

УДК 621.315.592

МНОГОФОНОННАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ ЧЕРЕЗ ГЛУБОКИЕ ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ

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

Рассмотрены процессы термической ионизации и многофононной рекомбинации через глубокие примесные центры. Для описания состояний носителей использована многозонная модель короткодействующего потенциала, что впервые позволило вычислить сечения захвата электронов и дырок на один и тот же центр. Вычисления проведены на примере донорного A_1 -состояния в полупроводниках A^3B^5 . Результаты вычислений сопоставлены с экспериментальными данными по захвату электронов и дырок на уровень εL_2 в GaAs.

В основе теоретического описания многофононных переходов лежит представление об адиабатических потенциалах (термах) [1]. Наиболее простая модель захвата, позволяющая учесть его основные качественные особенности, состоит в рассмотрении взаимодействия носителя с одной модой локальных колебаний. При этом адиабатический терм U зависит от конфигурационной координаты x , именуемой в дальнейшем координатой «ядра». При изучении многофононного захвата рассматриваются два адиабатических термина $U_1(x)$, $U_2(x)$, соответствующие свободному и связанному состояниям электрона. При этом $U_2(x) = U_1(x) - \varepsilon_b(x)$, где $\varepsilon_b(x)$ — энергия связи электрона. Для $U_1(x)$ обычно используется параболическое приближение. В то же время терм $U_2(x)$ определяется зависимостью энергии электрона от координаты ядра x . Величина сечения захвата определяется поведением волновых функций в окрестности точки встречи термов x_c , $U_1(x_c) = U_2(x_c)$.

Если форма потенциальной ямы для связанного электрона такова, что при подходе к границе сплошного спектра связанное состояние исчезает (рис. 1, а), то энергия связи квадратично зависит от x ($\varepsilon_b(x) \sim (x - x_c)^2$), так что термы U_1 и U_2 касаются в точке встречи. При этом для описания состояния с малой энергией связи становится применимой модель потенциала нулевого радиуса (модель Луковского) [2, 3]. Этот случай подробно исследован в [4]. В этой работе терм $U_2(x)$ описывался сдвинутой параболой с перенормированной частотой, причем сдвиг и перенормировка определялись одной константой связи β . Полученное в [4] выражение для сечения захвата помимо термической энергии ионизации ε_t содержало лишь два параметра модели: константу связи β и частоту локальных колебаний ω . Значения β и ω в принципе могут быть определены из данных по поглощению света и примесной люминесценции.

Следует, однако, отметить, что наиболее популярной моделью, используемой для описания многофононного захвата, является модель, в которой термы U_1 , U_2 имеют вид двух одинаковых сдвинутых парабол. В дальнейшем мы будем называть эту модель «моделью-Хуанга и Рис», поскольку она впервые использовалась в [5]. В модели Хуанга и Рис термы U_1 , U_2 пересекаются в точке встречи x_c , а энергия связи линейно зависит от $x - x_c$. Такая зависимость может иметь место лишь для электрона, локализованного в яме с барьером (рис. 1, б). Естественно, что в этом случае зам-

кнутые выражения для сечений захвата можно получить, лишь сделав конкретные предположения о характере потенциального барьера. Именно с этим связан тот факт, что в [6-8], где использовалась модель Хуанга и Рис, для предэкспоненциального множителя была получена лишь грубая оценка. Отметим также, что во всех упомянутых работах вычисления проводились в однозонном приближении. Такое приближение нельзя считать хорошим для глубоких центров, энергия ионизации которых сравнима с шириной запрещенной зоны ϵ_g .

В настоящей работе процесс многофононной рекомбинации через глубокие примесные центры рассмотрен в рамках многозонной модели короткодействующего потенциала в духе работы [9]. Использование многозонного приближения дало возможность получить выражения для сечений захвата электронов и дырок на один и тот же центр.

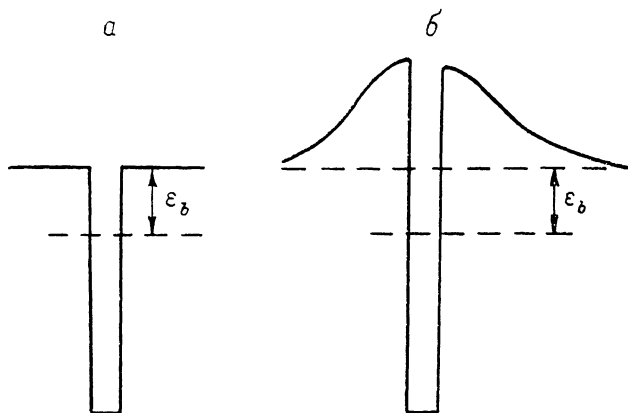


Рис. 1. Характерный вид потенциальной ямы для связанного носителя.

а — в случае касания адиабатических термов, б — в случае пересечения термов.

