

УДК 539.2

## РЕКОМБИНАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННАЯ МИГРАЦИЯ И ОБРАЗОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ

*В. Н. Павлович*

Рассмотрен одновременный переход примесного атома из одного равновесного положения в соседнее и электрона из возбужденного (зонного) состояния на глубокий уровень дефекта. Рассмотрены надбарьерные переходы примеси при учете деформационной (поляронной) энергии активации. Показано, что электронный переход может стимулировать диффузионный переход только при больших поляронных энергиях активации.

В последние годы интенсивно обсуждается возможность передачи энергии электронной подсистемы к ядерной подсистеме, которая затрачивается на образование или миграцию дефектов [1-9]. Такие исследования особенно были стимулированы экспериментами Ланга и Кимерлинга [1], которым впервые удалось выделить и экспериментально доказать существование рекомбинационно-стимулированной диффузии.

Теоретическое описание рассматриваемых процессов наталкивается на определенные трудности. В настоящее время существует несколько подходов к данной задаче. В работе Викаса, Тулли и Кимерлинга [2] рассматривается колебательное возбуждение дефекта при переходе носителя из зоны на локальный уровень примеси. При этом предполагается, что энергия, выделяемая при переходе носителя, передается на 8-10 локальных колебательных мод, образованных дефектом и его ближайшим окружением (дефектная молекула) и слабо взаимодействующих с окружением. Энергия, переданная носителем, перераспределяется между этими модами, и существует вероятность того, что возбужденной окажется диффузионная мода. Такая модель, вообще говоря, не согласуется с реальными колебательными спектрами кристаллов с дефектами.

Второй подход основан на предположении о существовании возбужденного резонансного уровня для электрона в зоне проводимости [7, 8], причем считается, что этот уровень является антисвязывающим. При переходе электрона на этот уровень либо с глубокого основного уровня примеси, либо из зоны проводимости (если глубокий уровень оказывается незанятым в неравновесных условиях, например при инжекции дырок) примесный атом оказывается на вершине барьера и безактивационным образом переходит в соседнее положение. Этот механизм является одним из вариантов механизма Бургуэна [9] и не подкреплен последовательными расчетами коэффициента диффузии.

Работы группы Толпыго (см. [10], где можно найти ссылки на более ранние работы) посвящены исследованию дефектообразования при аннигиляции экситонов. В этих работах подробно рассмотрены энергетические возможности таких процессов, однако подробно не обсуждался механизм передачи энергии от электронной подсистемы к ядерной. Возможность дефектообразования и миграции при аннигиляции экситонов рассматривалась также другими авторами [11].

В цикле работ Винецкого и Чайки [4-6] переход примесного атома в соседнее равновесное положение сопровождается одновременным пере-

ходом электрона из зоны проводимости на глубокой локальный уровень дефекта. Исследование проводилось в рамках двойного адиабатического приближения для электрона и легкой примеси. Рассматривалось также влияние электрического поля и в общем случае неравновесной функции распределения на вероятность такого перехода. Показано, что учет электронного перехода приводит к уменьшению энергии активации перехода, причем разогрев электронов увеличивает эффект. Однако в этих работах не проведено усреднения по колебательным состояниям примеси в исходном положении, так что фактически не учитывались надбарьерные переходы примеси (введение множителя  $1/2$  вряд ли можно считать корректным учетом надбарьерных переходов). Не учтен также поляронный эффект (смещения атомов решетки вокруг примеси), что, как будет видно ниже, существенно изменяет результат.

В данной работе мы вычислим вероятность диффузионного перехода (или перехода с образованием дефекта) с одновременным переходом электрона при учете надбарьерных переходов и поляронного эффекта. Переход примеси из одного равновесного положения в соседнее рассматривается в духе приближения сильной связи [12, 13] с использованием двойного адиабатического приближения для электрона и примесного атома.

## 1. Локализованные состояния примесного атома

Мы будем рассматривать переход примесного атома из узла в междоузлие, который сопровождается захватом электрона из зоны проводимости на образовавшийся уровень вакансии. Аналогично можно рассматривать рекомбинационно-стимулированную диффузию, когда переход примесного атома из одного междоузлия в другое (или из узла в узел) сопровождается захватом электрона на уровень примеси. После этого подошедшая дырка захватывается на уровень этой же примеси, подготавливая следующий диффузионный скачок примеси. Различия между двумя ситуациями будут рассмотрены ниже.

