

УДК 621.315.592

## РАЗОГРЕВ ЛОКАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ ПРИ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ И РЕКОМБИНАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Обзор

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

Излагается последовательная теория разогрева локальных колебаний при безызлучательной рекомбинации в полупроводниках. Обсуждаются основные механизмы возбуждения и релаксации локальных колебаний дефектов.

Анализируются рекомбинационно-стимулированные реакции в полупроводниках. Теория разогрева локальных колебаний применяется для вычисления скорости рекомбинационно-стимулированных реакций, а также для интерпретации экспериментальных данных по неупругому распылению поверхности твердых тел ионной бомбардировкой и лазерному отжигу в полупроводниках.

Традиционное направление материаловедения полупроводников, стимулированное потребностями микроэлектроники, обычно лежит в русле исследований влияния примесей и дефектов кристаллической решетки на электронные свойства полупроводников. В последние годы, однако, все больший интерес вызывает обратная задача: изучение влияния электронной подсистемы с высокой концентрацией носителей на свойства дефектной системы кристаллов [1]. Особенно ярко этот интерес проявляется в проблемах, связанных с деградацией полупроводниковых электронных и оптоэлектронных приборов (в частности, при интенсификации лазерном или радиационном воздействии). Сильным толчком к исследованиям этого типа послужило открытие в семидесятых годах рекомбинационно-стимулированных дефектных реакций, в частности рекомбинационно-стимулированного отжига дефектов [2, 3].

К настоящему времени выполнено большое число экспериментальных и теоретических работ, посвященных этим вопросам. Значительная часть этих работ посвящена выяснению микроскопического механизма рекомбинационно-стимулированных дефектных реакций [4] и гл. 2 настоящей обзора). Одна из наиболее ярких идей, выдвинутая Зейцем с соавт. [5], состояла в том, что ускорение дефектных реакций происходит за счет сосредоточения энергии рекомбинирующей электронно-дырочной пары в окрестности дефекта. В 1975 г. Виксом, Талли и Кимерлингом [6] была высказана идея о том, что рекомбинационно-стимулированные реакции связаны с возбуждением локальных колебаний при многофононной безызлучательной рекомбинации электронов и дырок через дефекты с глубокими уровнями. Развитие этой идеи, однако, сдерживалось недостаточной разработанностью теории многофононных переходов. В 70—80 гг. в этой области был достигнут значительный прогресс [7—10]. Это позволило развить последовательную микроскопическую теорию разогрева локальных колебаний при многофононной рекомбинации и применить ее к анализу дефектных реакций.

Несмотря на то, что идея об ускорении дефектных реакций за счет энергии, выделяющейся при рекомбинации, была высказана уже давно, она не нашла

достаточного отражения в монографической и обзорной литературе. Данный обзор имеет своей целью восполнить этот пробел.

Обзор состоит из трех частей. В первой части рассмотрены основные механизмы возбуждения и энергетической релаксации локальных колебаний дефектов. Наряду с традиционным механизмом релаксации за счет ангармонизма колебаний обсуждаются два специфических механизма релаксации, актуальных при сильном разогреве локальных колебаний в условиях большой концентрации неравновесных носителей. Первый — «электронный» — механизм связан с захватом на дефект «холодных» и выбросом горячих носителей, второй — обусловлен рождением сильно возбужденным дефектом электрон-дырочных пар.

Вторая часть посвящена анализу рекомбинационно-стимулированных реакций в полупроводниках. Дан обзор альтернативных теоретических моделей этих реакций. Теория разогрева локальных колебаний применяется для вычисления скорости рекомбинационно-стимулированных реакций. В заключение обсуждаются эксперименты по рекомбинационно-стимулированному отжигу дефектов.

В третьей части теория разогрева локальных колебаний используется для интерпретации экспериментальных данных по неупругому распылению поверхности твердых тел под действием ионной бомбардировки, а также к лазерному отжигу полупроводников.

В *Приложениях* приведены основные результаты теории многофононных процессов, которые существенно используются при описании разогрева локальных колебаний.

## 1. Разогрев локальных колебаний при рекомбинации

Процесс безызлучательной рекомбинации электрон-дырочной пары сопровождается передачей колебаниям решетки энергии порядка ширины запрещенной зоны полупроводника  $\epsilon_g$ . Если за процесс рекомбинации ответственно взаимодействие носителей с локальными колебаниями дефектов, то эта энергия оказывается сосредоточенной вблизи дефекта. Обычно ширина запрещенной зоны полупроводника  $\epsilon_g \sim 1$  эВ, т. е. имеет тот же порядок величины, что и характерные энергии электронных связей дефекта. Поэтому сосредоточение в окрестности дефекта энергии порядка  $\epsilon_g$  может привести к перестройке этих связей, т. е. инициировать дефектную реакцию (например, скачок дефекта или рекомбинацию пары Френкеля).

Процесс рекомбинации электрон-дырочной пары на глубоком центре происходит в два этапа: сначала на дефект захватывается электрон, а затем — дырка (последовательность может быть и обратной). В широкой области температур (как правило, уже при  $T \geq 70$  К) захват носителей определяется главным образом многофононными процессами.

Физическая картина многофононного захвата состоит в следующем [7, 8]. На первом этапе система «свободный электрон + невозбужденный дефект» без изменения энергии переходит в состояние «связанный электрон + возбужденный дефект». При этом дефект переходит в сильно возбужденное колебательное состояние с энергией порядка термической энергии ионизации дефекта  $\epsilon_T$ . На второй стадии возбужденный дефект релаксирует по энергии обычно за счет распада локальных фононов на решеточные колебания [11]. Ясно, что при этом в стационарных условиях должно установиться энергетическое распределение в системе локальных колебаний, высокоэнергетический «хвост» которого существенно отличается от равновесного.

*1.1. Система кинетических уравнений.* Система уравнений, описывающая кинетику заселения колебательных состояний дефекта с учетом многофононных процессов захвата и эмиссии электронов и дырок, была рассмотрена в [12]. При этом учитывалось, что в ходе рекомбинации дефект может находиться в двух зарядовых состояниях. Соответственно распределение дефектов по энергии колебаний  $E$  в момент времени  $t$  характеризуется двумя функциями распределения:  $f_{1,2}(E, t)$ . Будем считать, что дефект со связанным электроном

находится в зарядовом состоянии 1, а дефект без электрона — в состоянии 2. Функции  $f_{1,2}(E, t)$  будем нормировать условиями

$$\int_0^{\infty} f_1(E, t) \rho_1(E) dE = f; \quad \int_0^{\infty} f_2(E, t) \rho_2(E) dE = 1 - f, \quad (1.1)$$

где  $f$  — степень заполнения центра электронами,  $\rho_1(E)$ ,  $\rho_2(E)$  — плотности колебательных состояний дефекта.

Согласно [12], систему кинетических уравнений для функций  $f_{1,2}(E, t)$  можно записать в виде

$$\begin{aligned} \rho_1(E) \frac{\partial f_1(E, t)}{\partial t} = & \int_0^{\infty} d\varepsilon W_n(E; \varepsilon) \rho_1(E) [nF_n(\varepsilon) f_2(E - \varepsilon_{TC} - \varepsilon, t) - f_1(E, t)] - \\ & - \int_0^{\infty} d\varepsilon' W_p(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon'; \varepsilon') \rho_2(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon') \times \\ & \times [pF_p(\varepsilon') f_1(E, t) - f_2(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon', t)] + I[f_1], \end{aligned} \quad (1.2a)$$

$$\begin{aligned} \rho_2(E) \frac{\partial f_2(E, t)}{\partial t} = & \int_0^{\infty} d\varepsilon' W_p(E; \varepsilon') \rho_2(E) [pF_p(\varepsilon') f_1(E - \varepsilon_{TV} - \varepsilon', t) - f_2(E, t)] - \\ & - \int_0^{\infty} d\varepsilon W_n(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_1(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon) \times \\ & \times [nF_n(\varepsilon) f_2(E, t) - f_1(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon, t)] + I[f_2]. \end{aligned} \quad (1.2b)$$

Первый член в правой части (1.2a) описывает приход центров в состояние 1 за счет захвата электронов и уход центров из этого состояния за счет эмиссии электронов. При этом учтено, что при захвате электрона с кинетической энергией  $\varepsilon$  на дефект в состоянии 2 энергия локальных колебаний увеличивается на величину  $\varepsilon_{TC} + \varepsilon$ , где  $\varepsilon_{TC}$  — термическая энергия ионизации дефекта с вылетом электрона (рис. 1);  $W_n(E; \varepsilon)$  — вероятность эмиссии в единицу времени электрона с кинетической энергией  $\varepsilon$  дефектом с энергией колебаний  $E$ . Скорости эмиссии и захвата носителей связаны между собой в силу квантово-механического принципа обратимости [13]. Второй интегральный член в правой части (1.2a) описывает уход центров из состояния 1 за счет захвата дырок с кинетической энергией  $\varepsilon'$  и приход центров в состояние 1 за счет эмиссии дырок;  $\varepsilon_{TV}$  — энергия термоионизации дефекта с вылетом дырки,  $W_p(E; \varepsilon')$  — скорость эмиссии дырки с кинетической энергией  $\varepsilon'$  дефектом с энергией колебаний  $E$ .

Аналогично, первый член в правой части (1.2b) описывает приход центров в состояние 2 с энергией  $E$  и их уход за счет захвата электронов. Второй член описывает переходы дефекта за счет захвата и эмиссии дырок.

Функции распределения электронов и дырок по кинетическим энергиям  $F_{n,p}(\varepsilon)$  нормированы условиями

$$\int_0^{\infty} F_{n,p}(\varepsilon) \rho_{c,v}(\varepsilon) d\varepsilon = 1, \quad (1.3)$$

где  $\rho_{c,v}(\varepsilon)$  — плотности состояний электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне;  $n, p$  — концентрации электронов и дырок. Интегралы столкновений  $I[f_{1,2}]$  описывают энергетическую релаксацию локальных колебаний дефекта в состояниях 1, 2 за счет взаимодействия с термостатом (решеточными колебаниями). Предполагая, что потеря энергии происходит малыми порциями, запишем члены  $I[f_{1,2}]$  в приближении Фоккера—Планка [13]:

$$I[f_i] = \frac{\partial}{\partial E} \left\{ B_i(E) \left[ f_i(E, t) + kT \frac{\partial f_i(E, t)}{\partial E} \right] \right\}_{i=1,2}, \quad (1.4)$$

где  $B_i(E)$  — коэффициенты динамического трения в состояниях 1, 2:

$$B_i(E) = \frac{E\rho_i(E)}{\tau_{i,E}}, \quad (1.5)$$

где  $\tau_{i,E}$  — времена энергетической релаксации локальных колебаний в состояниях 1, 2.

Удобно ввести скорости эмиссии электронов и дырок дефектом с энергией колебаний  $E$ :

$$e_{n,p}(E) = \int_0^{\infty} d\varepsilon W_{n,p}(E; \varepsilon). \quad (1.6)$$

Введем также коэффициенты захвата электронов и дырок  $c_{n,p}(E)$ , характеризующие скорость захвата носителей в единице объема дефектом с энергией колебаний  $E$ :

$$c_n(E) = \int_0^{\infty} d\varepsilon W_n(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon; \varepsilon) F_n(\varepsilon) \frac{\rho_1(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon)}{\rho_2(E)}, \quad (1.7a)$$

$$c_p(E) = \int_0^{\infty} d\varepsilon W_p(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon; \varepsilon) F_p(\varepsilon) \frac{\rho_2(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon)}{\rho_1(E)}. \quad (1.7b)$$

Систему уравнений (1.2) можно упростить, если считать функции распределения электронов и дырок по кинетическим энергиям квазиравновесными с эффективными температурами электронов и дырок  $T_e, T_h$ . Такое предположение оправдано в случае, когда энергетическая релаксация свободных электронов и дырок является наиболее быстрым процессом.

В этом случае экспоненциально убывающие функции распределения ограничивают область интегрирования по  $\varepsilon$  масштабом  $\varepsilon \sim kT_{e,h} \ll \varepsilon_{TC}, \varepsilon_{TV}$ , что позволяет члены в уравнениях (1.2), описывающие приход центров в состояние 1 за счет захвата электронов и приход центров в состояние 2 за счет захвата дырок, приближенно записать в виде

$$\int_0^{\infty} d\varepsilon W_n(E; \varepsilon) F_n(\varepsilon) f_2(E - \varepsilon_{TC} - \varepsilon) \rho_1(E) \approx c_n(E - \varepsilon_{TC}) f_2(E - \varepsilon_{TC}) \rho_2(E - \varepsilon_{TC}), \quad (1.8a)$$

$$\int_0^{\infty} W_p(E; \varepsilon) F_p(\varepsilon) f_1(E - \varepsilon_{TV} - \varepsilon) \rho_2(E) \approx c_p(E - \varepsilon_{TV}) f_1(E - \varepsilon_{TV}) \rho_1(E - \varepsilon_{TV}). \quad (1.8b)$$

С учетом соотношений (1.6)–(1.8) в стационарных условиях ( $\partial f_{1,2}/\partial t = 0$ ) система (1.2) принимает вид

$$nc_n(E - \varepsilon_{TC}) f_2(E - \varepsilon_{TC}) \rho_2(E - \varepsilon_{TC}) - [pc_p(E) + e_n(E)] f_1(E) \rho_1(E) + \int_0^{\infty} d\varepsilon W_p(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_2(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon) f_2(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon) + \frac{d}{dE} \left\{ B_1(E) \left[ f_1(E) + kT \frac{df_1(E)}{dE} \right] \right\} = 0, \quad (1.9a)$$

$$pc_p(E - \varepsilon_{TV}) f_1(E - \varepsilon_{TV}) \rho_1(E - \varepsilon_{TV}) - [nc_n(E) + e_p(E)] f_2(E) \rho_2(E) + \int_0^{\infty} d\varepsilon W_n(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_1(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon) f_1(E + \varepsilon_{TC} + \varepsilon) + \frac{d}{dE} \left\{ B_2(E) \left[ f_2(E) + kT \frac{df_2(E)}{dE} \right] \right\} = 0. \quad (1.9b)$$

Рис. 1. Схема электронных и дырочных переходов при рекомбинации через дефект с глубоким уровнем. Состоянию 1 соответствует дефект со связанным электроном, состоянию 2 — дефект без электрона.