Для центров симметрии A_1 (симметрия мелкого донора в полупроводниках A_3B_5), которые будут рассмотрены в этой работе, волновая функция связанного состояния есть суперпозиция функций s - и p - типа, причем вклад p -функций доминирует. В результате при выходе уровня в сплошной спектр образуется эффективный «центробежный» барьер и появляются квазилокальные состояния. В этом случае оказывается справедливой модель Хуанга и Рис.

1. Система адиабатических термов для донорного уровня

Для описания процесса рекомбинации рассмотрим систему электрон+дырка+ядро. Волновая функция такой системы в адиабатическом приближении имеет вид

$$\Psi(r_e, r_h, x) = \Phi(x) \Psi_0(r_e, r_h, x), \quad (1)$$

где $\Psi_0(r_e, r_h, x)$ — волновая функция системы электрон+дырка при фиксированном положении ядра, $\Phi(x)$ — волновая функция ядра в потенциале $U(x)$, полученном при усреднении полного гамильтониана системы по электронным и дырочным координатам. Такой потенциал и называют адиабатическим термом. В дальнейшем мы будем предполагать, что в отсутствие электрона и дырки этот терм определяется простым соотношением $U = M\omega^2 x^2/2$, где M — масса ядра, ω — частота его колебаний.

Система электрон+дырка+ядро может находиться в следующих трех состояниях.

1) Электрон и дырка свободны (электрон в зоне проводимости, дырка — в валентной зоне). Этому состоянию системы соответствует терм

$$U_1 = \frac{1}{2} M \omega^2 x^2 + \varepsilon_g + \varepsilon_c(k) + \varepsilon_h(k'), \quad (2)$$

где ε_g — ширина запрещенной зоны, $\varepsilon_c(k)$, $\varepsilon_h(k')$ — кинетические энергии электронов и дырок.¹

2) Электрон связан на доноре, дырка находится в валентной зоне. В этом случае адиабатический терм имеет вид

$$U_2 = \frac{1}{2} M \omega^2 x^2 - \varepsilon_{bc}(x) + \varepsilon_h(k') + \varepsilon_g, \quad (3)$$

где $\varepsilon_{bc}(x)$ — энергия связи электрона.

3) Электрон и дырка рекомбинировали, имеется свободное «ненагруженное ядро»

$$U_3 = \frac{1}{2} M \omega^2 x^2. \quad (4)$$

Схема термов представлена на рис. 2.

Для определения хода термов в состоянии 2 необходимо знать зависимость энергии связи электрона от ядерной координаты. Обычно предполагают [10], что при колебаниях ядра параметры эффективной потенциальной ямы для связанного электрона изменяются на малую величину, линейно зависящую от координаты ядра x . Поэтому, для того чтобы найти зависимость $\varepsilon_b(x)$, нужно исследовать, как меняется энергия связи при малом изменении глубины (или ширины) потенциальной ямы. Определению этой зависимости для донорного уровня симметрии A_1 посвящен следующий раздел.

2. Зависимость энергии связи от координаты ядра

Волновые функции связанного состояния симметрии A_1 были найдены в двухзонном приближении в рамках модели Кейна в [9, 11]. В простейшем случае нулевого спин-орбитального расщепления валентной зоны подзоны тяжелых и легких дырок сливаются, а спин-отщепленная зона играет роль подзоны легких дырок. В этом случае волновая функция связанного A_1 -состояния может быть представлена в виде

$$\Psi_0 = \psi_s + \varphi u, \quad (5)$$

где ψ — блоховская амплитуда дна зоны проводимости, $u = (u_x, u_y, u_z)$ — блоховские амплитуды вершины валентной зоны, преобразующиеся как компоненты вектора при преобразованиях группы T_u . Поскольку Ψ_0 обладает симметрией A_1 , функции φ естественно искать в виде $\varphi = \varphi(r/r) \cdot \varphi(r)$. Следуя [11], для плавных огибающих ψ , φ получаем систему уравнений

$$\left. \begin{aligned} -P \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \varphi) + V(r) \varphi &= (\varepsilon_g - \varepsilon) \varphi, \\ P \frac{d\varphi}{dr} &= (\varepsilon - V(r)) \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

¹ Здесь и далее мы будем пренебрегать взаимодействием электрона и дырки в свободном состоянии, а также их взаимодействием с локальными фононами.

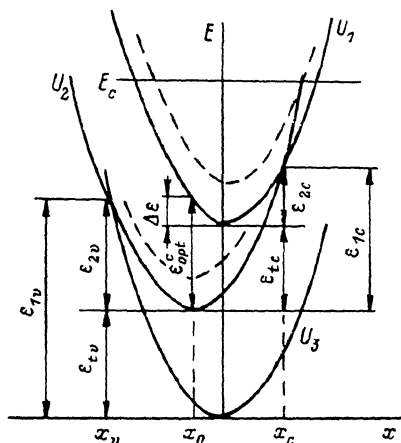


Рис. 2. Схема термов для описания рекомбинации через донорный A_1 -уровень.

Сплошными линиями показаны термы, отвечающие нулевой кинетической энергии электронов и дырок.