Приближение сильной связи в теории диффузии определяется введением локального гамильтониана  $H_x$  кристалла с примесным атомом, локализованным в положении  $x$

$$H_x = T_r + T_R + T_{R_n} + V(r, R, R_n) + W_x(R, R_n) + U(R_n), \quad (1)$$

где  $T_r$ ,  $T_R$ ,  $T_{R_n}$  — кинетические энергии «лишнего» электрона, примесного атома и атомов растворителя;  $V(r, R, R_n)$  — энергия взаимодействия электрона с атомами примеси и растворителя;  $U(R_n)$  — энергия взаимодействия атомов растворителя между собой;  $W_x(R, R_n)$  — энергия взаимодействия примесного атома, локализованного в положении  $x$ , с атомами растворителя

$$W_x(R, R_n) = \begin{cases} W(R, R_n) & \text{при } R \in x, \\ 0 & \text{при } R \notin x, \end{cases} \quad (2)$$

где  $W(R, R_n)$  — полная энергия взаимодействия примеси с атомами кристалла, так что  $W(R, R_n) = \sum_x W_x(R, R_n)$ .

Выделяя при помощи двойного адиабатического приближения движение электрона и примеси, мы можем записать собственную функцию гамильтониана (1) в виде

$$\Psi_x = \psi_i^x(r, R_x, R_n) \eta_{s_x}^i(R, R_n) \prod_f \varphi_{f_x}^{s_f}, \quad (3)$$

где функции  $\psi_i^x(r, R_x, R_n)$ ,  $\eta_{s_x}^i(R, R_n)$ ,  $\prod_f \varphi_{f_x}^{s_f} \equiv \Phi_x$  удовлетворяют обычным уравнениям адиабатического приближения в нулевом порядке по операторам неадиабатичности для электрона, примесного атома и атомов

растворителя соответственно. Энергия начального состояния при этом равна

$$E_x \equiv \hbar\omega_x = U_x(\mathbf{R}_{nx}^0) + \varepsilon_l + W_{sx}^l + \sum_f \hbar\omega_f \left( \bar{n}_f + \frac{1}{2} \right), \quad (4)$$

где  $U_x(\mathbf{R}_{nx}^0)$  — нулевой член разложения энергии взаимодействия атомов растворителя по степеням смещений;  $\varepsilon_l$ ,  $W_{sx}^l$ ,  $\hbar\omega_f$  — собственные значения энергии электрона, примесного атома и фононов в адиабатическом приближении.

Электронная волновая функция начального состояния  $\psi_l^x$  может быть функцией зонного электрона блоховского типа  $\psi_l^x \equiv \psi_k(\mathbf{r})$  либо функцией локализованного возбужденного состояния примесного центра (если оно существует). В последнем случае переход электрона в основное состояние может быть запрещен по соображениям симметрии, причем переход примеси в соседнее равновесное положение может снимать этот запрет путем возбуждения способствующей моды (promoting mode). Соседнее равновесное положение  $x'$  для случая перехода из узла в междоузлие существенно отличается от исходного. При таком переходе могут возникать новые уровни, локализованные либо на вакансиях, либо на примесном атоме. Потенциал  $V(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{x'}, \mathbf{R}_n)$  при фиксированных  $\mathbf{R}_{x'}$  и  $\mathbf{R}_n$  отличен от  $V(\mathbf{r}, \mathbf{R}_x, \mathbf{R}_n)$ . Поэтому функции  $\psi_{l'}^{x'}$  отличаются от функций  $\psi_l^x$ , причем эти состояния не ортогональны как собственные состояния разных гамильтонианов. Переход электрона из зоны проводимости на локализованное состояние может быть обусловлен отличным от нуля интегралом перекрытия между этими двумя состояниями. Кроме того, переход электрона должен вызываться различием между гамильтонианами  $H_x$  и  $H_{x'}$ .

При вычислении адиабатических функций ионной подсистемы в положении  $x'$  следует учитывать изменение равновесных положений ядер растворителя, изменение ямы, в которой колеблется примесь, и изменение минимума энергии в этом положении. Энергию конечного состояния можно представить в виде

$$E_{x'} = U_{x'}(\mathbf{R}_{nx}^0) + \varepsilon_{l'} + W_{s'x'}^l + \sum_f \hbar\omega_f \left( n_f + \frac{1}{2} \right) - \hbar \sum_f \zeta_f^2 \omega_f, \quad (5)$$

где величина  $\zeta_f$  определяет в нормальных координатах изменения равновесных положений атомов растворителя при переходе  $x \rightarrow x'$ .

Переход атома при рекомбинационно-стимулированной диффузии отличается от процесса дефектообразования тем, что переход происходит в трансляционно-эквивалентное положение и энергия взаимодействия электрона с атомами одинакова для обоих положений примеси. Однако если учитывать то, что в начальном и конечном положениях электрон находится в различных состояниях, то потенциальная яма, в которую переходит примесь, отличается от исходной и волновые функции  $\psi_l^x$  и  $\psi_{l'}^{x'}$  нужно определять с учетом этих соображений.