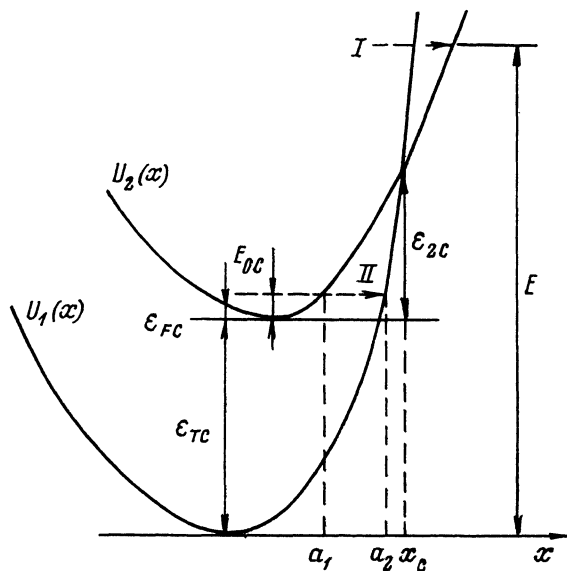
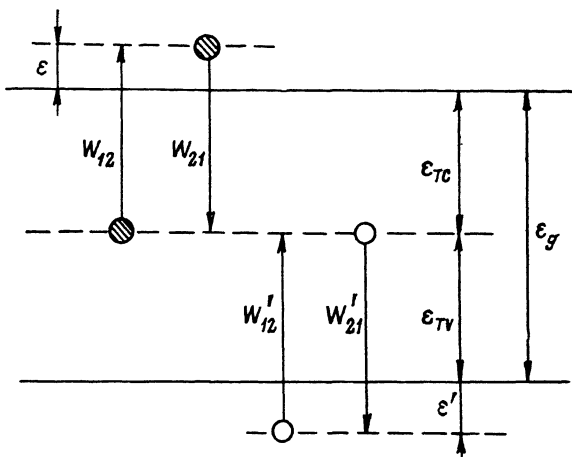


Рис. 2. Схема адиабатических потенциалов (термов) для описания переходов дефекта с эмиссией и захватом электрона.

$I$  — переходы в классически разрешенной области энергий,  $II$  — переходы при туннелировании ядра.

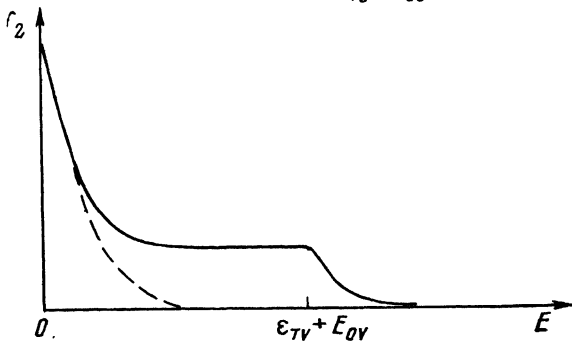
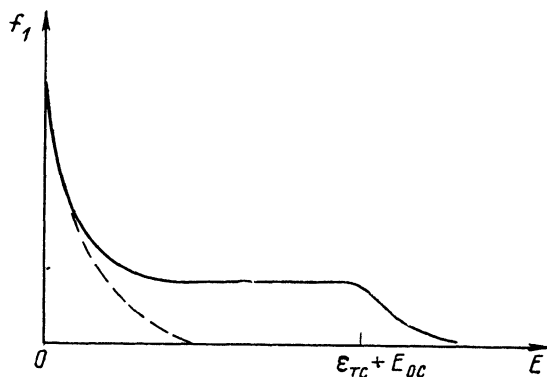


Рис. 3. Схематические графики неравновесных функций распределения дефектов по энергиям колебаний при слабом разогреве локальных колебаний.

Штрихами показаны функции распределения в нулевом приближении (без учета многофононных переходов).

Уравнение для функции распределения дефектов по энергиям колебаний с учетом процессов рекомбинации электронов и дырок впервые было получено Виксом, Талли и Киммерлингом [6], которые использовали подход Райса—Рамсбергера—Касселя [14], развитый для описания молекулярных химических реакций. В этом подходе, однако, не различались занятые электроном и «пустые» дефекты, так что оба зарядовых состояния описывались одной функцией распределения. Кроме того, в [6] не учитывались процессы многофононной эмиссии носителей, которые, как будет показано далее, играют важную роль в формировании высокоэнергетических хвостов функций распределения  $f_{1,2}(E)$  в условиях больших концентраций неравновесных носителей. Наконец, в [6] игнорировалась зависимость коэффициентов захвата от энергии колебаний.

Обсудим энергетическую зависимость коэффициентов захвата и эмиссии носителей. При этом для простоты будем пренебрегать кинетической энергией захватываемых и выбрасываемых носителей  $\epsilon$  по сравнению с энергией колебаний  $E$ . В простейшем однододовом приближении многофононные переходы удобно описывать с помощью адиабатических потенциалов (термов) — потенциальных кривых, полученных при усреднении полного гамильтониана системы «электрон + локальные колебания» по электронным координатам. В дальнейшем для краткости будем называть локальные колебания колебаниями «ядра». Состоянию 1 (электрон связан на дефекте) отвечает адиабатический потенциал  $U_1(x)$ , где  $x$  — координата ядра. Состоянию 2 (пустой центр + свободный электрон) отвечает адиабатический потенциал  $U_2(x)$  (рис. 2). В рамках классического описания движения ядра переход дефекта из состояния 1 в состояние 2 (т. е. ионизация дефекта) и обратный переход из состояния 2 в состояние 1 (т. е. захват электрона) могут произойти лишь в точке встречи термов  $x_c$  ( $U_1(x_c) = U_2(x_c)$ ). Таким образом, ионизация дефекта возможна, если энергия колебаний в состоянии 1 удовлетворяет неравенству  $E > \epsilon_{TC} + \epsilon_{2c}$ , где  $\epsilon_{2c}$  — энергия колебаний в состоянии 2, отвечающая точке встречи ( $\epsilon_{2c} = U_2(x_c)$ ). Соответственно коэффициент захвата электронов отличен от нуля, лишь когда энергия колебаний в состоянии 2 превышает энергию  $\epsilon_{2c}$ . Этой области энергий соответствует сравнительно слабая (обычно степенная) зависимость коэффициентов захвата и эмиссии носителей от энергии колебаний.

В рамках квантово-механического описания движения ядра возможны переходы и при меньших энергиях. Захват электронов может теперь иметь место и для дефекта в состоянии 2 с энергией  $E < \epsilon_{2c}$ . Эта область энергий соответствует экспоненциально малому перекрытию колебательных волновых функций дефекта в состояниях 1, 2. Переходы в этой области энергий можно наглядно интерпретировать как туннелирование ядра через наклонный потенциальный барьер, разделяющий состояния 1, 2 (рис. 2). Вероятность такого перехода экспоненциально возрастает с ростом энергии колебаний вплоть до энергии  $E = \epsilon_{2c}$ . В то же время заселенности колебательных состояний  $f_{1,2}(E)$  в равновесных условиях экспоненциально убывают с ростом  $E$ . Так как для большинства дефектов энергия  $\epsilon_2 \gg kT$ , захват электронов происходит при оптимальной энергии перехода  $E = E_{0c}(T)$ , при которой произведение  $c_n(E) f_2(E)$  имеет максимум (такой переход называют термостимулированным туннелированием [8]). Таким образом, в результате акта захвата электрон переходит в сильно возбужденное колебательное состояние 1 с энергией  $E = \epsilon_{TC} + E_{0c}(T)$ . Рассмотрение эмиссии электронов, а также захвата и эмиссии дырок может быть проведено полностью аналогично. Явные выражения для коэффициентов эмиссии и захвата в однододовой модели приведены в *Приложении 1*. Изменения, которые необходимо внести в формулы для вероятностей многофононных переходов в случае, когда имеется несколько мод локальных колебаний, обсуждаются в *Приложении 2*.

1.2. *Слабый разогрев локальных колебаний.* Рассмотрим случай, когда скорость поступления энергии в систему локальных колебаний за счет многофононного захвата электронов и дырок значительно меньше скорости обмена энергией с термостатом, т. е. выполняется неравенство

$$nc_n(E), pc_p(E) \ll \tau_E^{-1}, \quad (1.10)$$

где  $\tau_E$  — время энергетической релаксации локальных колебаний. В этом случае систему (1. 9) можно решать методом последовательных приближений. В нулевом приближении можно пренебречь в (1. 9) рекомбинационными и генерационными потоками. Тогда приходим к равновесным энергетическим распределениям

$$f_1^{(0)}(E) = A_1 \exp\left\{-\frac{E}{kT}\right\}; \quad f_2^{(0)}(E) = A_2 \exp\left\{-\frac{E}{kT}\right\}, \quad (1. 11)$$

где нормировочные константы  $A_1$  и  $A_2$  определены условиями (1. 1). Вычислим теперь неравновесные функции распределения в первом приближении  $f_{1,2}^{(1)}(E)$ . Для этого подставим  $f_{1,2}^{(0)}(E)$  в первые четыре слагаемых системы (1. 9), описывающие рекомбинационные и генерационные потоки. В случае, когда концентрации избыточных носителей  $n, p$  значительно превышают их равновесные значения, членами в (1. 9), описывающими тепловой выброс электронов и дырок дефектом, можно пренебречь. В результате в стационарных условиях,<sup>1</sup> получаем следующую систему для определения неравновесных функций распределения в первом приближении  $f_{1,2}^{(1)}(E)$ :

$$\frac{d}{dE} \left\{ B_1(E) \left[ f_1^{(1)}(E) + kT \frac{df_1^{(1)}(E)}{dE} \right] \right\} + n_c(E - \varepsilon_{TC}) f_2^{(0)}(E - \varepsilon_{TC}) \times \\ \times \rho_2(E - \varepsilon_{TC}) - p_p(E) f_1^{(0)}(E) \rho_1(E) = 0, \quad (1. 12a)$$

$$\frac{d}{dE} \left\{ B_2(E) \left[ f_2^{(1)}(E) + kT \frac{df_2^{(1)}(E)}{dE} \right] \right\} + p_p(E - \varepsilon_{TV}) f_1^{(0)}(E - \varepsilon_{TV}) \times \\ \times \rho_1(E - \varepsilon_{TV}) - n_c(E) f_2^{(0)}(E) \rho_2(E) = 0. \quad (1. 12b)$$

Систему (1. 12) следует дополнить граничными условиями, соответствующими равенству нулю потоков в пространстве энергий при  $E=0$  и  $E=\infty$ :

$$\left[ f_i(E) + kT \frac{df_i(E)}{dE} \right]_{E=0, \infty} = 0. \quad (1. 13)$$

Как отмечалось в п. 1.1, захват носителей дефектом с энергией колебаний  $E < \varepsilon_2$  возможен лишь за счет туннелирования ядра. Вероятность такого перехода резко (экспоненциально) возрастает с ростом  $E$ . В то же время функции  $f_{1,2}^{(0)}(E)$  экспоненциально убывают с ростом  $E$ . В результате произведение  $c(E)f^{(0)}(E)$  имеет резкий максимум при энергии  $E=E_0(T)$  — оптимальной энергии термостимулированных переходов [7, 8]. В актуальной области температур ширина этого пика  $\delta E \ll \varepsilon_T$ , поэтому произведение  $c(E)f^{(0)}(E)$  можно приближенно заменить на  $\delta$ -функцию:

$$c_n(E) f_2^{(0)}(E) \rho_2(E) \simeq (1 - f^{(0)}) \langle c_n \rangle \delta(E - E_{0C}(T)), \\ c_p(E) f_1^{(0)}(E) \rho_1(E) \simeq f^{(0)} \langle c_p \rangle \delta(E - E_{0V}(T)), \quad (1. 14)$$

где  $E_{0C}$ ,  $E_{0V}$  — оптимальные энергии перехода многофононных переходов при захвате электронов и дырок, а  $\langle c_{n, p} \rangle$  — средние равновесные значения коэффициентов захвата электронов и дырок:

$$\langle c_n \rangle = \frac{1}{1 - f^{(0)}} \int_0^{\infty} dE f_2^{(0)}(E) \rho_2(E) c_n(E), \\ \langle c_p \rangle = \frac{1}{f^{(0)}} \int_0^{\infty} dE f_1^{(0)}(E) \rho_1(E) c_p(E). \quad (1. 15)$$

Система уравнений (1. 12) распадается на два независимых уравнения для определения функций  $f_{1,2}^{(1)}(E)$ . Найдем сначала вид функции распределения

<sup>1</sup> Предполагается, что неравновесная стационарная концентрация носителей в зоне поддерживается внешним источником. При этом ее величина может контролироваться и другим каналом рекомбинации помимо многофононного, например излучательным.

для дефекта, занятого электроном  $f_1^{(1)}(E)$ . Для решения уравнения (1.12а) с учетом (1.14) удобно разбить энергетическую ось на три интервала: 1)  $E < E_{ov}$ ; 2)  $E_{ov} \leq E < \varepsilon_{TC} + E_{oc}$ ; 3)  $E > \varepsilon_{TC} + E_{oc}$ . В первом интервале с учетом граничного условия (1.13) имеем

$$f_1^{(1)}(E) = A'_1 \exp \left\{ -\frac{E}{kT} \right\}; \quad E \leq E_{ov}. \quad (1.16)$$

В области 2 с учетом непрерывности функции распределения получаем

$$f_1^{(1)}(E) = A'_1 \exp \left\{ -\frac{E}{kT} \right\} + \frac{\nu_R}{kT} \int_{E_{ov}}^E \frac{\exp \{ (E' - E)/kT \}}{B_1(E')} dE'; \quad (1.17)$$

$$E_{ov} \leq E < E_{oc} + \varepsilon_{TC},$$

где  $\nu_R$  — темп многофононной рекомбинации через дефект:

$$\nu_R = \frac{n \langle c_n \rangle p \langle c_p \rangle}{n \langle c_n \rangle + p \langle c_p \rangle}. \quad (1.18)$$

При выводе (1.17) было использовано соотношение

$$n \langle c_n \rangle (1 - f^{(0)}) = p \langle c_p \rangle f^{(0)}, \quad (1.19)$$

которое получается, если любое из уравнений (1.13) проинтегрировать по энергии  $E$  в пределах от 0 до  $\infty$ . Это соотношение имеет очевидный смысл равенства средних темпов захвата электронов и дырок на дефект в стационарных условиях.