Здесь ε — энергия уровня, отсчитанная от вершины валентной зоны P — параметр Кейна, $P = m_0^{-1} \hbar^2 \left\langle s \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| u_z \right\rangle$; $V(r)$ — короткодействующий потенциал центра. Вне области действия потенциала U систему (6) можно расцепить на два уравнения второго порядка для огибающих ψ и φ

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} = \chi^2\psi, \quad (7a)$$

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr} - \frac{2}{r^2} \varphi = \chi^2\varphi, \quad (7b)$$

где $\chi^2 = P^{-2}\varepsilon (\varepsilon_g - \varepsilon)$. Уравнение для φ (7b) имеет вид радиального уравнения Шредингера с центробежным потенциалом $V_{\text{ц}} \sim 2/r^2$. Возникновение центробежного барьера естественно, поскольку огибающая φ соответствует вкладу состояний валентной зоны с «внутренним моментом» $L=1$.

Если устремить радиус действия потенциала примеси R_0 к нулю, то вклад функций s -типа ψ в нормировку волновой функции связанного состояния остается конечным. В то же время соответствующий вклад функций φ расходится как $1/R_0$. Это позволяет заключить, что основная часть волновой функции представляет собой p -волну, сосредоточенную в малой области $r \sim R_0$.

Известно (см., например, § II.4 монографии [2]), что для p -состояния в глубокой яме вблизи границы сплошного спектра энергия связи линейно зависит от вариации параметров потенциальной ямы и, следовательно, от координаты ядра x . Если считать, что ширина запрещенной зоны ε_g много меньше глубины потенциальной ямы V , то линейную зависимость можно распространить на всю ширину запрещенной зоны. Эти выводы подтверждаются приведенным в Приложении точным решением модельной задачи, в которой потенциал V представлен сферической прямоугольной потенциальной ямой радиуса R_0 и глубиной $V \gg \varepsilon_g$.

Линейную зависимость энергии связи от координаты ядра удобно представить в виде

$$\varepsilon_{bc}(x) = \alpha \frac{M\omega^2}{2} x_c (x_c - x), \quad (8)$$

где α — безразмерная константа связи электрон-фононного взаимодействия, связанная с энергией тепловыделения $\Delta\varepsilon$ и энергией термоионизации электрона $\varepsilon_{\text{тс}}$ соотношением²

$$\alpha = 4\Delta\varepsilon (\varepsilon_{\text{тс}} - \Delta\varepsilon)^{-1}. \quad (9)$$

Таким образом, в нашем случае система термов имеет вид, характерный для модели Хуанга и Рис. При этом терм U_2 представляет собой параболу той же кривизны, что и U_1 , U_3 , с минимумом, смещенным на величину $x_0 = -(2\Delta\varepsilon/M\omega^2)^{1/2}$. Точка встречи термов 2, 3 x_b связана с x_0 соотношением

$$x_r = x_0 (\varepsilon_{\text{тс}} + \Delta\varepsilon) / (2\Delta\varepsilon), \quad \varepsilon_{\text{тс}} = \varepsilon_g - \varepsilon_{\text{тс}}. \quad (10)$$

Энергию связи дырки $\varepsilon_{bv}(x) = \varepsilon_g - \varepsilon_{bc}(x)$ удобно представить в виде

$$\varepsilon_{bv}(x) = \alpha_1 \frac{M\omega^2}{2} x_b (x_b - x), \quad \alpha_1 = \alpha \frac{\varepsilon_{\text{тс}} - \Delta\varepsilon}{\varepsilon_{\text{тс}} + \Delta\varepsilon}. \quad (11)$$

При выходе уровня в сплошной спектр зоны проводимости ($x > x_c$) связанное состояние в силу наличия центробежного барьера становится квазистационарным. Время распада этого состояния определяется эффективной шириной уровня Γ_c . Для модели прямоугольной сферической ямы, как показано в Приложении,

² Как видно из рис. 2, энергия тепловыделения представляет собой разность оптической и термической энергий ионизации

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\text{opt}}^c - \varepsilon_{\text{тс}}.$$

$$\Gamma_c(x) = \frac{\varepsilon_g^{3/2} R_0}{P} \left[\alpha \frac{M\omega^2}{2} x_c (x - x_c) \right]^{1/2}. \quad (12)$$

Аналогично при $x < x_v$ в случае пустого донорного центра (что соответствует локализованной на центре дырке) в валентной зоне образуются квазистационарные состояния с шириной

$$\Gamma_v(x) = \frac{\varepsilon_g^{1/2} R_0}{P} \left[\alpha \frac{M\omega^2}{2} x_v (x - x_v) \right]^{3/2}. \quad (13)$$

Квазистационарные состояния в этой модели аналогичны тем, которые возникают при решении уравнения Дирака с потенциалом, величина которого много больше $m_0 c^2$. Такая задача рассматривалась в связи с проблемой сверхтяжелых ядер [12, 13]. Распад возникающих в этом случае квазистационарных состояний связывают с образованием электрон-позитронных пар в поле ядра.