## 2. Вероятность диффузионного перехода

Вероятность перехода в единицу времени из положения  $x$  в положение  $x'$  определяется коэффициентом разложения полной волновой функции в ряд по полной системе функций типа (3). Эта вероятность равна [13, 14]

$$w_{xx'} = \frac{2}{\hbar^2} \lim_{\tau \rightarrow 0} \sum_{\{i\} \{j\}} P(i) \langle x | \mathcal{K} - H_x | x' \rangle \langle x' | \mathcal{K} - H_{x'} | x \rangle \times \\ \times \operatorname{Re} \int_0^\infty d\mu \exp \{ i\mu (\omega_x - \omega_{x'}) - \mu\tau \}, \quad (6)$$

где  $\sum_{\{i\} \{j\}} P(i) \dots$  — усреднение по начальным и суммирование по конечным состояниям фононной подсистемы,  $|x\rangle \equiv \Psi_x \equiv |l_x\rangle |S_x\rangle |i\rangle$ .

Гамильтонианы  $H_x$  при разных  $x$  отличаются видом потенциальной энергии  $V(\mathbf{r}, \mathbf{R}_x, \mathbf{R}_n)$  и  $W_x(\mathbf{R}, \mathbf{R}_n)$ . При этом полная энергия взаимодействия примеси с ядрами растворителя  $W(\mathbf{R}, \mathbf{R}_n) = \sum_x W_x(\mathbf{R}, \mathbf{R}_n)$ . Аналогично полную энергию взаимодействия электрона с ядрами примеси и матрицы можно представить в виде суммы адиабатических потенциалов  $V(\mathbf{r}, \mathbf{R}_x, \mathbf{R}_n)$  плюс некоторая добавка  $\tilde{V}$ , компенсирующая искажения, возникающие при таком представлении при больших  $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_x|$ . В дальнейшем этой добавкой мы будем пренебрегать. Тогда  $\mathcal{H} - H_x = \sum_{x' \neq x} (V(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{x'}, \mathbf{R}_n) + W_{x'}(\mathbf{R}, \mathbf{R}_n))$ .

Волновые функции  $\Psi_x$  не ортогональны при разных  $x$ . При помощи известного преобразования [15] их можно ортогонализировать и вычислить вероятность перехода с учетом интегралов перекрытия примесных функций с различными  $x$  [16]. Вначале мы пренебрежем этими интегралами перекрытия и будем считать  $|S_x\rangle$  и  $|S'_x\rangle$  ортогональными. Тогда матричные элементы  $\langle x | \mathcal{H} - H_x | x' \rangle$  в кондоновском приближении имеют вид

$$\langle x | \mathcal{H} - H_x | x' \rangle = \langle l_x | V(\mathbf{r}, \mathbf{R}_x^0, \mathbf{R}_n^0) | l'_x \rangle \langle s_x | s'_x \rangle + \langle l_x | l'_x \rangle \langle s_x | W_{x'}(\mathbf{R}, \mathbf{R}_n^0) | s'_x \rangle \langle i | f \rangle \approx \langle l_x | l'_x \rangle \langle s_x | W_{x'}(\mathbf{R}) | s'_x \rangle \langle i | f \rangle, \quad (7)$$

где  $\langle l_x | l'_x \rangle$  и  $\langle i | f \rangle$  — интегралы перекрытия электронных и фононных волновых функций начального и конечного положения соответственно. В этом приближении переход электрона обусловлен только перекрытием электронных волновых функций. Однако величины  $\langle s_x | s'_x \rangle$  и  $\langle s_x | W_{x'}(\mathbf{R}) | s'_x \rangle$  — величины одного порядка [16], а матричные элементы  $\langle l_x | V_{x'}(\mathbf{r}) | l'_x \rangle$  могут быть значительно больше, чем  $\langle l_x | l'_x \rangle$ . Поэтому целесообразно вычислять  $\langle x | \mathcal{H} - H_x | x' \rangle$  с учетом интегралов перекрытия  $\langle s_x | s'_x \rangle$ .

После ортогонализации волновых функций соседних положений ( $|\bar{x}\rangle$  — ортогонализированные функции) можно получить

$$\begin{aligned} \langle \bar{x} | \mathcal{H} - H_x | \bar{x}' \rangle &= \langle i | f \rangle \left[ \langle l_x | V_{x'}(\mathbf{r}) | l'_x \rangle \langle s_x | s'_x \rangle + \right. \\ &+ \left. \langle s_x | W_{x'}(\mathbf{R}) | s'_x \rangle \langle l_x | l'_x \rangle + \langle s_x | s'_x \rangle \langle l_x | l'_x \rangle \frac{\hbar}{2} (\omega_x - \omega_{x'}) \right] \equiv \\ &\equiv \langle i | f \rangle \left[ F_{xx'}^{ss'}(l, l') + M_{xx'}^{ss'}(l, l') + L_{xx'}^{ss'}(l, l') \frac{\hbar}{2} (\omega_x - \omega_{x'}) \right]. \end{aligned} \quad (7a)$$