Наконец, в области 3 имеем

$$f_1^{(1)}(E) = A''_1 \exp \left\{ -\frac{E}{kT} \right\}; \quad E \geq E_{oc} + \varepsilon_{TC}, \quad (1.20)$$

где константа  $A''_1$  определяется из условия непрерывности при сшивке с решением (1.17):

$$A''_1 = A'_1 + \frac{\nu_R}{kT} \int_{E_{ov}}^{E_{TC} + E_{oc}} dE' \frac{\exp \{ E'/kT \}}{B_1(E')}. \quad (1.21)$$

Основной вклад в интеграл вносит область вблизи верхнего предела, так что  $B_1(E')$  можно вынести из-под интеграла при  $E' = \varepsilon_{TC} + E_{oc}$ . Тогда получим

$$A''_1 = A'_1 + \frac{\nu_R}{B_1(\varepsilon_{TC} + E_{oc})} \exp \left\{ \frac{\varepsilon_{TC} + E_{oc}(T)}{kT} \right\}. \quad (1.22)$$

Аналогичные выражения для неравновесной функции  $f_2^{(1)}(E)$  можно получить, разбив энергетическую ось на интервалы  $E < E_{oc}$ ;  $E_{oc} \leq E < \varepsilon_{TV} + E_{ov}$ ;  $E \geq \varepsilon_{TV} + E_{ov}$ . Явный вид функции  $f_2^{(1)}(E)$  в этих областях можно найти, заменив в (1.16)—(1.21)  $E_{ov}$  на  $E_{oc}$ ,  $\varepsilon_{TC} + E_{oc}$  на  $\varepsilon_{TV} + E_{ov}$ ,  $B_1(E)$  на  $B_2(E)$  и  $A'_1$  на  $A'_2$ . Напомним, что коэффициенты динамического трения  $B_{1,2}(E)$  определяются соотношением

$$B_i(E) = \frac{E \rho_i(E)}{\tau_{i,E}},$$

где  $\tau_{i,E}$  — времена энергетической релаксации колебаний дефекта в состояниях 1, 2. Таким образом, найденные выражения представляют собой первую поправку по параметру  $\nu_R \tau_E$  к равновесным функциям распределения дефектов по энергиям колебаний. В первом приближении по этому параметру равновесные функции распределения получают добавку в виде слабо (неэкспоненциально) зависящего от энергии плато, простирающуюся вплоть до энергии  $E_{oc} + \varepsilon_{TC}$  для



функций  $f_1^{(1)}(E)$  и до энергий  $\varepsilon_{TV} + E_{0V}$  для функций  $f_2^{(1)}(E)$ . Схематические графики функций распределения в первом приближении приведены на рис. 3.

В приближении  $\nu_R \tau_E \ll 1$  при вычислении нормировочных констант  $A'_1, A'_2$  можно пренебречь неравновесными хвостами функций распределения, что дает  $A'_1 = A_1, A'_2 = A_2$ , где  $A_1, A_2$  — нормировочные константы в (1. 12). Рассмотренное приближение соответствует предположению о том, что разогрев локальных колебаний не меняет темп рекомбинации. Проведенное рассмотрение, строго говоря, относится к случаю, когда имеется лишь одна мода локальных колебаний. Можно, однако, показать (см. Приложение 2), что все формулы этого параграфа остаются справедливыми и в многофоновом случае. При этом энергия  $E$  имеет смысл суммарной энергии всех мод локальных колебаний.

1.3. *Электронный механизм энергетической релаксации локальных колебаний сильно возбужденных дефектов.* Сильно возбужденные колебательные состояния дефектов могут образовываться как непосредственно под влиянием внешних факторов (например, при интенсивном радиационном или световом воздействии), так и в ходе междефектных реакций, а также за счет взаимодействия дефекта с электронной подсистемой. К числу процессов последнего типа относится и многофононный захват носителей на глубокие уровни дефектов (см. п. п. 1.1, 1.2).

Обычно считают, что энергетическая релаксация таких сильно возбужденных дефектов обусловлена развалом локальных фононов на решеточные. При этом энергия локального возбуждения переходит в энергию тепловых фононов. В работах [12, 15] было показано, что при большой энергии локальных возбуждений возможен альтернативный электронный механизм энергетической релаксации, который при большой концентрации свободных носителей может успешно конкурировать с обычным «решеточным» механизмом. Электронный механизм релаксации состоит в последовательном многократно повторяющемся процессе, заключающемся в испускании сильно возбужденным дефектом «горячего» носителя (с кинетической энергией, значительно превышающей среднюю энергию свободных носителей  $kT_n$ ), и захвате холодного, термализованного, носителя со средней энергией  $kT_c$ .

Рассмотрим изменение со временем заселенностей колебательных состояний дефекта, вызванное процессами захвата и эмиссии электронов. При этом удобно ввести вместо функций распределения  $f_i(E)$  функцию  $N_i(E) = N_D f_i(E) \rho_i(E)$ , где  $N_D$  — концентрация дефектов, характеризующая число дефектов в единице объема в  $i$ -м зарядовом состоянии с энергией колебаний  $E$ . Пренебрегая процессами энергетической релаксации локальных колебаний за счет взаимодействия с решеткой, а также захватом и эмиссией дырок, приходим к уравнениям баланса для функций  $N_i(E, t)$  [ср. с (1. 2)]:

$$\frac{\partial N_1(E, t)}{\partial t} = nc_n(E - \varepsilon_{TC}) N_2(E - \varepsilon_{TC}) - e_n(E) N_1(E), \quad (1. 23a)$$

$$\frac{\partial N_2(E - \varepsilon_{TC}, t)}{\partial t} = \int_0^\infty W_n(E + \varepsilon; \varepsilon) N_1(E + \varepsilon) d\varepsilon - nc_n(E - \varepsilon_{TC}) N_2(E - \varepsilon_{TC}). \quad (1. 23б)$$

Для удобства дальнейших вычислений аргумент  $E$  в (1. 23б) сдвинут на величину  $\varepsilon_{TC}$  [в отличие от (1. 26)].

Можно показать (см. Приложение 1), что характерная энергия вылетающего при многофононной ионизации носителя  $\varepsilon_m'(E)$  в условиях сильного возбуждения локальных колебаний значительно меньше энергии колебаний  $E$ :  $\varepsilon_m(E) \ll E$ . Поэтому интегральный член в уравнении (1. 23б) можно с учетом (1. 6) приближенно представить в виде

$$\int_0^\infty W_n(E + \varepsilon; \varepsilon) N_1(E + \varepsilon) d\varepsilon \approx e_n(E) N_1(E) + \frac{d}{dE} N_1(E) \int_0^\infty \varepsilon W_n(E; \varepsilon) d\varepsilon. \quad (1. 24)$$

Если в разложении (1. 24) ограничиться первым членом, то из системы (1. 23) следует, что суммарная заселенность колебательных состояний

$$P(E) = N_1(E) + N_2(E - \varepsilon_{TC}) \quad (1.25)$$

не изменяется со временем ( $\partial P/\partial t = 0$ ), а между заселенностями  $N_1(E)$  и  $N_2(E - \varepsilon_{TC})$  за время  $\tau'_n \sim [nc_n(E - \varepsilon_{TC}) + e_n(E)]^{-1}$  устанавливается соотношение динамического равновесия

$$N_1(E) e_n(E) = N_2(E - \varepsilon_{TC}) nc_n(E - \varepsilon_{TC}). \quad (1.26)$$

Характерная энергия вылетающего носителя  $\varepsilon_m(E)$  зависит от энергии колебаний  $E$ . В случае сильно возбужденных колебательных состояний при энергии колебаний, лежащей в области классически разрешенных переходов  $E > \varepsilon_{TC} + \varepsilon_{2C}$ , имеет место неравенство  $kT_e \ll \varepsilon_m(E) \ll E$ , т. е. при ионизации центра кинетическая энергия вылетающего носителя достаточно велика. Сохранение второго члена в разложении (1.24) позволяет корректно учесть это обстоятельство. Складывая уравнения (1.23а) и (1.23б) с учетом соотношений (1.24)–(1.26), получим для суммарной заселенности  $P(E)$  уравнение, имеющее вид закона сохранения потока в пространстве энергий:

$$\frac{\partial P(E)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E} \frac{E}{\tau_e(E)} P(E), \quad (1.27)$$

где электронное время энергетической релаксации определяется соотношением

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_e(E)} &= \frac{nc_n(E - \varepsilon_{TC})}{nc_n(E - \varepsilon_{TC}) + e_n(E)} \frac{1}{E} \int_0^{\infty} \varepsilon W_n(E; \varepsilon) d\varepsilon \simeq \\ &\simeq \frac{nc_n(E - \varepsilon_{TC})}{e_n(E)} \int_0^{\infty} \varepsilon W_n(E; \varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (1.28)$$

В случае невырожденного полупроводника,<sup>2</sup> когда  $nc_n(E - \varepsilon_{TC}) \ll e_n(E)$ , выражение для электронного времени  $\tau_e(E)$  упрощается:

$$\frac{1}{\tau_e(E)} = \frac{\varepsilon_m(E)}{E} nc_n(E - \varepsilon_{TC}), \quad (1.29)$$

где средняя энергия выбрасываемых носителей  $\varepsilon_m(E)$  определяется из соотношения  $\varepsilon_m \equiv \int_0^{\infty} \varepsilon W_n(E; \varepsilon) d\varepsilon / e_n(E)$ . Из (1.29) видно, что время  $\tau_e(E)$  зависит от концентрации носителей  $n$ , поэтому электронный механизм энергетической релаксации может доминировать над решеточным при большой концентрации носителей, когда скорость захвата носителей на дефект  $nc_n(E)$  превышает скорость решеточной энергетической релаксации  $\tau_E^{-1}$ . Положив время решеточной релаксации равным  $\tau_E \sim 10^{-11}$  с [58], а отношение  $\varepsilon_m(E)/E \sim 10^{-1}$ , приходим к оценке

$$nc_n(E) > 10^{12} \text{ с}^{-1}.$$

В Приложении 1 показано, что при больших энергиях колебаний в области классически разрешенных переходов ( $E > \varepsilon_2$ ) коэффициент захвата  $s(E)$  может достигать значения  $s \sim 10^{-6} \text{ см}^3/\text{с}$ . В этом случае электронный механизм релаксации может стать доминирующим уже при концентрациях носителей  $n \geq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

**1.4. Сильный разогрев локальных колебаний.** Рассмотрим теперь, как процессы захвата и эмиссии свободных носителей влияют на высокоэнергетические хвосты распределения дефектов в условиях большой концентрации носителей. Представляет интерес случай, когда скорость поступления энергии в систему локальных колебаний за счет захвата носителей значительно превышает ско-

<sup>2</sup> Соотношение (1.29) справедливо и для случая вырожденного полупроводника, если характерная энергия выбрасываемых носителей  $\varepsilon_m$  превышает квазиэнергии Ферми носителей в зонах.

росте релаксации локализованного возбуждения за счет развала локальных фононов на решеточные. При этом возможны две ситуации.

1) Концентрация носителей одного знака значительно превышает концентрацию носителей другого знака (например, в сильно легированном полупроводнике, для определенности  $p$ -типа), так что выполняются неравенства

$$pc_p \gg \tau_E^{-1} \gg nc_n, \quad (1.30)$$

где  $\tau_E$  — время энергетической релаксации локальных колебаний за счет взаимодействия с решеткой.<sup>3</sup>

2) Ситуация большой концентрации обоих типов неравновесных носителей:

$$nc_n, pc_p \gg \tau_E^{-1}. \quad (1.31)$$

**1.4.1. Сильно легированный полупроводник.** Рассмотрим сильно легированный полупроводник  $p$ -типа, содержащий дефекты с глубокими донорными уровнями. В равновесии все донорные центры опустошены:  $f_1^{(0)}(E) = 0$ . Будем предполагать, что равновесная концентрация значительно превышает избыточные концентрации электронов и дырок:  $p \approx p_0 = \text{const}$ ;  $p \gg n$ . В ситуации больших концентраций дырок, когда выполняется неравенство (1.30), возможен захват дырки на дефект, находящийся в сильно возбужденном колебательном состоянии после захвата электрона. При этом в систему локальных колебаний вносится энергия порядка ширины запрещенной зоны полупроводника  $\varepsilon_g$  (рис. 4). Впервые процесс такого типа был рассмотрен Суми [16, 17], который назвал его «резонансной рекомбинацией».