3. Захват электрона и дырки при классическом описании движения ядра

Процесс рекомбинации электрон-дырочной пары через примесный центр можно разбить на две стадии: захват электрона из зоны проводимости на свободное донорное состояние и захват дырки на состояние, занятое электроном. Вычислим сначала сечение захвата электрона на глубокий центр σ_n для случая, когда можно использовать классическое описание движения ядра. При этом мы не будем принимать во внимание наличие дырки, так как в пренебрежении электрон-дырочным взаимодействием состояние дырки в этом процессе не изменяется. Методически более удобно рассматривать процесс термической ионизации электрона в зону проводимости. Коэффициент захвата электрона на центр c_n связан с вероятностью термоионизации центра e_n известным соотношением, вытекающим из принципа детального равновесия,

$$c_n = \langle v \rangle \tau_n = N_c^{-1} g e_n \exp \left\{ \frac{\varepsilon_{Tc}}{kT} \right\}, \quad (14)$$

где $\langle v \rangle$ — средняя тепловая скорость носителей $\langle v \rangle = \sqrt{8kT/\pi m_c}$, $g=2$ — кратность вырождения электронного состояния на центре, $N_c = 2(2\pi\hbar)^{-3} \times (2\pi m_c kT)^{3/2}$ — число состояний в зоне.

Картину термоионизации можно представить следующим образом: ядро совершает тепловые колебания вокруг равновесного положения в потенциале U_2 . Термическая ионизация, которой соответствует переход с терма U_2 на терм U_1 , может происходить в том случае, когда энергия колебаний E_v превышает энергию ε_{Tc} (рис. 2). Однако при $\varepsilon_{Tc} < E_c < \varepsilon_{1c}$ (где $\varepsilon_{1c} = \varepsilon_{Tc} + M\omega^2 x_c^2/2$ — энергия колебаний, соответствующая точке встречи термов) термоионизация может происходить лишь за счет туннелирования ядра. Если же рассматривать ядро как классическую частицу, то термоионизация может иметь место, лишь когда энергия колебаний E_c превышает ε_{1c} . При $x > x_c$ электронные состояния становятся квазистационарными. Вероятность их распада при фиксированном положении ядра x имеет вид $w_c(x) = \Gamma_c(x)/\hbar$, где Γ_c определяется (12).

Вероятность термоионизации системы электрон-ядро с энергией E_c за время движения ядра от точки x_c до точки поворота $x_m(E_c)$ ($M\omega^2 x_m^2/2 = E_c$) и обратно определяется формулой

$$P(E_c) = \frac{2}{\hbar} \int_{x_c}^{x_m} \Gamma_c(x) \left[\frac{2}{M} (E_c + \varepsilon_{Tc} - U_2(x)) \right]^{-1/2} dx. \quad (15)$$

Число таких переходов в единицу времени — $\omega/2\pi$. Будем считать, что ансамбль систем электрон-ядро находится в состоянии термодинамического равновесия. Тогда для вероятности термоионизации электрона получим

$$e_n = \frac{\omega}{2\pi} \frac{1}{kT} \int_{\varepsilon_{1c}}^{\infty} dE_c P(E_c) \exp\left\{-\frac{E_c}{kT}\right\}. \quad (16)$$

Выполнив интегрирование, имеем

$$e_n = \frac{1}{4} V \frac{\alpha}{1+\alpha/2} V \frac{m_c}{\varepsilon_{1c}} \frac{R_0 \varepsilon_g}{\hbar^2} kT \exp\left\{-\frac{\varepsilon_{1c}}{kT}\right\}, \quad (17)$$

где α связана с энергией тепловыделения $\Delta\varepsilon$ соотношением (9). При выводе (16), (17) мы предполагали, что происходит достаточно эффективный обмен энергией с термостатом, роль которого могут играть решеточные фононы.

Используя формулы (14), (17), для сечения захвата электронов имеем

$$\sigma_n = \frac{\pi^2}{4} \frac{\sqrt{\alpha}}{(1+\alpha/2)^{3/2}} \frac{\hbar R_0}{\sqrt{m_c \varepsilon_{2c}}} \frac{\varepsilon_g}{kT} \exp\left\{-\frac{\varepsilon_{2c}}{kT}\right\}, \quad (18)$$

где ε_{2c} — колебательная энергия терма U_1 , соответствующая точке встречи термов x_c ($\varepsilon_{2c} = M \omega^2 x_c^2 / 2$).

Рассмотрим вторую стадию процесса рекомбинации — рекомбинацию свободной дырки с электроном, локализованным на примесном центре. Нам снова удобнее вместо сечения рекомбинации вычислять вероятность обратного процесса — рождения электрон-дырочной пары (электрон на центре, свободная дырка в валентной зоне). Такому процессу соответствует переход с терма U_3 на любой из термов семейства U_2 , соответствующих различным значениям кинетической энергии дырки $e_n(\mathbf{k}')$. Вероятность такого процесса вычисляется полностью аналогично предыдущему случаю и определяется формулой

$$e_p = \frac{3}{16} \alpha_1^{3/2} \frac{R_0}{\hbar^2} V \sqrt{\frac{m_l}{\varepsilon_{1v}}} (kT)^2 \exp\left\{-\frac{\varepsilon_{1v}}{kT}\right\}. \quad (19)$$

Здесь m_l — масса легкой дырки; α_1 — константа электрон-фононного взаимодействия, определяемая (11); ε_{1v} — колебательная энергия терма U_3 , отвечающая точке встречи термов $U_2, 3$. Вычисленная вероятность рождения электрон-дырочной пары e_p есть по существу коэффициент термической ионизации дырки с пустого донорного центра в валентную зону.

