

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

АННИГИЛЯЦИЯ ПОЗИТРОНОВ НА ПРИМЕСЯХ С ГЛУБОКИМИ  
УРОВНЯМИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Е. П. Прокопьев

Научно-исследовательский институт материаловедения им. А. Ю. Малюгина, Москва, Россия

(Получено 16 декабря 1992 г. Принято к печати 5 апреля 1993 г.)

В работе [1] теоретически исследовался вопрос о факте тяготения позитронов к примесям с глубокими уровнями в полупроводниках, что в конечном итоге приводит к аномалиям во временных спектрах аннигиляции и в спектрах углового распределения аннигиляционных фотонов (УРАФ). Позднее в [2-4] в экспериментальных спектрах УРАФ полупроводников  $A^{III}B^V$ , содержащих различные примеси металлов с глубокими уровнями (GaAs (Cr), GaP (Cu) и так далее), действительно наблюдалось изменение формы и положения этих спектров (сужение кривых УРАФ). Удалось выделить узкую компоненту  $I_N$  из спектров УРАФ и определить ее полуширину  $\Gamma$ . Наблюдалось [5] также увеличение среднего времени жизни позитронов относительно аннигиляции в GaAs (Cr). Эти результаты позволили определить из аннигиляционных спектров концентрацию глубоких акцепторов Cr в GaAs, равную примерно  $10^{16} + 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Был сделан вывод об избирательности аннигиляции позитронов на глубоких акцепторах Cr, что имеет важное практическое значение. В последующее время теория примесей с глубокими уровнями получила дальнейшее развитие [6, 7]. Били предложены достаточно реалистические модели нейтральных, отталкивающих и притягивающих центров с глубокими уровнями, что позволило вычислить поперечное сечение их фотоионизации.

В настоящем сообщении в рамках теории [6, 7] проводятся расчеты основных характеристик аннигиляции позитронов, связанных на нейтральных и отрицательно заряженных примесях с глубокими уровнями. Огибающую электронную волновую функцию в области коры глубокого центра (область I) для основного состояния выбираем в виде функции для квадратной ямы [7]

$$\psi_1 = A_1 J_0(\alpha r) Y_{00}(\theta, \varphi), \quad (1)$$

где  $A_1$  — константа,  $I_0(\alpha r)$  — сферическая функция Бесселя нулевого порядка,  $Y_{00}(\theta, \varphi)$  — сферическая гармоника нулевого порядка, а

$$\alpha^2 = \frac{2m_T^*}{\hbar^2} (V_0 - E_T). \quad (2)$$

Здесь  $V_0$  — глубина ямы,  $m_T^*$  — эффективная масса электрона в области коры примеси металла, а  $E_T$  — глубина уровня. Снаружи коры (область II) потенциал является кулоновским (притягивающим или отталкивающим) или плоским

$$V(r) = -\frac{ze^2}{\epsilon r}, \quad r_0 \ll r, \quad (3)$$

так что волновую функцию электрона в области II можно выбрать в виде [7]

$$\psi_H \approx A_H \left( \frac{2r}{\nu a^*} \right)^{\mu-1} \exp(-r/\nu a^*) Y_{00}(\theta, \varphi). \quad (4)$$

Здесь  $\nu = (R^*/E_T)^{1/2}$ ,  $\mu = z(R^*/E_T)^{1/2}$ ,  $R^* = (e^2/\epsilon)^2/2(\hbar^2/m^*)$ ,  $a^* = (\hbar^2/m^*)/(e^2\epsilon)$ , где  $R^*$  — эффективная постоянная Ридберга,  $a^*$  — эффективный борковский радиус. Величина  $\mu = 0$  для нейтрального центра и  $\mu = 1$  для водородного центра. Постоянные  $A_1$  и  $A_H$  равны

$$A_1 = \alpha r_0^{-1/2} \left[ \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\sin 2\alpha r_0}{2\alpha r_0} \right) + \left( \frac{\nu a^*}{2r_0} \right)^{2\mu+1} \sin^2 \alpha r_0 \Gamma \left( 2\mu + 1, \frac{2r}{\nu a^*} \right) \right]^{-1/2}, \quad (5)$$

$$A_H = (\nu a^*/2r_0)^{\mu-1} \sin \alpha r_0 \exp(r_0/\nu a^*) (2A_1/\pi). \quad (6)$$

В отличие от [1] позитронную волновую функцию позитрона, связанного на глубоком центре, выбираем не в виде волновой функции метода эффективной массы (приближение «слабой связи»), а в виде волновой функции метода потенциала с нулевым радиусом [8] (приближение «сильной связи»)

$$\psi_+(r) = \sqrt{\kappa/2\pi} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad (7)$$

$$E = -\kappa^2/2. \quad (8)$$

Здесь  $E$  — энергия связи позитрона на глубоком центре в атомных единицах.