Типичное время энергетической релаксации  $\tau_E$ , определяемое взаимодействием локальных колебаний с решеточными, порядка  $10^{-11}$  с. Поэтому даже при очень высоком уровне легирования, когда  $p \sim 10^{18} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , неравенства (1.30) будут выполняться, если коэффициент захвата дырок  $c_p \geq 10^{-7} \text{ см}^3/\text{с}$ . Соответственно сечение захвата  $\sigma_p(E)$  [ $\sigma_p(E) = c_p(E) \langle v \rangle$ , где  $\langle v \rangle$  — средняя тепловая скорость дырок] должно быть не меньше  $10^{-14} \text{ см}^2$ . Столь большие сечения многофононного захвата имеют место в области классически разрешенных переходов ядра, т. е. выше точки встречи адиабатических термов ( $E > \varepsilon_{2V}$ ) (рис. 4). Исследуем хвосты энергетического распределения дефектов в состоянии 1 при  $\varepsilon_{2V} < E < \varepsilon_{TC} + \varepsilon_{2C}$  и в состоянии 2 при  $\varepsilon_{2V} + \varepsilon_{TV} < E < \varepsilon_g + \varepsilon_{2C}$ . В области энергий  $E < \varepsilon_{2C}$  в состоянии 2 решеточная энергетическая релаксация является наиболее быстрым процессом, поскольку скорости эмиссии и захвата в этой области экспоненциально малы. Поэтому энергетическое распределение в этой области практически не отличается от равновесного, и член, в уравнениях (1.9) описывающий приход дефектов в состояние 1 за счет захвата электрона, можно приближенно представить в виде

$$nc_n(E - \varepsilon_{TC}) f_2(E - \varepsilon_{TC}) \rho_2(E - \varepsilon_{TC}) \approx nc_n(E - \varepsilon_{TC}) \times \\ \times f_2^{(0)}(E - \varepsilon_{TC}) \rho_2(E - \varepsilon_{TC}) \approx n \langle c_n \rangle \delta(E - \varepsilon_{TC} - E_{0C}). \quad (1.32)$$

Последнее приближенное равенство можно получить, используя те же рассуждения, что и в п. 1.2. С другой стороны, в силу неравенства (1.30) в области энергий  $\varepsilon_{2V} < E < \varepsilon_{TC} + \varepsilon_{1C}$  для дефектов в состоянии 1 можно пренебречь влиянием на энергетическое распределение решеточной энергетической релаксации, а также процессами захвата и эмиссии электронов. В результате система уравнений (1.9) для этой области энергии примет вид

$$nN_D \langle c_n \rangle \delta(E - \varepsilon_{TC} - E_{0C}) - pc_p(E) N_1(E) + \\ + \int_0^{\infty} d\varepsilon W_p(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon; \varepsilon) N_2(E + \varepsilon_{TV} + \varepsilon; \varepsilon) = 0, \quad (1.33a)$$

$$pc_p(E) N_1(E) - e_p(E + \varepsilon_{TV}) N_2(E + \varepsilon_{TV}) = 0, \quad (1.33b)$$

<sup>3</sup> Здесь и далее мы для простоты будем считать время  $\tau_E$  одинаковым для обоих зарядовых состояний дефекта.

где  $N_i(E) \equiv N_{df_i}(E) \rho_i(E)$  — концентрация дефектов в  $i$ -м зарядовом состоянии с энергией колебаний  $E$ ;  $N_D$  — полная концентрация дефектов. Складывая (1.33а) и (1.33б), приходим к уравнению

$$nN_D \langle c_n \rangle \delta(E - \varepsilon_{TC} - E_{OC}) + \frac{d}{dE} \frac{E + \varepsilon_{TV}}{\tau_p(E + \varepsilon_{TV})} \frac{e_p(E + \varepsilon_{TV})}{pc_p(E)} N_2(E + \varepsilon_{TV}) = 0, \quad (1.34)$$

где по аналогии с (1.28) введено «дырочное» время энергетической релаксации локальных колебаний  $\tau_p$ :

$$\frac{1}{\tau_p(E)} = \frac{pc_p(E - \varepsilon_{TV})}{e_p E} \frac{1}{E} \int_0^\infty \varepsilon W_p(E; \varepsilon) d\varepsilon. \quad (1.35)$$

Используя (1.33б) и (1.34), для функций  $N_i(E)$  имеем

$$N_1(E) = nN_D \langle c_n \rangle \frac{\tau_p(E + \varepsilon_{TV})}{E + \varepsilon_{TV}}; \quad \varepsilon_{2V} < E < \varepsilon_{TC} + E_{OC},$$

$$N_2(E) = nN_D \langle c_n \rangle \frac{pc_p(E - \varepsilon_{TV})}{e_p(E)} \frac{\tau_p(E)}{E}; \quad \varepsilon_{2V} + \varepsilon_{TV} < E < \varepsilon_g + E_{OC}. \quad (1.36)$$

Таким образом, сильно возбужденное колебательное состояние с энергией  $E \approx \varepsilon_g$ , образовавшееся вследствие резонансной рекомбинации электрона и дырки, оказы-

вается неустойчивым по отношению к эмиссии дырки. При этом заселенность высоковозбужденных колебательных состояний определяется дырочным временем энергетической релаксации, характеризующим скорости потерь

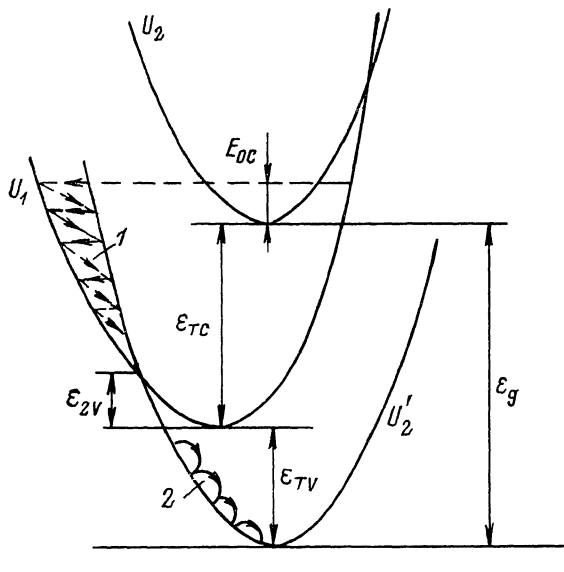


Рис. 4. Переходы при многофононной рекомбинации через сильновозбужденные колебательные состояния дефекта в сильно легированном полупроводнике  $p$ -типа. Адиабатический терм  $U_1$  отвечает дефекту со связанным электроном, термы  $U_2, U'_2$  соответствуют «пустому» дефекту при наличии и в отсутствие свободной электрон-дырочной пары; 1 — «электронный» механизм релаксации локальных колебаний, 2 — «решеточный» (ангармонический) механизм.

энергии за счет захвата холодных и эмиссии горячих дырок. Интересно отметить, что в силу (1.35) заселенность колебательных уровней дефектов в состоянии 2 не зависит от концентрации дырок. Схематические графики функций  $N_1(E)$  и  $N_2(E)$  приведены на рис. 5.

1.4.2. Полупроводник с большой концентрацией неравновесных электронов и дырок. Выше мы рассматривали случай, когда поступление энергии в систему локальных колебаний происходит за счет процессов многофононного захвата носителей, а энергетическая релаксация локальных колебаний происходит за счет передачи их энергии решетке. Эта передача может происходить как непосредственно за счет развала локальных колебаний на решеточные, так и косвенным путем, за счет разогрева сильно возбужденным дефектом электронов и дырок (см. п. 1.3). При большой концентрации электронов и дырок в условиях сильного возбуждения локальных колебаний, когда выполняется неравенство (1.31), возможны рождение и рекомбинация на дефекте электрон-дырочных пар за время, много меньшее времени энергетической релаксации локальных колебаний. В этом случае хвост энергетического распределения локальных колеба-

ний будет определять рекомбинацией и генерацией на дефекте электрон-дырочных пар [18].

К системе уравнений для хвостов энергетического распределения можно прийти, отбросив в системе (1.9) дифференциальные члены и пренебрегая кинетической энергией выбрасываемых носителей по уравнению с энергией колебаний. В результате получим

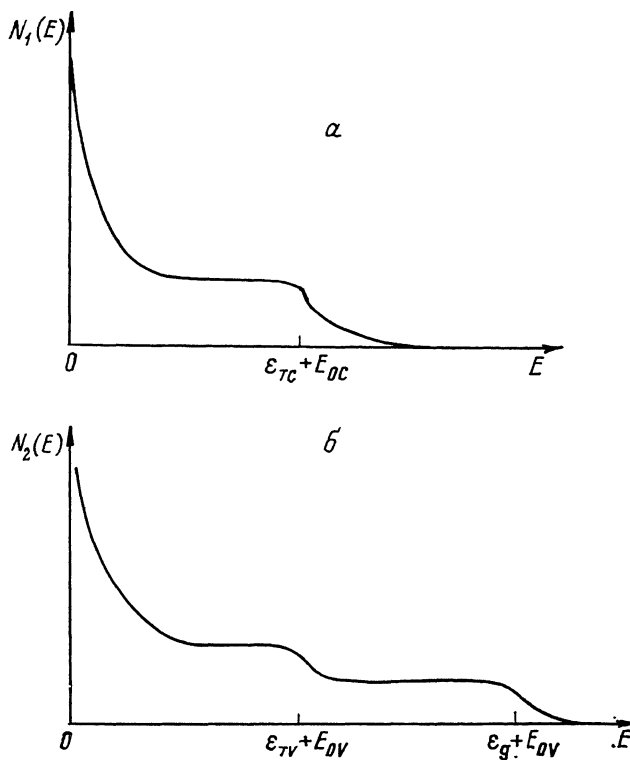


Рис. 5. Схематические графики распределения дефектов по энергиям колебаний в условиях многофононной рекомбинации через глубокий уровень в сильно легированном полупроводнике р-типа.

а — для дефекта со связанным электроном, б — для пустого дефекта.

$$nc_n(E - \epsilon_{TC}) N_2(E - \epsilon_{TC}) - [pc_p(E) + e_n(E)] \times \\ \times N_1(E) + e_p(E + \epsilon_{TV}) N_2(E + \epsilon_{TV}) = 0, \quad (1.37a)$$

$$pc_p(E - \epsilon_{TV}) N_1(E - \epsilon_{TV}) - [nc_n(E) + e_p(E)] \times \\ \times N_2(E) + e_n(E + \epsilon_{TC}) N_1(E + \epsilon_{TC}) = 0. \quad (1.37б)$$

Здесь, как и в п. 1.3,  $N_i(E) \equiv N_{df_i}(E) \rho_i(E)$  — число дефектов в  $i$ -м зарядовом состоянии с энергией колебаний  $E$ ,  $N_D$  — концентрация дефектов. В Приложении I показано, что при большой энергии колебаний  $E \geq \epsilon_g$  коэффициенты захвата и эмиссии носителей слабо зависят от  $E$ . В дальнейшем для простоты будем считать эти коэффициенты не зависящими от  $E$ . В этом приближении непрерывные решения системы (1.37), убывающие при  $E \rightarrow \infty$ , имеют вид

$$N_1(E) = A \left( \frac{nc_n pc_p}{e_n e_p} \right)^{E/\epsilon_g}; \quad N_2(E) = \frac{pc_p}{e_p} N_1(E - \epsilon_{TV}), \quad (1.38)$$

где  $A$  — коэффициент, не зависящий от энергии локальных колебаний. Найденные выражения для хвостов энергетического распределения удобно переписать в виде

$$N_{1,2}(E) \sim \exp\left\{-\frac{E}{kT^*}\right\}. \quad (1.39)$$

Введенная эффективная «температура»  $T^*$  равна

$$T^* = \frac{\varepsilon_g}{k \ln \frac{N_C^* N_V^*}{np}} \quad (1.40)$$

и характеризует масштаб убывания неравновесного распределения в области больших энергий; эффективные плотности состояний  $N_C^*$ ,  $N_V^*$  определяются из соотношений  $N_C^* \equiv e_n/c_n$ ;  $N_V^* \equiv e_p/c_p$  и по порядку величины равны

$$N_{C,V}^* \sim \left(\frac{m_{C,V} \varepsilon_m^{C,V}}{\hbar^2}\right)^{3/2}, \quad (1.41)$$

где  $\varepsilon_m^{C,V}$  — средние кинетические энергии выбрасываемых сильно возбужденным дефектом электронов и дырок. Эти энергии можно оценить из соотношения <sup>4</sup>

$$\varepsilon_m \sim [\beta (\hbar\omega)^2 \varepsilon_g]^{1/2}, \quad (1.42)$$

где  $\omega$  — частота локального колебания,  $\beta$  — безразмерная константа связи электрон-фононного взаимодействия:  $\beta = \varepsilon_{FC}/(\varepsilon_{FC} + \varepsilon_T)$ , где  $\varepsilon_{FC}$  — энергия Франка—Кондона [19].

Таким образом, процессы рождения и гибели на сильно возбужденном дефекте электрон-дырочных пар приводят к своеобразной энергетической диффузии дефектов с шагом  $\varepsilon_g$ . При этом устанавливается энергетическое распределение, характеризующееся эффективной температурой  $T^*$ , которая зависит от концентрации электронов и дырок. Обсудим границы применимости решения (1.39). Ясно, что кинетической энергией электронов и дырок можно пренебречь в том случае, когда функция распределения медленно меняется на масштабе  $\varepsilon_m$ . Это означает, что энергия  $\varepsilon_m$  должна быть много меньше  $kT^*$ , что с учетом (1.40) ведет к ограничениям на концентрации электронов и дырок:

$$\exp\left\{-\frac{\varepsilon_g}{\varepsilon_m}\right\} \ll \frac{np}{N_C^* N_V^*} \ll 1. \quad (1.43)$$

Правое неравенство означает, что при описании захвата носителей можно пренебречь заполнением зонных состояний.

В заключение отметим, что учет реальной (корневой) зависимости коэффициента захвата от энергии колебаний приводит к тому, что коэффициент  $A$  в (1.38) становится функцией энергии, изменяющейся на масштабе  $\varepsilon_g$ .

## 2. Рекомбинационно-стимулированные дефектные реакции

Данный раздел посвящен приложению рассмотренной выше теории разогрева локальных колебаний дефектов к описанию рекомбинационно-стимулированных реакций с учетом дефектов. Основные характеристики дефектных реакций обсудим на примере так называемых реакций первого порядка [20], в которых изменение числа дефектов происходит за счет их захвата на ловушки или за счет ухода дефектов из области наблюдения. При этом предполагается, что число ловушек для дефектов гораздо больше числа самих дефектов, так что заполнением ловушек можно пренебречь. Тогда скорость убывания числа дефектов пропорциональна их концентрации  $N_D$ :

$$\frac{dN_D}{dt} = -\mu N_D, \quad (2.1)$$

где коэффициент  $\mu$ , называемый скоростью отжига дефектов, может быть определен экспериментально.

<sup>4</sup> Вывод соотношения (1.42) приведен в *Приложении 1*.

В случае реакций первого порядка скорость отжига  $\mu$  связана с коэффициентом диффузии дефектов  $D$  простым соотношением [20]

$$\mu = \chi D, \quad (2.2)$$

где коэффициент пропорциональности  $\chi$  зависит от геометрии ловушек дефектов. Коэффициент диффузии  $D$  в свою очередь пропорционален частоте перескоков дефекта  $\nu$ . Для кристаллов со структурой алмаза и цинковой обманки имеет место соотношение [21]

$$D = \frac{1}{8} a^2 \nu \alpha, \quad (2.3)$$

где  $a$  — постоянная решетки, а  $\alpha$  — корреляционный множитель, учитывающий зависимость вероятности скачков от направления предшествующих перемещений дефекта.