Используя принцип детального равновесия, для сечения захвата дырки на занятый электроном центр получим

$$\sigma_p = \frac{3\pi^2}{32} \alpha_1^{3/2} \left(1 - \frac{\alpha_1}{2}\right) \frac{m_l}{m_h} \frac{\hbar R_0}{\sqrt{m_l \varepsilon_{2v}}} \exp\left\{-\frac{\varepsilon_{2v}}{kT}\right\}, \quad (20)$$

где m_h — эффективная масса подзоны тяжелых дырок.

4. Ме ж з о н н а я р е к о м б и н а ц и я п р и т у н н е л и р о в а н и и я д р а

В этом разделе мы рассмотрим захват носителей в области средних температур, когда энергия колебаний удовлетворяет условию $\varepsilon_{Tc} < E_c < \varepsilon_{1c}$ (ε_{Tc} — энергия термической ионизации электрона). В этих условиях ядро может перейти с терма U_2 на терм U_1 туннельным образом. Существует оптимальная энергия туннелирования E_{0c} , зависящая от температуры и определяемая конкуренцией двух факторов: уменьшением заселенности колебательных уровней ядра с ростом E_c и одновременным увеличением прозрачности барьера для ядра, разделяющего термы 1 и 2. При температурах, меньших или порядка комнатной, оптимальная энергия E_{0c} значительно меньше энергии термоактивации ε_{1c} . Это позволяет использовать для вычисления сечений захвата квазиклассический метод. Для модели Хуанга и Рис соответствующий расчет с экспоненциальной точностью был выполнен в [7]. Используя адиабатическую теорию возму-

щений по методике работы [4], можно вычислить и предэкспоненциальный множитель в сечении захвата. Для модели прямоугольной сферической ямы радиуса сечение захвата электронов имеет вид ³

$$\tau_n = \frac{\pi^2}{2} \frac{\hbar R_0}{\sqrt{m_c \varepsilon_{Tc}}} \frac{\varepsilon_g}{\sqrt{k T_c^* \hbar \omega}} \left(\frac{T_c^*}{T} \right)^2 (1 + \xi^2)^{-1/4} \exp \{-\Phi_c(E_{0c})\}, \quad (21)$$

$$\xi = \left(\operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2kT} \right)^{-1} \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_{Tc}}, \quad (22)$$

$$\frac{1}{k T_c^*} = \frac{1}{2kT} + \frac{1}{\hbar \omega} \ln \frac{1 + \sqrt{1 + \xi^2}}{\xi} \approx \frac{1}{kT} + \frac{1}{\hbar \omega} \ln \frac{\varepsilon_{Tc}}{\Delta \varepsilon}. \quad (23)$$

Оптимальная энергия туннелирования E_{0c} и показатель экспоненты Φ_c определяются формулами Макворта [7]

$$E_{0c} = \varepsilon_{Tc} \left(2 \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} \right)^{-1} \left[\operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} - \xi - \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} \sqrt{1 + \xi^2} \right], \quad (24)$$

$$\Phi_c(E_{0c}) = \frac{\varepsilon_{Tc}}{\hbar \omega} \left[\ln \frac{1 + \sqrt{1 + \xi^2}}{\xi} + \xi \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} - \sqrt{1 + \xi^2} - \frac{\vartheta}{2} \right], \quad (25)$$

где $\vartheta \equiv \hbar \omega / kT$. Выражение (21) в пределе высоких температур ($kT \gg \hbar \omega / \alpha$) переходит в активационную формулу (18).

Аналогично вычисляется и сечение захвата дырки на занятый электронном центре. Результат имеет вид

$$\tau_p = \frac{3\pi^2}{8} \frac{m_l}{m_h} \frac{\hbar R_0}{\sqrt{m_l \varepsilon_{Tc}}} \left(\frac{k T_c^*}{\hbar \omega} \right)^{1/2} (1 + \xi_p^2)^{-1/4} \exp \{-\Phi_v(E_{0v})\}, \quad (26)$$

где $\xi_p = (\operatorname{sh} \vartheta / 2)^{-1} \Delta \varepsilon / \varepsilon_{Tc}$, а T_c^* и Φ_v получаются из (23), (25) естественной заменой $\xi \rightarrow \xi_p$, $\varepsilon_{Tc} \rightarrow \varepsilon_{Tc}$.