Основными характеристиками аннигиляции позитрона, связанного на примесях с глубокими уровнями, являются доплеровское уширение аннигиляционной линии (ДУАЛ), УРАФ и время жизни позитрона относительно двухфотонной аннигиляции. Спектры ДУАЛ и УРАФ рассчитываются одинаково. Для кривых УРАФ, согласно [4, 5], можем записать хорошо известное соотношение

$$P_{nl}(k_z) = \int_{k_z}^{\infty} s_{nl}^2 k^{2l+1} dk / \int_0^{\infty} s_{nl}^2 k^{2l+1} dk, \quad (9)$$

где

$$S_{nl} = k^{-l} \int \psi_+ \psi_{j_l}(\mathbf{kr}) d^3\mathbf{r}. \quad (10)$$

Здесь  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  — суммарный импульс центра масс аннигилирующих электронно-позитронных пар.

В выражении (9)  $j_l(\mathbf{kr})$  представляет собой сферическую функцию Бесселя  $l$ -порядка. Подставляя (1), (5) и (7) в (10), получаем

$$S_{10}(r) \approx \frac{\sqrt{2\kappa}}{\kappa\alpha} A_1 \frac{1}{4} \ln \frac{\beta^2 + (k + \alpha)^2}{\beta^2 + (k - \alpha)^2} + \frac{\sqrt{2\kappa}}{k} A_H (2/\nu a^*)^{\mu-1} \times \\ \times \frac{1}{2} (\beta + ik)^{-\mu} \Gamma[\mu, (\beta + ik)r_0] - \frac{i}{2} (\beta - ik)^{\mu} \Gamma[\mu, (\beta - ik)r_0], \quad (11)$$

где  $\beta = (1/\nu\alpha^* + \kappa)$ ,  $\Gamma(z)$  — неполная гамма-функция [9, 10]. Вычисления (11) в случае  $\mu = 0$  (нейтральный центр) дают

$$S_{10}(r) \approx \frac{\sqrt{2\kappa}}{k\alpha} \frac{A_1}{4} \ln \frac{\beta^2 + (k + \alpha)^2}{\beta^2 + (k - \alpha)^2} + \frac{\sqrt{2\kappa}}{k} A_H (2/\nu\alpha^*)^{-1} \operatorname{arctg} \frac{k}{\beta}. \quad (12)$$

В случае кулоновской задачи ( $\mu = 1$ ) в свою очередь имеем

$$S_{10}(r) \approx \frac{\sqrt{2\kappa}}{k\alpha} \frac{A_1}{4} \ln \frac{\beta^2 + (k + \alpha)^2}{\beta^2 + (k - \alpha)^2} + \frac{\sqrt{2\kappa}}{k} A_H \frac{e^{-\beta r_0} (\beta \sin kr_0 + k \cos kr_0)}{k^2 + \beta^2}. \quad (13)$$

Подставляя (12) и (13) в (9), мы вычислили функцию  $P(k_r)$ , которую здесь не приводим из-за громоздкости выражения. Приведем лишь приближенное выражение для полуширины  $\Gamma$  кривых УРАФ  $P(k_z)$  для случая  $\mu = 1$

$$\Gamma \approx 5.16 [\beta + (\alpha^2 + \beta^2)^{1/2}], \text{ мрад}. \quad (14)$$

Время жизни позитрона в связанном состоянии, усредненное по спиновым состояниям электрона глубокого центра, позитрона и поляризациям излучаемых фотонов, может быть записано в виде

$$\tau = 5 \cdot 10^{-10} (\rho_0/\rho), \quad (15)$$

где

$$\rho = \int \psi_z^2 \psi^2 d^3r. \quad (16)$$

Вычисления по (15), (16) с учетом (1), (5) и (7) позволяют записать следующие выражения для времен жизни. В случае аннигиляции позитрона на нейтральном центре ( $\mu = 1$ ) имеем

$$\tau \approx \frac{5 \cdot 10^{-10}}{4\kappa \left\{ (A_1^2/\alpha^2) \left[ \alpha \operatorname{arctg} \frac{\alpha}{\kappa} + \frac{\kappa}{2} \ln \frac{\kappa^2}{\kappa^2 + \alpha^2} \right] + A_H^2 \left( \frac{\nu\alpha^*}{2} \right)^2 (e^{-2\beta r_0}/2\beta r_0^2) \right\}}. \quad (17)$$

В случае кулоновского центра ( $\mu = 1$ ) имеем в свою очередь

$$\tau \approx \frac{5 \cdot 10^{-10}}{4\kappa \left\{ (A_1^2/\alpha^2) \left[ \alpha \operatorname{arctg} \frac{\alpha}{\kappa} + \frac{\kappa}{2} \ln \frac{\kappa^2}{\alpha^2 + \kappa^2} \right] + (A_H^2/2\beta) e^{-2\beta r_0} \right\}}. \quad (18)$$