2.1. *Механизмы рекомбинационно-стимулированной диффузии.* В тепловом равновесии диффузия осуществляется путем перескоков между соседними минимумами потенциальной энергии дефекта. Такой перескок требует преодоления энергетического барьера и вероятность перескока содержит активационную экспоненту:

$$\nu = \nu_0 \exp \left\{ -\frac{E_a}{kT} \right\}. \quad (2.4)$$

Энергия активации  $E_a$  обычно порядка 1 эВ (или нескольких десятков эВ), а предэкспоненциальный множитель  $\nu_0$  порядка фононных частот ( $\nu_0 \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$ ).

В ряде экспериментов наблюдалось уменьшение энергии активации (и даже ее исчезновение) при инжекции неравновесных носителей. Поскольку в этом случае возрастала скорость диффузии дефектов, являющихся эффективными центрами рекомбинации, это явление получило название рекомбинационно-стимулированной диффузии.

С рекомбинационно-стимулированными дефектными реакциями в арсениде галлия впервые столкнулся Барнс [22], наблюдавший частичное восстановление излучательных характеристик лазерного диода, подвергнутого  $\gamma$ -облучению, в результате пропускания тока через  $p$ - $n$ -переход. Позднее аналогичные эффекты наблюдались в GaP, InP и твердых растворах на их основе [3, 23], а также в кремнии [24, 25].

К настоящему времени для объяснения явления рекомбинационно-стимулированной диффузии предложено несколько механизмов. Вайсер и Барраф с сотр. [26, 27] рассмотрели случай, когда энергия активации диффузии зависит от зарядового состояния дефекта. Например, в исходном состоянии дефект был нейтральным и имел энергию активации  $E_a^{(0)}$ . Захватив электрон, дефект становится заряженным отрицательно. При этом его энергия активации  $E_a^{(-)}$  может оказаться меньше, чем для нейтрального центра ( $E_a^{(-)} < E_a^{(0)}$ ). В ходе рекомбинации происходит перезарядка центров, и, поскольку заряженные центры более подвижны, чем нейтральные, рекомбинация в данном случае приводит к ускорению диффузии. Такой механизм был установлен для ряда радиационных дефектов в кремнии [24, 28].

Минимумам потенциальной энергии заряженного и нейтрального дефектов могут соответствовать различные положения дефекта в кристалле. Более того, минимум потенциала для одного зарядового состояния может быть седловой точкой для другого. В этом случае в каждом акте рекомбинации будет происходить скачок дефекта и при наличии неравновесных носителей диффузия будет атермической (т. е. энергия активации при рекомбинации обращается в нуль). Существуют указания на то, что именно этот механизм приводит к ускорению диффузии  $F$ -центров в щелочно-галогидных кристаллах [29]. Для дефектов в полупроводниках этот механизм был предложен Бургуэном и Корбеттом [30]. Появление седловой точки связывалось авторами [30] с переходом атомных орбиталей дефекта в антисвязывающую конфигурацию. Кинетика движения дефектов в рамках этого механизма исследовалась Оксенгендлером [31].

Если у дефекта помимо основного состояния имеется метастабильное возбужденное электронное состояние, то естественно предполагать, что этому со-

стоянию соответствует антисвязывающая конфигурация орбиталей дефекта. Такое предположение лежит в основе механизмов ускорения диффузии, предложенных Шейнкманом [32] и Елисеевым с соавт. [33]. В рамках этих моделей энергия активации диффузии равна разности энергий основного  $\epsilon_0$  и возбужденного  $\epsilon_*$  состояний:  $E_a = \epsilon_* - \epsilon_0$ . В ходе рекомбинации центр опустошается путем захвата дырки и электрон из зоны проводимости получает возможность захватиться сразу в возбужденное состояние. Если уровень Ферми  $\epsilon_F$  лежит выше метастабильного уровня, то диффузия приобретает атермический характер. Если же уровень Ферми лежит ниже метастабильного уровня, то энергия активации диффузии может уменьшиться на величину  $\epsilon_0 - \epsilon_F$ . Особенностью этого механизма является резкая зависимость скорости дефектных реакций от зарядового состояния дефекта, т. е. от того, имеется ли на дефекте электрон, способный возбудиться в метастабильное состояние. Вторая группа механизмов рекомбинационно-стимулированной диффузии связана с ускорением диффузии за счет энергии, выделяющейся при безызлучательном захвате носителей.

Зейц [5] и Ленченко [34] рассмотрели модель «тепловой вспышки», согласно которой энергия, выделяющаяся в ходе многофононной рекомбинации, приводит к локальному изменению температуры кристалла вблизи дефекта, увеличивая тем самым, согласно (2. 1), частоту его скачков.

Павлович [35] рассмотрел ситуацию, когда энергия, выделяющаяся при рекомбинации, сразу передается всему континууму колебательных мод кристалла. Такой механизм, в принципе, может иметь место, однако маловероятно, чтобы он играл определенную роль в дефектных реакциях, поскольку константа связи электрон-фононного взаимодействия в случае взаимодействия с локальными колебаниями обычно значительно больше, чем при взаимодействии с решеточными колебаниями. Поэтому представляется более реалистичной модель, предложенная Виксом, Талли и Кимерлингом [6], согласно которой энергия, выделяющаяся при рекомбинации, быстро перераспределяется между всеми модами локальных колебаний, а затем сравнительно медленно уходит в решетку. Далее мы будем использовать этот подход для описания ускорения дефектных реакций в условиях безызлучательной рекомбинации.

2.2. Ускорение дефектных реакций при разогреве локальных колебаний. Следуя [6], предположим, что в стационарных условиях безызлучательная рекомбинация приводит к установлению неравновесного энергетического распределения по суммарной энергии всех колебательных мод  $E$ . Это распределение в зависимости от зарядового состояния дефекта характеризуется двумя функциями:  $f_1(E)$ ,  $f_2(E)$ . Вероятность скачка дефекта можно при этом записать в виде

$$\nu = \nu_0 \int_{E_a}^{\infty} dE \{f_1(E) \rho_{s,1}(E) K_{s,1}(E; E_a) + f_2(E) \rho_{s,2}(E) K_{s,2}(E; E_a)\}, \quad (2. 4a)$$

где  $\rho_{s,i}(E)$  — плотности колебательных состояний в системе  $s$  мод дефекта в  $i$ -м зарядовом состоянии (напомним, что  $i=1$  соответствует дефекту со связанным электроном,  $i=2$  — дефекту без электрона);  $K_{s,i}(E; E_a)$  — вероятность того, что в моде, инициирующей диффузию дефекта в  $i$ -м зарядовом состоянии, соберется энергия, большая, чем энергия активации<sup>5</sup>  $E_a$ , при условии, что полная энергия колебаний равна  $E$ . Величины  $\rho_{s,i}$  и  $K_{s,i}$  определяются формулами (П. 2. 2), (П. 2. 3). Используя эти соотношения, выражение (2. 4a) приведем к виду

$$\nu = \nu_0 \int_{E_a}^{\infty} dE \{f_1(E) \rho_{s,1}(E - E_a) + f_2(E) \rho_{s,2}(E - E_a)\}. \quad (2. 5)$$

В равновесных условиях функции распределения  $f_{1,2}(E)$  определяются выражениями (1. 12). Подставив эти выражения в (2. 5), приходим [с учетом условия нормировки (1. 1)] к формуле Крамерса (2. 4).

<sup>5</sup> Здесь и далее мы предполагаем, что энергия активации не зависит от зарядового состояния.



Отношение увеличении скорости дефектных реакций за счет рекомбинационно-стимулированного разогрева локальных колебаний, согласно (2. 1), (2. 4а), (2. 5), дается соотношением

$$\eta = \frac{\mu^*}{\mu} \frac{\nu^*}{\nu} = \exp \left\{ \frac{E_a}{kT} \right\} \int_{E_a}^{\infty} \{f_1(E) \rho_{s,1}(E - E_a) + f_2(E) \rho_{s,2}(E - E_a)\} dE, \quad (2. 6)$$

где  $\mu^*$  и  $\mu$ ,  $\nu^*$  и  $\nu$  — соответственно скорости отжига и частоты скачков дефекта при наличии и в отсутствие неравновесных носителей. В дальнейшем будем называть величину  $\eta$  коэффициентом усиления отжига.

Коэффициент  $\eta$  определяется той из неравновесных функций  $f_1(E)$ ,  $f_2(E)$ , которая имеет более длинный неравновесный хвост. В случае слабого разогрева локальных колебаний, рассмотренного в п. 1.2, различие между функциями распределения  $f_1$  и  $f_2$  обусловлено различием энергий, выделяющихся при захвате электронов и дырок. Пусть, например, уровень приближен к валентной зоне  $\varepsilon_{TV} < \varepsilon_{TC}$ . В этом случае основной вклад в коэффициент будет давать функция  $f_1(E)$ , неравновесность которой связана с выделением энергии при захвате электронов. Хвост функции распределения  $f_1(E)$  в этом случае имеет вид плато, простирающегося вплоть до энергии  $\varepsilon_{TC} + E_{oc}$ , и экспоненциально спадает при  $E > \varepsilon_{TC} + E_{oc}$ . Если энергия активации попадает в область плато (т. е.  $E_a < \varepsilon_{TC} + E_{oc}$ ), то отжиг становится атермическим и коэффициент усиления отжига равен

$$\eta = \exp \left\{ \frac{E_a}{kT} \right\} \nu_R \int_{E_a}^{\varepsilon_{TC} + E_{oc}} \tau_E \frac{(E - E_a)^{s-1}}{E^s} dE, \quad (2. 7)$$

где  $\nu_R$  — темп многофононной рекомбинации через дефект, определяемый соотношением (1. 18), а  $\tau_E$  — время энергетической релаксации, соответствующей энергии колебаний  $E$ . В случае  $E_a > \varepsilon_{TC} + E_{oc}$  вычисление по формуле (2. 6) с учетом (1. 20)—(1. 23) дает

$$\eta = (s - 1)! \nu_R \tau_E \left( \frac{kT}{\varepsilon_{TC} + E_{oc}} \right)^s \exp \left\{ \frac{\varepsilon_{TC} + E_{oc}}{kT} \right\}. \quad (2. 8)$$

Результат Вика—Талли—Кимерлинга [6] в наших обозначениях имеет вид

$$\eta_{WTK} = \nu_R \tau_E \left( \frac{E_a - \varepsilon_{TC}}{\varepsilon_{TC}} \right)^{s-1} \exp \left\{ \frac{\varepsilon_{TC}}{kT} \right\}. \quad (2. 9)$$

Отличие (2. 8) от (2. 9) связано с тем, что при выводе неравновесных функций распределения в п. 1 использовалась реальная энергетическая зависимость коэффициента захвата  $s(E)$ . Этот коэффициент в [6] предполагался не зависящим от энергии колебаний.

В случае сильно легированного полупроводника одна из функций распределения приобретает неравновесный хвост, простирающийся вплоть до энергии  $E \sim \varepsilon_g$ . Рассмотрим для определенности случай сильно легированного полупроводника  $p$ -типа. В этом случае основной вклад в коэффициент  $\eta$  вносит неравновесная функция  $f_2(E)$ , при этом в случае  $E_a < \varepsilon_g + E_{oc}$  дефектные реакции становятся атермическими. Используя соотношения (1. 36) и (2. 6), имеем

$$\eta = n \langle c_n \rangle \exp \left\{ \frac{E_a}{kT} \right\} \int_{E_a}^{\varepsilon_g + E} \frac{dE}{\varepsilon_p(E) \varepsilon_m(E)} \left( 1 - \frac{E_g}{E} \right)^{s-1}. \quad (2. 10)$$

При выводе (2. 10) мы использовали явное выражение для электронного времени энергетической релаксации  $\tau_p(E)$ , полностью аналогичное (1. 3. 9), заменив в нем  $\varepsilon_{TC}$  на  $\varepsilon_{TV}$ ;  $\varepsilon_m$  — средняя энергия дырок, вылетающих при ионизации сильно возбужденного дефекта. Видно, что коэффициент  $\eta$  не зависит от концентрации основных носителей (дырок). Этот факт оказывается весьма существ-

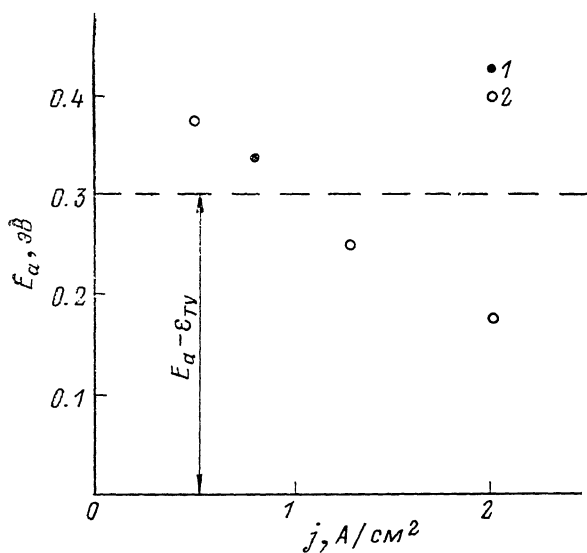


Рис. 6. Зависимость энергии активации отжига радиационного дефекта  $E_3$  в GaAs от плотности прямого тока через  $p-n$ -переход.

1 — результат Ланга и Кимерлинга<sup>[2]</sup>; 2 — результаты Бургуэна и Стивена [27]; штрихи — минимальное значение энергии активации по теории Вика—Талли Кимерлинга<sup>[6]</sup>.

Рис. 7. Распределение по скоростям распыленных атомов Na при бомбардировке кристаллов NaCl ионами Ne<sup>+</sup> с энергией 2 кэВ [44].

Сплошная линия — эксперимент, штрихи — аппроксимация зависимостью  $dS/dv \sim v^3 \exp\{-Mv^2/2kT^*\}$ ,  $T^* = 2000$  К, температура поверхности — 311–30 К, температура плавления NaCl — 1073 К, кипения — 1700 К [40].