5. Обсуждение результатов

Как уже отмечалось, в актуальной области температур захват носителей имеет характер термостимулированного туннелирования; при этом сечения захвата определяются формулами (21), (26). Для уровня, лежащего посередине запрещенной зоны ($\varepsilon_{Tc} = \varepsilon_{Tv} = \varepsilon_g / 2$), показатели экспонент в (21), (26) одинаковы; в то же время предэкспоненциальный множитель в сечении захвата электронов примерно в $\varepsilon_g / \hbar \omega$ раз больше, чем для сечения захвата дырок.

В проведенном выше рассмотрении не учитывалось влияние заряда центра на захват и термоионизацию носителей. В соответствии с [15] влияние заряда можно учесть, домножив выражение для сечения на фактор Q_{\pm} , равный для притягивающего центра

$$Q_+ = 4 \sqrt{\frac{\pi E_B}{k T_c^*}}, \quad (27)$$

для отталкивающего центра

$$Q_- = \frac{8}{\sqrt{3}} \left(\frac{4\pi^2 E_B}{k T_c^*} \right)^{1/3} \exp \left\{ - \left(\frac{27\pi^2 E_B}{k T_c^*} \right)^{1/3} \right\}. \quad (28)$$

Здесь $E_B = m^* Z^2 e^4 / (2\varepsilon^2 \hbar^2)$, где Z — величина заряда центра, m^* — эффективная масса носителя, ε — диэлектрическая проницаемость, а $T_c^* = T_c^*$ в случае захвата электронов, $T_c^* = T_c^*$ в случае захвата дырок. (Напомним, что T_c^* дается формулой (23), а T_c^* получается из нее заменой ε_{Tc} на ε_{Tv}).

Сопоставим полученные результаты с экспериментальными данными по захвату электронов на уровень $\mathcal{E}L2$ в GaAs. Существует ряд экспери-

³ Подробности этого расчета приведены в [14].

ментальных данных, указывающих на то, что образование уровня $\delta L2$ связано с замещением атома Ga в решетке атомов As [16, 17]. Если положить, что электронное состояние на этом уровне имеет симметрию A_1 , то в соответствии с данными ЭПР [17] оно должно быть одноэлектронным. В силу этого естественно приписать ионизованному $\delta L2$ -донору заряд $Z=+2$.

Положим, следуя [18], $\varepsilon_{Tc}=0.73$ эВ, а энергию локального фонона $\hbar\omega$ и энергию тепловыделения $\Delta\varepsilon$ будем использовать в качестве подгоночных параметров.⁴ Наилучшее согласие с экспериментом [11, 19] достигается при $\hbar\omega=19$ мэВ, $\Delta\varepsilon=220$ мэВ (рис. 3).

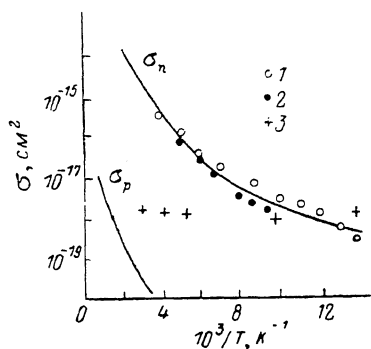


Рис. 3. Температурная зависимость сечений захвата носителей на уровень $\delta L2$ в GaAs.

1) Захват электронов: 1 — эксперимент [19], 2 — эксперимент [11], сплошная кривая — теория ($\hbar\omega=19$ мэВ, $\Delta\varepsilon=220$ мэВ, $Z=+2$). 2) Захват дырок: 3 — эксперимент [19], сплошная кривая — теория ($\hbar\omega=19$ мэВ, $\Delta\varepsilon=220$ мэВ, $Z=-1$).

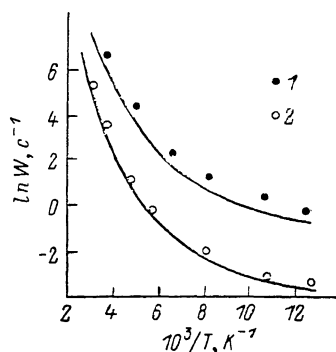


Рис. 4. Температурная зависимость вероятности теплового выброса электронов с уровня $\delta L2$ в GaAs при наличии электрического поля.

1 — $\varepsilon=4 \cdot 10^5$ В/см, 2 — $\varepsilon=3.5 \cdot 10^5$ В/см [22]. Сплошные линии — расчет по формуле (29).

Используя результаты работ [20, 21], можно вычислить вероятность термоионизации глубокого A_1 -центра при наличии сильного электрического поля

$$W(F, T) = \frac{FR_0}{8\hbar} \left(\arcsin \sqrt{\frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_g}} \right)^{-1} \exp \{ -\Phi_c^* \}, \quad (29)$$

$$\Phi_c^* = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_c}}{\hbar F} (\varepsilon_f)^{3/2} - 4\Delta\varepsilon\varepsilon_f \left(1 - \frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_g} \right) \frac{m_c\omega}{\hbar F^2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT}. \quad (30)$$

