) в силу того, что при выходе  $A_1(\Gamma_6)$ -уровня в валентную зону он взаимодействует лишь с подзоной легких дырок.

Используя соотношения (П. 7), (34) для «электронного» времени энергетической релаксации, получим

$$\frac{1}{\tau_e(E)} = \frac{3}{5} \frac{\varepsilon_m(E)}{E} p C_p(E - \varepsilon_{TV}). \quad (\text{П. 10})$$

#### Список литературы

- [1] Shokley W., Read W. T. // Phys. Rev. 1952. V. 87. N 2. P. 855—861.
- [2] Hall R. // Phys. Rev. 1952. V. 87. N 2. P. 387—397.
- [3] Lang D. V., Kimerling L. C. // Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. N 8. P. 489—491.
- [4] Абакумов В. Н., Меркулов И. А., Перель В. И., Яснеевич И. Н. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. № 4(10). С. 1472—1486.
- [5] Абакумов В. Н., Курносова О. В., Пахомов А. А., Яснеевич И. Н. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 6. С. 1793—1802.
- [6] Huang K., Rhys A. // Proc. Roy. Soc. A. 1950. V. 204. N 1078. P. 406—423.
- [7] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М., 1979. 528 с.
- [8] Wheeks J. P., Tully J., Kimerling L. C. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 8. P. 406—423.
- [9] Бургуэн Ж., Ланну М. Точечные дефекты в полупроводниках. Экспериментальные аспекты: Пер. с англ. М., 1985. 304 с.
- [10] Sumi H. // Physica. 1983. V. 116B. N 1. P. 39—44.
- [11] Balderechi F., Lipari N. O. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 6. P. 2697—2709.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
7 июня 1989 г.