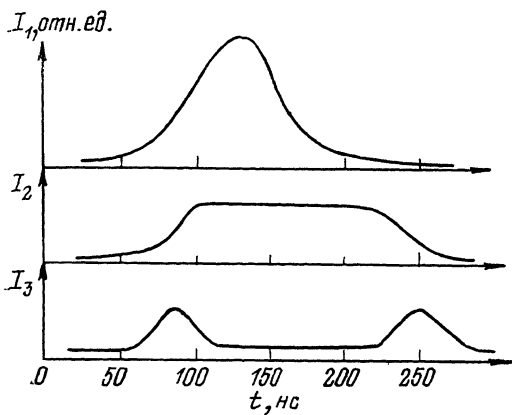
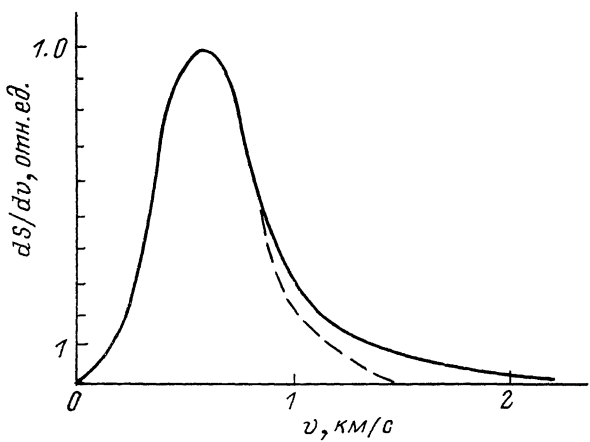


Рис. 8. Временные зависимости мощного лазерного импульса ( $I_1$ ), отраженного зондирующего света ( $I_2$ ) и рассеянного зондирующего света ( $I_3$ ) при лазерном отжиге поверхности кремния [43].

енным при интерпретации экспериментальных данных по рекомбинационно-стимулированному отжигу дефектов.

2.3. *Обсуждение экспериментов.* К настоящему времени рекомбинационно-стимулированные дефектные реакции уверенно наблюдались в большом числе материалов (см., например, [2, 3, 23, 25]). Однако специальных исследований, направленных на то, чтобы выяснить какой конкретный механизм рекомбинационно-стимулированных реакций имеет место, известно очень немного. Наиболее подробно в этом направлении исследован рекомбинационно-стимулированный отжиг радиационного дефекта  $E3$  в GaAs.

В экспериментах Кимерлинга и Лэнга [2] наблюдалось резкое увеличение скорости отжига радиационных дефектов  $E3$ , имеющих глубокий уровень  $\varepsilon_{TC}=0.30$  эВ в  $p^+-n$ -структуре на основе GaAs при подаче на нее прямого смещения. Энергия активации отжига, равная при нулевом смещении 1.4 эВ, при подаче прямого смещения уменьшалась до 0.34 эВ. Поскольку энергия термической ионизации дефекта с вылетом дырки  $\varepsilon_{TV}=\varepsilon_g-\varepsilon_{TC}=1.1$  эВ, увеличение скорости диффузии было интерпретировано в [6] как следствие разогрева локальных колебаний при многофононном захвате дырки.

Скорость отжига, измеренная при обратном смещении, оказалась такой же, как и при нулевом смещении. Поскольку при нулевом смещении уровень  $E3$  лежит ниже электронного уровня Ферми, а при подаче обратного смещения уровень Ферми оказывается ниже уровня  $E3$ , результат этого эксперимента исключает действие механизма перезарядки (см. п. 2.1).

Чтобы проверить, не связано ли ускорение отжига с механизмом седловой точки (механизм Бургуэна—Корбетта, см. п. 2.1), Кимерлинг и Лэнг подавали обратное смещение в виде серии коротких импульсов с частотой 1.7 ГМц. При этом заметного увеличения скорости отжига не наблюдалось. На основании этого результата авторы [2] заключили, что в этом эксперименте механизм седловой точки не наблюдается. Этот вывод, однако, был подвергнут критике в работах Стивенара и Бургуэна [36, 37]. Суть этих критических замечаний состоит в следующем. В состоянии термодинамического равновесия средняя скорость эмиссии электронов равна средней скорости их захвата  $n\langle c_p \rangle$ . В условиях эксперимента Кимерлинга и Лэнга скорость эмиссии электронов была равна  $2.5 \times 10^7$  с<sup>-1</sup>, что соответствует перезарядке дефекта с частотой 25 МГц. Поэтому подача импульсного обратного смещения с частотой 1.7 МГц не способна существенно изменить скорость перезарядки дефекта и, следовательно, не может сказываться на отжиге дефектов.

Воспроизведя эксперимент Кимерлинга и Лэнга, Бургуэн и Стивенар обнаружили, что при возрастании инжекционного тока дырок в  $n$ -область энергии активации диффузии не остается постоянной, а уменьшается, достигая при  $j=2$  А/см<sup>2</sup> величины 0.19 эВ (рис. 6). Поскольку теория Викаса—Талли—Кимерлинга не в состоянии объяснить уменьшение энергии активации диффузии на величину, большую  $\varepsilon_{TV}$ , Бургуэн и Стивенар сделал вывод, что в этих экспериментах разогрев локальных колебаний не влияет на скорость отжига. В качестве альтернативного механизма был предложен все тот же механизм седловой точки. При этом Бургуэн и Стивенар предположили, что средний коэффициент захвата дырок зависит от температуры по закону

$$\langle c_p \rangle \sim \exp \left\{ -\frac{\varepsilon'}{kT} \right\}, \quad (2.11)$$

где  $\varepsilon'=0.4$  эВ. Поскольку в механизме седловой точки частота скачков дефекта равна скорости рекомбинации носителей (или скорости перезарядки дефекта), авторы [37] объяснили результат Кимерлинга и Лэнга тем, что в условиях их эксперимента темп рекомбинации определялся скоростью захвата дырок. При возрастании концентрации дырок скорость их захвата может превысить скорость захвата электронов. Тогда темп рекомбинации будет определяться скоростью захвата электронов. Поскольку экспериментально определенную температурную зависимость коэффициента захвата электронов можно аппроксимировать зависимостью (2.11) с  $\varepsilon'=0.08$  эВ, ясно, что возрастание инжекционного тока дырок в  $n$ -область должно приводить к уменьшению энергии активации диффузии.

Интерпретация Бургуэна и Стивенара, однако, нельзя признать удовлетворительной. Действительно, поскольку при нулевом смещении уровень  $E\bar{z}$  заполнен электронами, максимальная энергия, необходимая для того, чтобы перезарядить дефект (и, таким образом, согласно Бургуэну инициировать скачок дефекта), не должна превышать термическую энергию ионизации дефекта с вылетом электрона  $\varepsilon_{TC}$ . Таким образом, большая величина энергии активации при нулевом смещении  $E_a = 1.4$  эВ находится в резком противоречии с механизмом Бургуэна (напомним, что  $\varepsilon_{TC} = 0.30$  эВ).

Покажем, что уменьшение энергии активации диффузии ниже величины  $E_a - \varepsilon_{TV}$  с ростом концентрации носителей можно объяснить с помощью теории рекомбинационно-стимулированного разогрева локальных колебаний. Действительно, ширина запрещенной зоны арсенида галлия при комнатной температуре равна 1.43 эВ, т. е. превышает энергию активации диффузии в равновесных условиях. Как уже отмечалось, при больших концентрациях дырок возможна ситуация, когда вся энергия рекомбинирующей пары  $E \approx \varepsilon_g$  запасается в системе локальных колебаний дефекта. В этом случае, поскольку  $E_a \approx \varepsilon_g$ , возможен безактивационный скачок дефекта. При этом температурная зависимость скорости отжига определяется температурной зависимостью равновесного коэффициента захвата электронов. Из соотношения (2. 10) следует, что скорость отжига дефектов при больших концентрациях дырок  $p$  перестает зависеть от  $p$ , что согласуется с наблюдавшимся в [2, 37] насыщением скорости отжига дефектов как функции инжекционного тока дырок  $j$ . Таким образом, результат Бургуэна и Стивенара согласуется с выводами теории разогрева локальных колебаний.

### 3. Другие явления, связанные с разогревом локальных колебаний

3.1. *Неупругое распыление поверхности твердых тел ионами.* Рассмотренная во второй части настоящего обзора теория разогрева локальных колебаний имела своей непосредственной целью описание рекомбинационно-стимулированных дефектных реакций. Однако основные качественные закономерности этой теории имеют значительно более широкую область применения. В частности, результаты теории разогрева локальных колебаний могут быть использованы для описания явлений, связанных с релаксацией электронных возбуждений в твердых телах. Характерным примером таких процессов является неупругое распыление поверхности твердых тел ионами.

Распыление поверхности называется неупругим в том случае, когда энергия, необходимая для отрыва атома или группы атомов от поверхности, приобретает за счет возбуждения электронной подсистемы твердого тела бомбардирующей частицей (ионом) [38]. Этот механизм распыления существенно отличается по своим характеристикам (в частности, по спектру энергий распыленных частиц) от традиционного, упругого механизма, при котором энергия налетающей частицы передается атомам поверхности путем упругих соударений за счет возбуждения каскада упругих столкновений атомов решетки [39].

Прямое доказательство существования неупругого механизма распыления было дано в экспериментальных работах группы Баранова (см. обзор [38] и литературу к нему). Эти эксперименты показали, что в той области энергий, где ядерная тормозная способность материала  $(dE'/dx)_n$  убывает с ростом энергии налетающей частицы  $E'$ , а электронная тормозная способность  $(dE'/dx)_e$  растет, коэффициент распыления<sup>6</sup>  $S$  возрастает с ростом  $E'$ . При этом оказалось, что коэффициент распыления на несколько порядков превышает ожидаемые значения, рассчитанные по стандартной каскадной теории распыления, учитывающей лишь упругие соударения атомов.

Теоретические модели неупругого распыления полупроводников и диэлектриков основаны на представлении о том, что электроны, возбужденные бомбар-

<sup>6</sup> Коэффициентом распыления  $S$  называется среднее число атомов, распыленных одной падающей первичной частицей.

дирующей частицей, передают свою энергию вторичным электронам и дыркам за счет ударной ионизации. В результате возникает «волна ионизации», распространяющаяся от трека первичной частицы [41, 42]. В месте выхода этой волны на поверхность горячие электроны передают свою энергию атомам поверхности и происходит распыление. При этом основное внимание в теоретических исследованиях неупругого распыления уделяется кинетике и другим особенностям волны ионизации, а механизм передачи энергии электронного возбуждения атомам поверхности остается невыясненным. Обычно предполагают, что распыление происходит путем испарения поверхностных атомов из области, нагретой до нескольких тысяч градусов за счет волны ионизации [43].

Нам представляется, однако, что неупругое распыление поверхности связано с разогревом локальных и поверхностных колебаний кристалла за счет многофононной рекомбинации электронов и дырок через дефекты, локализованные на поверхности (примеси, вакансии, междоузельные дефекты), или через поверхностные (таммовские) состояния. Действительно, пороговая энергия, необходимая для отрыва атома от поверхности, обычно по порядку величины равна 1 эВ. Как показано в предыдущих разделах, такая энергия легко может быть получена дефектом при многофононной рекомбинации. Другим аргументом в пользу рекомбинационно-стимулированного механизма неупругого распыления может служить тот факт, что коэффициент неупругого распыления полупроводников и диэлектриков значительно превышает коэффициент неупругого распыления металлов.

Типичный вид энергетического распределения вылетающих при неупругом распылении атомов представлен на рис. 7. Как правило, это энергетическое распределение аппроксимируется максвелловским распределением с эффективной температурой  $T \sim 2000$  К. Ясно, что такая температура не может соответствовать никакой реальной (даже локальной) температуре решетки, так как температура плавления кристалла обычно значительно ниже. Однако, как показано в п. 1.4, высокоэнергетический хвост распределения сильно возбужденных дефектов может быть аппроксимирован функцией

$$f(E) \sim \exp\left\{-\frac{E}{kT^*}\right\}, \quad kT^* = \frac{\epsilon_g}{\ln \frac{N_c^* N_v^*}{np}}. \quad (3.1)$$

Легко видеть, что когда концентрация неравновесных носителей достаточно велика, то величина  $kT^*$  становится соизмерима с шириной зоны  $\epsilon_g$ . Так, при  $np/N_c^* N_v^* \sim 0.1$ ,  $\epsilon_g \sim 1$  эВ  $T^* = 5000$  К.

**3.2. Лазерный отжиг полупроводников.** Другим важным примером явлений, в которых разогрев локальных колебаний может играть существенную роль, может служить лазерный отжиг полупроводников [45]. При лазерном отжиге практически вся энергия лазерного излучения затрачивается на возбуждении электронной подсистемы полупроводника. Таким образом, основные явления, происходящие при лазерном отжиге, связаны с релаксацией этой подсистемы. При этом энергия неравновесных электронов и дырок, образующихся при лазерном возбуждении, может передаваться решетке как за счет испускания горячими носителями решеточных фононов, так и за счет возбуждения локальных колебаний при безызлучательной рекомбинации электронов и дырок через дефекты с глубокими уровнями. При испускании горячими носителями решеточных фононов передача энергии решетке происходит практически равномерно по всему объему кристалла, в котором поглощается свет. В то же время многофононная рекомбинация через дефекты приводит к появлению в окрестности дефекта локализованного колебательного возбуждения с большой плотностью энергии, которая практически недостижима при испускании решеточных фононов.<sup>7</sup> Это обстоятельство может играть важную роль при лазерном отжиге

<sup>7</sup> В принципе возможно испускание в одном акте большого числа решеточных фононов. Такие процессы, однако, маловероятны, поскольку константа электрон-фононного взаимодействия для свободных носителей значительно меньше, чем для взаимодействия локализованных носителей с локальными колебаниями.

дефектов в твердой фазе, когда энергия излучения недостаточна для существенного повышения температуры решетки [46, 47].