Здесь $\varepsilon_f = \varepsilon_{Tc} + \Delta\varepsilon$ — «полевая энергия ионизации»,

$$(\varepsilon_f)^{3/2} = \frac{3}{8} \varepsilon_g^{3/2} \left[\arcsin \sqrt{\frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_g}} - \left(1 - \frac{2\varepsilon_f}{\varepsilon_g} \right) \frac{\sqrt{\varepsilon_f(\varepsilon_f - \varepsilon_g)}}{\varepsilon_g} \right], \quad (31)$$

а $F=e\mathcal{E}$, где \mathcal{E} — напряженность электрического поля. На рис. 4 приведено сопоставление расчета по формуле (29) с экспериментом [22]. В качестве параметров использовались значения $\varepsilon_{Tc}=0.73$ эВ, $\Delta\varepsilon=220$ мэВ, $\hbar\omega=19$ мэВ, $R_0=5 \text{ \AA}$. Видно, что формула (29), не содержащая подгоночных параметров, согласуется с экспериментальными данными не только по ходу температурной зависимости, но и по величине.⁵ Остается, однако, открытым вопрос, как согласовать столь большое значение энергии тепловыделения с данными оптических измерений [18, 23, 24].

⁴ В качестве эффективного радиуса потенциальной ямы примем значение $R_0=5 \text{ \AA}$, в соответствии с данными [25].

⁵ Совпадение расчета, проведенного в [20] с данными [22], представляется нам случайным, поскольку при сравнении с экспериментом не учитывалась непараболичность зонного спектра. Как показано в [20, 21], учет непараболичности закона дисперсии сильно влияет на величину вероятности полевой ионизации глубоких центров.

В [19] было измерено сечение захвата дырок на уровень $\xi L2$. Вычисленное по формуле (26) с учетом множителя Q_- (28) значение σ_p не согласуется с данными [19] ни по величине, ни по температурной зависимости. Судя по тому, что измеренное в [19] сечение слабо зависит от температуры, захват дырок не связан непосредственно с многофононными переходами. Оценки, сделанные Гриммайсом, показывают, что сечение излучательного захвата на глубокие уровни в GaAs может достигать величины 10^{-18} см², что согласуется с [19].

П Р И Л О Ж Е Н И Е

Вычислим волновые функции и энергию связанного состояния для модельной задачи, в которой потенциал V имеет вид сферической прямоугольной ямы глубины V и радиуса R_0 . Решения системы уравнений (7) в этом случае имеют вид

$$\psi = \begin{cases} \frac{A e^{-\chi r}}{\chi r}, & r > R_0, \\ \frac{A}{\chi r} \frac{\sin \chi_0 r}{\sin \chi_0 R_0}, & r < R_0, \end{cases} \quad \varphi = \begin{cases} \frac{P}{\varepsilon} \frac{d\psi}{dr}, & r < R_0, \\ \frac{P}{\varepsilon + V} \frac{d\psi}{dr}, & r > R_0. \end{cases} \quad (\text{II}, 1)$$

Здесь $\chi = P^{-1} \sqrt{\varepsilon(\varepsilon_g - \varepsilon)}$, $\chi_0 = P^{-1} \sqrt{(\varepsilon + V)(\varepsilon + V - \varepsilon_g)}$, а константа A определяется из условия нормировки

$$A^2 = \frac{R_0 \chi^4}{8\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g - \varepsilon} \left[1 + \frac{\chi R_0}{4} \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g - \varepsilon} \right]^{-1}. \quad (\text{II}, 2)$$

При выводе (II, 1) использовалось условие $\chi R_0 \ll 1$, соответствующее предположению о короткодействующем характере примесного потенциала.

Из условия непрерывности функций ψ и φ в точке R_0 получаем уравнение для определения собственных значений энергии

$$D(\varepsilon) \equiv \text{tg } \chi_0 R_0 \varepsilon [V + (\varepsilon + V) \chi R_0]^{-1} = 0. \quad (\text{II}, 3)$$

Положив в (II, 3) $\varepsilon = 0$, найдем критическую глубину ямы V_0 , при которой появляются состояния в запрещенной зоне

$$\chi_0 R_0 = \pi \quad \text{или} \quad R_0 \sqrt{V_0(V_0 - \varepsilon_g)} = \pi P. \quad (\text{II}, 4)$$

Исследуем зависимость положения уровня в запрещенной зоне от малых изменений глубины потенциальной ямы $V = V_0 - v$, $v \ll V_0$. Для этого вычислим производную $d\varepsilon/dv$. В приближении $\varepsilon_g \ll V_0$ имеем

$$\frac{d\varepsilon}{dv} = - \frac{\partial D / \partial v}{\partial D / \partial \varepsilon} \approx \left[2 - \frac{\chi R_0}{2} \left(3 - \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g - \varepsilon} \right) \right]^{-1}. \quad (\text{II}, 5)$$

В (II, 5) сохранены малые члены, пропорциональные χR_0 , поскольку они имеют особенности вблизи точек выхода в сплошной спектр.