Для оценок полуширин  $\Gamma$  кривых УРАФ и времен жизни позитрона  $\tau$  используем, согласно [7, 11], следующие значения параметров в атомных единицах:  $\alpha = 0.27$ ,  $\nu^* = 0.148$ ,  $a^* \approx 1000$ ,  $r_0 \approx 10$ ,  $\kappa \approx 0.09$ , так что расчет по формуле (17) с учетом (5), (6) дает ( $\mu = 0$ )

$$\tau \approx 1.67 \cdot 10^{-8} \text{ с}. \quad (19)$$

Аналогичный расчет для кулоновского центра в свою очередь дает

$$\tau \approx 10^{-7} \text{ с}, \quad (20)$$

а расчет полуширины  $\Gamma$  кривых УРАФ по формуле (14) дает в случае ( $\mu = 1$ )

$$\Gamma \approx 2.0 \text{ мрад}. \quad (21)$$

Таким образом, согласно (19)—(21), основные характеристики аннигиляции позитронов в связанных состояниях на примесях с глубокими уровнями в полупроводниках имеют аномально долгие времена жизни и достаточно малую полуширину кривых УРАФ Г, что и позволило наблюдать канал аннигиляции позитронов на глубоких центрах в кремнии и полупроводниках  $A^{III}B^V$  [ $2^{-5}$ ]. Полученные результаты несомненно способствуют правильной интерпретации и пониманию экспериментальных позитронных аннигиляционных спектров полупроводников, содержащих примеси с глубокими уровнями.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Е. П. Прокопьев. ФТТ, 16, 730 (1974).
- [2] П. У. Арифов, Н. Ю. Арутюнов, А. З. Ильясов, Е. П. Прокопьев, Ю. Н. Кузнецов, Л. А. Иванютин. ФТП, 12, 891 (1978).
- [3] П. У. Арифов, Н. Ю. Арутюнов, А. З. Ильясов, Е. П. Прокопьев, Ю. Н. Кузнецов, Л. А. Иванютин, В. В. Батавин, А. Г. Литош, С. Э. Бочкарев. Электронная техника, сер. 6. Материалы, вып. 7, 46 (1978).
- [4] Е. П. Прокопьев. Деп. в ЦНИИ «Электроника», Р-2837, 384. М. (1979).
- [5] Е. П. Прокопьев, Ю. Н. Кузнецов, Ф. Р. Хашимов. Деп. в ЦНИИ «Электроника», Р-2073, 343. М. (1976).
- [6] В. К. Ridley. J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 13, 2015 (1980).
- [7] М. А. Amato, В. К. Ridley. J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 13, 2027 (1980).
- [8] Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике, 240. М. (1975).
- [9] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, 1100. М. (1963).
- [10] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Лёш. Специальные функции, 344. М. (1968).
- [11] Е. П. Прокопьев. Деп. в ЦНИИ «Электроника», Р-3973, 14. М. (1984).

Редактор В. В. Чалдышев

ФТП, том 27, вып. 9, 1993

### ВЛИЯНИЕ НАЧАЛЬНОГО ЗАПОЛНЕНИЯ ГЛУБОКИХ ЦЕНТРОВ НА ПОЛОЖЕНИЕ ПИКА ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОГО ТОКА В $n^+ - p$ -ПЕРЕХОДЕ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ОТНОШЕНИЕМ КОНЦЕНТРАЦИЙ МЕЛКИХ И ГЛУБОКИХ ЦЕНТРОВ

Н. А. Урманов, М. В. Гафурова

Физико-технический институт им. С. В. Стародубцева Академии наук Узбекистана,  
700084, Ташкент, Узбекистан

(Получена 13 марта 1993 г. Принята к печати 13 апреля 1993 г.)

Температура  $T_m$ , при которой расположен максимум пика термостимулированного тока (ТСТ), является важной характеристикой спектра ТСТ. Если переход является асимметричным ( $p^+ - n$ - или  $n^+ - p$ -типа) и в слабо легированной стороне перехода концентрация глубоких центров  $N_d$  существенно меньше концентрации нескомпенсированных мелких примесей  $N_a$ , то имеет место соотношение  $e(T_m) = \beta E / kT^2$  [ $^1$ ], в котором  $e(T_m)$  — величина скорости термической эмиссии  $e = e_0 \exp(-E/kT)$  при  $T = T_m$ ,  $E$  — энергия активации,  $\beta$  — скорость нагрева при линейном повышении температуры  $T = T_0 + \beta t$ . Соотношение относится к случаю, когда при  $T = T_0$  объемный заряд на глубоких центрах (начальная поляризация перехода) отсутствует, оно позволяет определить значение  $e(T_m)$  (см. [ $^2$ ]). Однако на практике условие отсутствия начальной поляризации не всегда выполняется.