Разогрев локальных колебаний может играть важную роль и при плавлении полупроводника лазерными импульсами. Характер плавления поверхности кремния изучался в [48] путем измерения коэффициента отражения от поверхности зондирующего светового импульса при одновременном наблюдении рассеяния другого зондирующего импульса, направленного под углом к поверхности. Результаты этого эксперимента приведены на рис. 8. Из рисунка видно, что плавлению кристалла соответствует возрастание коэффициента отражения примерно в 2 раза от значения, соответствующего кристаллическому состоянию, до значения, соответствующего расплаву. При этом области перехода от твердой фазы к расплаву соответствует максимум коэффициента рассеяния, что соответствует очаговому характеру плавления поверхности. Этот эксперимент был подтвержден в [49], и в настоящее время считается установленным, что плавление начинается вокруг некоторых центров. Такими центрами, по нашему мнению, могут быть сильно возбужденные вследствие рекомбинации дефекты с глубокими уровнями. Как неоднократно отмечалось выше, в условиях больших концентраций неравновесных носителей такие дефекты могут служить весьма эффективными аккумуляторами энергии, что приводит к значительному перегреву и последующему плавлению кристалла в окрестности дефектов.

*Заключение.* Рассмотренные примеры приложения теории разогрева локальных колебаний при безызлучательной рекомбинации, разумеется, не исчерпывают всего многообразия физических явлений, при описании которых необходимо учитывать неравновесность энергетического распределения локализованных колебательных возбуждений кристалла. В частности, эти представления могут оказаться полезными при описании движения дислокаций, люминесценции сильно возбужденных дефектов, влиянии разогрева локальных колебаний на сам темп рекомбинации. К сожалению, сегодняшний уровень экспериментальных исследований всех этих сложных явлений допускает лишь качественное сравнение теории с экспериментом. Это связано с тем, что, как правило, отсутствуют достоверные сведения о таких параметрах дефектов, как спектр локальных мод колебаний, параметрах электрон-фононного взаимодействия и ангармонизма колебаний. Мы надеемся, что развитие экспериментальных методов исследования дефектов и дальнейший прогресс в численном моделировании, в частности вычисление их «первых принципов» адиабатических колебательных потенциалов дефекта, позволят в будущем выйти на количественный уровень описания рассмотренных явлений.

Авторы выражают признательность В. И. Перелю и М. К. Шейнкману за многочисленные и весьма полезные дискуссии.

## ПРИЛОЖЕНИЕ I

### Вероятности многофононной эмиссии и захвата носителей

В *Приложении 1* мы не будем детально излагать теорию многофононных переходов, подробно рассмотренную в работах [7, 8, 50], монографиях [51, 52], а приведем лишь сводку основных ее результатов, необходимых для понимания процессов рекомбинационно-стимулированного разогрева локальных колебаний. При этом для простоты ограничимся рассмотрением случая, когда за многофононные переходы ответственна одна мода локальных колебаний.

Качественная картина многофононных переходов состоит в следующем [53]. Рассмотрим дефект, на котором в связанном состоянии находится электрон. Колебания решетки в силу электрон-фононного взаимодействия приводят к изменению параметров эффективной потенциальной ямы для связанного электрона и, таким образом, к изменению энергии связи электрона  $\epsilon_s$ . Это приводит к зависимости энергии связи  $\epsilon_s$  от конфигурации решетки, описываемой в одномодовом приближении координатой  $x$ , которую в дальнейшем для краткости будем

называть координатой ядра. В точке встречи адиабатических термов  $x_c$  ( $U_1(x_c) = U_2(x_c)$ ) энергия связи обращается в нуль и электронный уровень выходит в сплошной спектр. При этом возможны две ситуации [8, 50].

1. Существует потенциальный барьер, препятствующий развалу локализованного состояния. В этом случае связанное состояние не исчезает, а становится квазистационарным с конечной шириной уровня  $\Gamma$  и временем жизни  $\tau \sim \hbar/\Gamma$ , определяемым проникаемостью этого барьера.

2. Барьер отсутствует. Локализованное состояние исчезает при выходе уровня в сплошной спектр. Ситуация 1 соответствует пересечению адиабатических термов в точке  $x_c$ , т. е. зависимости  $\epsilon_b(x) \sim (x-x_c)$ ,  $x \rightarrow x_c$ ; ситуация 2 — касанию термов в точке  $x_c$ , т. е. зависимости  $\epsilon_b(x) \sim (x-x_c)^2$ ,  $x \rightarrow x_c$ .

1. *Классическое рассмотрение многофононных переходов.* Рассмотрим многофононные переходы при больших энергиях колебаний ядра, когда колебания ядра можно описывать как движение классической частицы.<sup>8</sup>

В ситуации 1 вероятности многофононной эмиссии и захвата существенно зависят от вида потенциального барьера, отделяющего квазилокальное электронное состояние от области свободного движения. Для частного случая центробежного барьера  $V = \hbar^2/mr^2$ , возникающего при выходе уровня  $p$ -типа в сплошной спектр [54], явные выражения для коэффициентов захвата и эмиссии были найдены в [12, 15, 38].

В ситуации 2 можно получить выражение для вероятности многофононной эмиссии электрона с энергией  $\epsilon$ , дефектом с энергией колебаний  $E$   $W_n(E; \epsilon)$  в достаточно общем виде. Точное решение этой задачи в рамках нестационарного метода потенциалов нулевого радиуса было найдено Демковым [55]. При этом предполагалось, что скорость ядра за время отрыва электрона не меняется. Результат Демкова в наших обозначениях имеет вид

$$W_n(E; \epsilon) = \frac{\omega_1}{2\pi} \frac{3}{2} \frac{\sqrt{\epsilon}}{[\epsilon_0(E)]^{3/2}} \exp\left\{-\left[\frac{\epsilon}{\epsilon_0(E)}\right]^{3/2}\right\}, \quad (\text{П. 1. 1})$$

где  $\omega_1$  — частота колебаний ядра в состоянии 1, а

$$\epsilon_0(E) = \left[\frac{9\beta}{16} (\hbar\omega_2)^2 (E - \epsilon_2 - \epsilon_T)\right]^{1/3}, \quad (\text{П. 1. 2})$$

где  $\omega_2$  — частота колебаний дефекта в состоянии 2 (без электрона), а безразмерный параметр

$$\beta \equiv \frac{1}{M\omega_2^2} \left. \frac{d^2\epsilon_b(x)}{dx^2} \right|_{x=x_c} \quad (\text{П. 1. 3})$$

играет роль эффективной константы связи электрон-фононного взаимодействия;  $M$  — масса ядра. В этом случае ионизация дефекта с большой энергией колебаний происходит всякий раз, когда ядро проходит за точку встречи термов  $x_c$ , так что коэффициент эмиссии электронов  $e_n(E)$  равен

$$e_n(E) = \frac{\omega_1}{2\pi}; \quad E > \epsilon_2 + \epsilon_T. \quad (\text{П. 1. 4})$$

Из выражений (П. 1. 1) следует, что с ростом энергии колебаний  $E$  средняя энергия вылетающих носителей возрастает и может значительно превышать среднюю тепловую энергию носителей  $kT_s$ . Действительно, из (П. 1. 1), (П. 1. 4) имеем

$$\epsilon_m(E) = \frac{\int_0^\infty \epsilon W_n(E; \epsilon) d\epsilon}{\int_0^\infty W_n(E; \epsilon) d\epsilon} = \frac{1}{e_n(E)} \int_0^\infty \epsilon W_n(E; \epsilon) d\epsilon = \Gamma(5/3) \epsilon_0(E), \quad (\text{П. 1. 5})$$

где числовой коэффициент  $\Gamma(5/3) \approx 0.901$ . В приближении  $\epsilon_m(E) \gg kT_s$  для коэффициента захвата носителей  $c(E)$  из (1. 7) и (П. 1. 1) имеем

<sup>8</sup> При этом энергия колебаний ядра в состоянии 1 должна удовлетворять неравенству  $E - \epsilon_2 - \epsilon_T \gg [(\hbar\omega)^2 \epsilon_2]^{1/3}$ , что равносильно требованию, чтобы точка встречи термов  $x_c$  лежала вдали от точек поворота при движении ядра.

$$c(E) = \frac{\pi \sqrt{2}}{m^{*2} \sqrt{\beta(E - \varepsilon_2)}}, \quad (\text{П. 1. 6})$$

где  $m^*$  — эффективная масса носителя. Простейшая модель системы термов для ситуации 2 была предложена в работе [8], где квадратичная зависимость энергии связи  $\varepsilon_b(x) = \beta M \omega_2^2 (x - x_c)^2 / 2$  была распространена на весь интервал изменения  $x$  вплоть до положения равновесия ядра. В этой модели адиабатические термы аппроксимируются двумя парабололами разной кривизны, касающимися в точке  $x_c$ . При этом параметр  $\beta$  оказывается связанным с энергией Франка—Кондона  $\varepsilon_{FC}$  соотношением  $\beta = \varepsilon_{FC} / (\varepsilon_T + \varepsilon_{FC})$ .

Дадим числовую оценку коэффициента захвата  $c(E)$ . Положив  $m^* \sim 10^{-28}$  г,  $\beta \sim 0.1$ ,  $E - \varepsilon_2 \sim 0.5$  эВ, получим  $c \sim 10^{-6}$  см<sup>3</sup>/с, что соответствует сечению захвата  $\sigma = c / \langle v \rangle \cdot 10^{-13}$  см<sup>2</sup>;  $\langle v \rangle$  — средняя тепловая скорость носителей ( $\langle v \rangle \sim 10^7$  см/с). Несмотря на большую величину сечения захвата, в равновесных условиях классически разрешенные переходы вносят малый вклад в темп захвата, поскольку требуют активации ядра на большие энергии.

II. *Квантовое рассмотрение.* Если движение ядра в процессе ионизации дефекта описывать квантовым образом, то переход с терма  $U_1$  на терм  $U_2$  становится возможным при энергии колебаний  $E < \varepsilon_2 + \varepsilon_T$  (рис. 2). Вероятность такого туннельного перехода экспоненциально мала, однако в состоянии равновесия туннельные переходы доминируют, поскольку малость вероятности перехода компенсируется экспоненциальным возрастанием заселенности колебательных состояний.

Основную экспоненту в вероятности туннельного перехода можно получить, используя метод комплексных классических траекторий Ландау [54]. Согласно этому методу, вероятность перехода с экспоненциальной точностью равна

$$W(E) \sim \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \text{Im } S(E) \right\}, \quad (\text{П. 1. 7})$$

где  $\text{Im } S$  — мнимая часть действия, вычисленного вдоль траектории, начинающейся в области классически разрешенного движения для терма  $U_1$ , заканчивающейся в классически разрешенной области для терма  $U_2$  и проходящей через «точку перехода»  $x_c$  (которая в данном случае соответствует точке встречи термов), лежащую в классически запрещенной области. Поскольку на участках траектории, лежащих в классически разрешенных областях, действие вещественно, в вероятность перехода вносит вклад лишь участок траектории, лежащий в классически запрещенной области, соединяющий точки поворота  $a_1$  и  $a_2$  и проходящий через точку  $x_c$  (рис. 2). Таким образом, для мнимой части действия имеем

$$\begin{aligned} \text{Im } S(E) &= - \left\{ \int_{a_1}^{x_c} \sqrt{2M(U_1(x) - E)} dx - \int_{x_c}^{a_2} \sqrt{2M(U_2(x) - E)} dx \right\} \equiv \\ &\equiv S_2(E) - S_1(E), \end{aligned} \quad (\text{П. 1. 8})$$

где

$$S_i(E) = \sqrt{2M} \int_{a_i}^{x_c} \sqrt{U_i - E} dx; \quad i = 1, 2.$$

При параболическом виде потенциалов  $U_1$  и  $U_2$  легко получить явные выражения для  $S_i$ ;

$$\begin{aligned} S_i(E) &= \frac{\varepsilon_i}{\omega_i} \left[ \sqrt{Z_i} + (1 - Z_i) \ln \frac{\sqrt{1 - Z_i}}{1 + Z_i} \right]_{i=1, 2}, \\ Z_i &= \frac{\varepsilon_1 - E}{\varepsilon_i}; \quad \varepsilon_1 = \varepsilon_2 + \varepsilon_T, \end{aligned} \quad (\text{П. 1. 9})$$

где  $\omega_{1, 2}$  — частоты колебаний в состояниях 1, 2. В случае, когда адиабатические термы аппроксимировались потенциалами Морза  $U_i \sim A (\exp \{-2\alpha x\} -$



$-2 \exp\{-\alpha_i x\}$ ), выражения для  $S_i$  были найдены Мевдевым [56]. Вероятность ионизации дефекта с энергией колебаний  $E$   $\tilde{W}(E)$  пропорциональна произведению вероятности перехода  $W(E)$  на степень заполнения колебательного состояния  $f(E)$ . В состоянии равновесия  $f(E) \sim \exp\{-E/kT\}$ , таким образом, имеем

$$\tilde{W}(E) \sim W(E) f(E) \sim \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}[S_2(E) - S_1(E)] - \frac{E}{kT}\right\}. \quad (\text{П. 1. 10})$$

Величина  $\tilde{W}(E)$  имеет максимум при энергии  $E_0$ , определяемой из уравнения  $\partial\tilde{W}(E)/\partial E=0$ , которое удобно преобразовать к виду

$$\frac{2}{\hbar}[\tau_1(E) - \tau_2(E)] + \frac{1}{kT} = 0, \quad (\text{П. 1. 11})$$

где величины

$$\tau_i(E) = -\frac{\partial S_i}{\partial E} = \sqrt{\frac{M}{2}} \int_{a_i}^{x_c} \frac{dx}{\sqrt{U_i - E}} \quad (\text{П. 1. 12})$$

имеют смысл времен туннелирования ядра от точек поворота  $a_i$  до точки встречи  $x_c$ . Для модели Хуанга—Рис [57], в которой термы имеют вид одинаковых парабол со смещенными друг относительно друга положениями равновесия, решение уравнения (П. 1. 11) было найдено Маквортом [7]:

$$E_0(T) = \frac{\varepsilon_T}{2 \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2}} \left[ \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} \sqrt{1 + \xi^2} - \xi - \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} \right], \quad (\text{П. 1. 13})$$

$$\vartheta \equiv \hbar\omega/kT; \quad \xi \equiv \frac{1}{\operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2}} \frac{\varepsilon_{FC}}{\varepsilon_T}.$$

Оптимальная энергия многофононных переходов  $E_0(T)$  в (П. 1. 13) отсчитывается от минимума терма  $U_2$ . Используя (П. 1. 13), можно показать, что в области низких и средних температур  $kT \ll \hbar\omega$  оптимальная энергия многофононных переходов  $E_0$  во много раз меньше энергии пересечения термов  $\varepsilon_2$ . Это обстоятельство не связано со спецификой модели Хуанга—Рис, а является общей чертой многофононных переходов (см., например, [8]).