Из уравнения (II, 5) следует, что по мере уменьшения глубины ямы «выталкивание» уровня в запрещенную зону происходит по линейному закону $\varepsilon = v/2$. При $v \rightarrow 0$ из (II, 5) имеем

$$\varepsilon(v) = v/2 + P^{-1} (R_0/4) \sqrt{\varepsilon_g/2} v^{3/2}. \quad (\text{II}, 6)$$

При отрицательных v , что соответствует выходу уровня в валентную зону, $\varepsilon(v)$ становится комплексной величиной с мнимой частью

$$\Gamma_v/2 \equiv \text{Im } \varepsilon(v) = P^{-1} (R_0/4) \sqrt{\varepsilon_g/2} |v|^{3/2}. \quad (\text{II}, 7)$$

Из уравнения (II, 5) следует, что при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_g$ в зоне проводимости образуются квазистационарные состояния с шириной уровня

$$\Gamma_c/2 = (\varepsilon_g/2)^{3/2} R_0 P^{-1} \sqrt{v - v_0}, \quad (\text{II}, 8)$$

где v_c — критическое значение v , при котором уровень выходит в зону проводимости. Представив зависимость v от координаты x в виде $v_c - v = \alpha M \omega^2 x_c (x_c - x)$ и используя соотношения (II, 6), (II, 7), приходим к формулам (8), (12), (13).

Отметим, что при выводе (II, 8) мы пренебрегали малой областью энергий $(\epsilon_g - \epsilon)/\epsilon_g \sim (\epsilon_g/V_0)^2$. В этой области энергия связи зависит от $v_c - v$ квадратично, и становится справедливой модель потенциала нулевого радиуса. Считая яму очень глубокой ($V_0 \gg \epsilon_g$), эту область энергий можно исключить из рассмотрения.

Авторы выражают признательность В. И. Перелю за полезные обсуждения.

Л и т е р а т у р а

- [1] Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: ИЛ, 1958. 488 с.
- [2] Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: ЛГУ, 1975. 240 с.
- [3] Liscovsky G. Sol. St., Commun., 1965, vol. 3, N 5, p. 299—301.
- [4] Абакумов В. Н., Меркулов И. А., Перель В. И., Ясиевич И. Н. ЖЭТФ, 1985, т. 89, № 4 (10), с. 1472—1486.
- [5] Huang K. Phys. A., Proc. Roy. Soc. A, 1950, vol. 204, N 1078, p. 406—423.
- [6] Rydley B. K. J. Phys. C., 1978, vol. 11, N 11—12, p. 2323—2341.
- [7] Markwart T. J. Phys. C., 1981, vol. 14, N 29, p. L895—899.
- [8] Morgan T. N. Phys. Rev. B, 1983, vol. 28, N 12, p. 7141—7174.
- [9] Перель В. И., Ясиевич И. Н. ЖЭТФ, 1982, т. 82, № 1, с. 237—245.
- [10] Henry C. H., Lang D. Y. Phys. Rev. B, 1978, vol. 15, N 2, p. 989—1016.
- [11] Перель В. И., Ясиевич И. Н. В кн.: Материалы X зимней школы по физике полупроводников ФТИ. Л., 1982, с. 4—25.
- [12] Зельдович Я. Б., Попов В. С. УФН, 1971, т. 105, № 3, с. 403—448.
- [13] Попов В. С., Мур В. Д. Ядерная физика, 1973, т. 18, № 3, с. 684—698.
- [14] Абакумов В. Н., Курносова О. В., Лахотов А. А., Ясиевич И. Н. Препринт ФТИ АН СССР № 1162, Л., 1987. 34 с.
- [15] Абакумов В. Н., Карнус В. В., Перель В. И., Ясиевич И. Н. ФТП, 1988, т. 22, № 1, с. 262—268.
- [16] Kaminska M., Skowronsky M., Kuzsko W. Phys. Rev. Lett., 1985, vol. 55, N 20, p. 2204—2207.
- [17] Von Bardeleben H. J., Stievenard D., Huber A. et al. Phys. Rev. B., 1986, vol. 34, N 10, p. 7192—7202.
- [18] Yu P. W. Sol. St. Commun., 1982, vol. 43, N 12, p. 953—956.
- [19] Prinz V. Ya., Rechkinov S. N. Phys. St. Sd (b), 1983, vol. 118, N 1, p. 159—166.
- [20] Карнус В., Перель В. И. ЖЭТФ, 1986, т. 91, № 6 (12), с. 2319—2331.
- [21] Köster H., Kurnoova O. Y., Yassievich I. N. Phys. St. Sol. (b), 1985, vol. 127, N 1, p. 339—350.
- [22] Makram-Ebeid S., Lannoo M. Phys. Rev. B, 1982, vol. 25, N 10, p. 6406—6424.
- [23] Wang Z. G., Ledebro L.-A., Grimmeis H. G. J. Phys. C, 1984, vol. 17, N 2, p. 259—272.
- [24] Chantre A., Vincent G., Bois D. Phys. Rev. B, 1981, vol. 23, N 10, p. 5335—5376.
- [25] Колчанова Н. М., Силовская М. А., Сметанникова Ю. С. ФТП, 1982, т. 16, № 12, с. 2194—2196.

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

Поступило в Редакцию
9 февраля 1988 г.