Ширина пика в энергетической зависимости  $\tilde{W}(E)$  дается соотношением

$$\partial E = \left[ \frac{2}{\hbar} \frac{d^2}{dE^2} \operatorname{Im} S(E) \right]_{E=E_0}^{-1/2}. \quad (\text{П. 1. 14})$$

Для модели Хуанга и Рис

$$\partial E = \sqrt{\hbar\omega\varepsilon_T} \frac{\sqrt{1 + \xi^2} - \xi \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2}}{2 \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} \sqrt{1 + \xi^2}}.$$

Видно, что ширина пика значительно меньше термической энергии ионизации дефекта  $\varepsilon_T$ , что оправдывает приближения, сделанные при выводе функций распределения в п. 1.2.

В заключение приведем выражение для средних темпов эмиссии и захвата носителей в модели Хуанга—Рис, которые получаются суммированием  $\tilde{W}(E)$  по всем энергиям колебаний. При этом сумму можно заменить на интеграл, который с учетом изложенного выше естественно взять методом перевала. Результат имеет вид

$$\langle e \rangle \sim \exp\left\{-\frac{\varepsilon_T}{kT} - \langle \Phi_{HR}(T) \rangle\right\}, \quad (\text{П. 1. 15})$$

$$\langle c \rangle \sim \exp\{-\langle \Phi_{HR}(T) \rangle\}, \quad (\text{П. 1. 16})$$

$$\Phi_{HR} = \frac{\varepsilon_T}{\hbar\omega} \left\{ -\frac{\vartheta}{2} + \ln \frac{1 + \sqrt{1 + \xi^2}}{\xi} + \xi \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} \right\}. \quad (\text{П. 1. 17})$$

Выражение для среднего темпа многофононной эмиссии  $\langle e \rangle$  и сечения захвата  $\sigma$  в модели касающихся парабол, найденное в [8], имеет вид, аналогичный (П. 1. 15), (П. 1. 16), однако функция  $\Phi$  в этом случае определяется выражением

$$\Phi = \frac{2\beta}{(1-\beta)^{3/2}} \frac{\varepsilon_2}{\hbar\omega} [\operatorname{arth} \sqrt{Z(1-\beta)} - \sqrt{Z(1-\beta)}], \quad (\text{П. 1. 18})$$

$$Z = (\varepsilon_2 - E_0)/\varepsilon_2; \quad \beta \equiv \varepsilon_{FC}/(\varepsilon_{RC} + \varepsilon_T),$$

а оптимальная энергия перехода  $E_0$  определяется как корень трансцендентного уравнения (П. 1. 11).

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

### Многомодовое рассмотрение

В теории многофононных переходов наиболее популярной является одномодовая модель, в которой захват и эмиссия носителей определяются взаимодействием с одной модой локальных колебаний. В одномодовом приближении (в пренебрежении ангармонизмом локальных колебаний) плотность колебательных состояний не зависит от энергии колебаний:

$$\rho_{1,2}(E) = 1/\hbar\omega_{1,2}, \quad (\text{П. 2. 1})$$

где  $\omega_{1,2}$  — частоты колебаний дефекта в зарядовых состояниях<sup>9</sup> 1, 2.

В реальной ситуации, однако, дефект характеризуется целым набором колебательных мод. Если выделяемая при захвате носителя энергия быстро распределяется между всеми модами локальных (квазилокальных) колебаний, а затем сравнительно медленно уходит в решетку, то состояние дефекта можно характеризовать функцией распределения дефектов по полной энергии колебаний  $E$ , т. е. суммарной энергии всех колебательных мод. В этом случае плотность колебательных состояний существенно зависит от энергии колебаний  $E$ . В дальнейшем мы будем рассматривать простейшую многомодовую модель, в которой все  $s$  колебательных мод дефекта имеют одну и ту же частоту  $\omega$ . В этом случае плотность колебательных состояний имеет вид [14]

$$\rho_s(E) \doteq \frac{1}{(\hbar\omega)^s} \frac{E^{s-1}}{(s-1)!}. \quad (\text{П. 2. 2})$$

Если полная энергия колебаний равна  $E$ , то энергия одной моды  $E'$  может принимать любые значения, лежащие в интервале  $0 \leq E' \leq E$ . Найдем вероятность  $K_s(E, E')$  того, что в одной моде соберется энергия, большая, чем  $E'$ , при условии, что полная энергия колебаний равна  $E$ . Эта вероятность, очевидно, равна отношению числа состояний в системе  $s-1$  осцилляторов с энергией, меньшей, чем  $E-E'$ , к полному числу состояний в системе  $s-1$  состояний с энергией, меньшей чем  $E$ :

$$K_s(E, E') = \frac{\int_0^{E-E'} \rho_{s-1}(E'') dE''}{\int_0^E \rho_{s-1}(E'') dE''} = \frac{\rho_s(E-E')}{\rho_s(E)} = \frac{(E-E')^{s-1}}{E^{s-1}}. \quad (\text{П. 2. 3})$$

В Приложении 1 приведены результаты теории многофононных переходов, полученные в одномодовом приближении. Обсудим, как можно вычислить коэффициенты захвата и эмиссии носителей дефектом с полной энергией  $E$  в том случае, когда за эти процессы ответственна лишь одна мода колебаний. В этом случае вероятность электрона с энергией  $\varepsilon$  дефектом с полной энергией колебаний  $E$  равна

<sup>9</sup> В последующих формулах этого раздела мы для краткости будем опускать значок зарядового состояния.

$$W_s(E; \epsilon) = \int_0^E W_0(E'; \epsilon) \frac{dK_s(E, E')}{dE'} dE'. \quad (\text{П. 2. 4})$$

Здесь  $W_0(E', \epsilon)$  — темп эмиссии электронов с энергией  $\epsilon$ , когда в моде, ответственной за многофононные переходы, сосредоточена энергия  $E'$ . Величина  $W_0(E'; \epsilon)$  может быть вычислена в рамках одномодовой модели. Множитель  $dK_s(E, E')/dE'$  определяет вероятность того, что в данной моде имеется энергия  $E'$  при условии, что полная энергия колебаний равна  $E$ . С помощью величины  $W_s(E; \epsilon)$  можно, используя (1. 6), (1. 7), вычислить коэффициенты эмиссии и захвата носителей.

При выводе неравновесных функций распределения в условиях слабого разогрева локальных колебаний (п. 1.2) существенно использовался тот факт, что произведение коэффициента захвата  $c(E)$  на равновесную функцию распределения  $f^{(0)}(E)$  имеет резкий максимум при оптимальной энергии туннелирования  $E_0$ . Напомним, что наличие этого резкого максимума было следствием экспоненциальной зависимости коэффициента  $c(E)$ . Поскольку  $K_s(E, E')$  — степенная функция энергии, использование величины  $W_s(E; \epsilon)$  вместо  $W_0(E; \epsilon)$  при вычислении коэффициента захвата не может существенно изменить величину оптимальной энергии многофононных переходов  $E_0$ .

#### Список литературы

- [1] Клиггер М. И., Лушчик Ч. Б., Мамовец Т. В., Холодарь Г. А., Шейнкман М. К., Эланго М. А. // УФН. 1985. Т. 147. В. 3. С. 523—558.
- [2] Lang D. V., Kimerling L. C. // Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. N 8. P. 489—492.
- [3] Lang D. V., Kimerling L. C. // Appl. Phys. Lett. 1976. V. 28. N 5. P. 248—250.
- [4] Лашкарев В. Е., Любченко А. В., Шейнкман М. К. Неравновесные процессы в фотопроводниках. Киев, 1982. 284 с.
- [5] Seitz F., Koehler J. // Solid State Physics Advanced in Research and Applications / Ed. by F. Seitz, P. Turnbull. N. Y., 1956. V. 2. P. 307.
- [6] Weeks J. P., Tully J., Kimerling L. C. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 8. P. 3286—3291.
- [7] Markwart T. // J. Phys. C. 1981. V. 14. N 29. P. L895—L899.
- [8] Абакумов В. Н., Меркулов И. А., Перель В. И., Ясиевич И. Н. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. В. 4 (10). С. 1472—1486.
- [9] Мешков С. В. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. В. 5 (11). С. 1734—1756.
- [10] Исоселевич А. С., Рашба Э. И. // ЖЭТФ. 1986. Т. 88. В. 5. С. 1879—1897.
- [11] Hayes W., Stoneham A. M. Defect and defect processes in nonmetallic solids. N. Y., 1985. 472 p.
- [12] Абакумов В. Н., Пахомов А. А., Ясиевич И. Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. В. 11. С. 145—148.
- [13] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М., 1979. 528 с.
- [14] Haggi P., Talkner P., Borkovec M. // Rev. Mod. Phys. 1990. V. 62. N 2. P. 251—342.
- [15] Абакумов В. Н., Пахомов А. А., Шейнкман М. К., Ясиевич И. Н. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 12. С. 2232—2234.
- [16] Sumi H. // Physica. B. 1983. V. 116. N 1. P. 39—44.
- [17] Sumi H. // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. N 8. P. 4616—4630.
- [18] Абакумов В. Н., Пахомов А. А., Ясиевич И. Н. // Письма ЖЭТФ. 1991. Т. 52. В. 3. С. 167—169.
- [19] Ребане К. К. Элементарная теория колебательных спектров примесных центров кристаллов. М., 1968. 232 с.
- [20] Бургуэн Ж., Ланц М. Точечные дефекты в полупроводниках. 1. Экспериментальные аспекты. М., 1985. 304 с.
- [21] Маннинг Дж. Кинетика диффузии атомов в кристаллах. М., 1971. 280 с.
- [22] Barnes E. // Phys. Rev. B. 1970. V. 1. N 12. P. 4735—4747.
- [23] Sibille A. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 8. P. 3929—3936.
- [24] Ewvayayе A. O. // J. Appl. Phys. 1977. V. 48. N 2. P. 734—738.
- [25] Хабибуллаев П., Юнусов М. С., Махкамов Ш., Оксенгендлер Б. Л., Пахаруков Ю. В. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 2. С. 300—302.
- [26] Baraff G., Schluter M., Allan G. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 50. N 10. P. 739—742.
- [27] Weiser K. // Phys. Rev. 1962. V. 126. N 4. P. 1427—1436.
- [28] Gregory V. L. // J. Appl. Phys. 1965. V. 46. N 12. P. 3745—3749.
- [29] Lüty F. // Physics of Colour centers / Ed. by B. Fowler. N. Y., 1968. P. 182.
- [30] Bourgoин J., Corbett J. W. // Phys. Lett. 1972. V. 38a. N 2. P. 135—137.
- [31] Оксенгендлер Б. Л. // Письма ЖЭТФ. 1976. Т. 24. В. 1. С. 12—15.
- [32] Шейнкман М. К. // Письма ЖЭТФ. 1983. Т. 38. В. 6. С. 278—280.
- [33] Елисеев П. Г., Завестовская И. Н., Полуэктов И. А., Попов Ю. М. // Тр. ФИАН СССР. 1983. Т. 141. С. 154—185.
- [34] Ленченко В. И. // ФТТ. 1969. Т. 11. В. 3. С. 799—801.
- [35] Павлович В. Н. // ФТТ. 1988. Т. 30. В. 10. С. 2794—2980.
- [36] Pons P., Bourgoин J. C. // J. Phys. C. 1985. V. 18. N 19. P. 3839—3871.

- [37] Bourgojn J. C., Stievenard D. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 12. P. 8140—8145.
- [38] Баранов И. А., Мартыненко Ю. В., Цепелевич С. О., Явлинский Ю. И. // УФН. 1988. Т. 156. В. 3. С. 478—511.
- [39] Беринг Р. Распыление тел ионной бомбардировкой. Т. 1. М., 1984. 336 с.
- [40] Таблицы физических величин / Под ред. И. К. Киикоина. М., 1976. 1008 с.
- [41] Watson C. S., Tombrello T. A. // Rad. Eff. 1985. V. 89. P. 263.
- [42] Катин В. В., Мартыненко Ю. В., Явлинский Ю. И. // Письма ЖТФ. 1987. Т. 11. В. С. 665—667.
- [43] Seiberling L. E., Griffith J. E., Tombrello T. A. // Rad. Eff. 1980. V. 52. P. 201.
- [44] Husinsky W., Bruckmuller R. // Surf. Sci. 1979. V. 80. P. 637.
- [45] Штырков Е. И., Хайбуллин И. Б., Зарипов М. М. и др. // Деп. в ВИНТИ. М., 1977. № 2061-74.
- [46] Kimerling L. C. // Defects and radiation effects in semiconductors. Bristol—London, 1979. P. 56.
- [47] Двуреченский А. В., Качурин Г. А., Нидаев Е. В., Смирнов Л. С. Импульсный лазерный отжиг полупроводниковых материалов. М., 1982. 208 с.
- [48] Ивлев Г. Д. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 12. С. 2188—2190.
- [49] Kong J. F., Sipe J. E., van Driel H. M. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 10. P. 635.
- [50] Абакумов В. Н., Курносова О. В., Пахомов А. А., Ясевич И. Н. // ФТТ. 1988. Т. 30. В. 6. С. 1793—1802.
- [51] Коварский В. А. Кинетика безызлучательных процессов. Кишинев, 1968. 208 с.
- [52] Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М., 1986. 304 с.
- [53] Henry C. H., Lang D. V. // Phys. Rev. B. 1978. V. 15. N 2. P. 989—1016.
- [54] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (Нерелятивистская теория). М., 1974. 752 с.
- [55] Демков Ю. Н. // ЖЭТФ. 1964. Т. 49. В. 4. С. 1126—1135.
- [56] Медведев Э. С. // Хим. физика. 1985. № 1. С. 32—43.
- [57] Huang K., Rhys A. // Proc. Roy. Soc. A. 1950. V. 204. N 1078. P. 406—423.
- [58] D. von der Linde, J. Kuhl, H. Klingenberg // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 44. N 23. P. 1505—1508.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Санкт-Петербург

Получен 12.05.1991  
Принят к печати 17.05.1991