Учитывая (7), проводя усреднение в (6) и вычисляя интегралы методами, изложенными, например, в [17], для вероятности перехода в единицу времени можно получить выражение

$$\begin{aligned} W_{xx'} &= \frac{\sqrt{\pi}}{\hbar^2 B} \left\{ \left[ F_{xx'}^{ss'}(l, l') + M_{xx'}^{ss'}(l, l') + \frac{3\hbar}{2} L_{xx'}^{ss'}(l, l') \frac{\alpha^2 C}{4B^4} \right]^2 + \right. \\ &+ \left. \frac{\hbar^2 B^2}{2} \left[ L_{xx'}^{ss'}(l, l') \right]^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{\pi \alpha^2}{4B^2} \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} B^2 &= \frac{1}{2} \sum_f \zeta_f^2 \omega_f^2 (2\bar{n}_f + 1), \quad \bar{n}_f = (\exp(\hbar \omega_f / k_B T) - 1)^{-1}, \\ \alpha &= \Omega - A, \quad A = \sum_f \zeta_f^2 \omega_f, \quad C = \frac{1}{6} \sum_f \zeta_f^2 \omega_f^3, \\ \hbar \Omega &= (U_x(\mathbf{R}_n^0) - U_{x'}(\mathbf{R}_n^0) + \hbar A) + (W_{ix}^I - W_{ix'}^I) + (\varepsilon_l - \varepsilon_{l'}). \end{aligned}$$

Это выражение получено при условии  $\omega_m^{-2} B^2 \gg 1$ , где  $\omega_m$  — максимальная частота колебательного спектра кристалла. В (8) величина  $U_x(\mathbf{R}_n^0) - U_{x'}(\mathbf{R}_n^0)$  определяет разность энергий основного состояния в соседних положениях, при этом для эквивалентных положений  $U_x(\mathbf{R}_n^0) - U_{x'}(\mathbf{R}_n^0) + \hbar A = 0$ , где  $\hbar A$  — поляронный или стоксов сдвиг, другими сло-

нами, энергия переноса деформации решеткой примеси при переходе  $x \rightarrow x'$ . Приведенное равенство справедливо, только если  $\varepsilon_l - \varepsilon_{l'} = 0$ . В противном случае  $U_x^0 - U_{x'}^0 + \hbar A \neq 0$  даже для трансляционно эквивалентных положений, поскольку они являются физически неэквивалентными.

При высоких температурах  $B^2 \approx \frac{k_B T}{\hbar} \sum_f \zeta_f^2 \omega_f = \frac{k_B T A}{\hbar}$  и энергия активации для подбарьерного перехода равна

$$E_a = \hbar a^2 / 4A. \quad (9)$$

### 3. Надбарьерные переходы и коэффициент диффузии

Для получения полной вероятности перехода из положения  $x$  в положение  $x'$  необходимо просуммировать (8) по состояниям примеси в положении  $x'$  и усреднить по колебательным состояниям примеси и по состояниям электронной подсистемы в начальном положении  $x$ . Если в начальном положении электрон делокализован в зоне проводимости и функция распределения электронов (которая может быть неравновесной) равна  $f(\mathbf{k})$ , то полная вероятность перехода в единицу времени (которая определяет коэффициент диффузии) имеет вид

$$w = \sum_{ss'} P(s) \int d^3k f(\mathbf{k}) w_{xx'}(\mathbf{k}), \quad (10)$$

где  $P(s)$  — функция распределения примесных атомов по колебательным состояниям. В данной работе мы будем предполагать, что  $P(s)$  — равновесная, бoльцмановская функция распределения. Отметим, что механизм, рассмотренный в работе [2], основан на изменении функции распределения при взаимодействии с электронной подсистемой.

Оценки показывают, что в сумме по  $s, s'$  при высоких температурах наибольший вклад дает член с  $s = s_m$  и  $s' = s'_m$ , где  $s_m$  и  $s'_m$  — ближайшие к вершине барьера уровни в положениях  $x$  и  $x'$ . Для такого перехода  $\hbar \Omega \approx \varepsilon_k - \varepsilon_0$  и  $\alpha = (\varepsilon_k - \varepsilon_0) / \hbar - A$ . Тогда

$$w = 4\pi \exp \left\{ - \frac{W_{s_m}^k}{k_B T} \right\} \int k^2 dk f(\mathbf{k}) w_{xx'}^m(\mathbf{k}), \quad (11)$$

где

$$w_{xx'}^m(\mathbf{k}) = \frac{\sqrt{\pi}}{\hbar^2 B} D^m(\mathbf{k}) \exp \left\{ - \frac{\hbar ((\varepsilon_k - \varepsilon_0) / \hbar - A)^2}{4Ak_B T} \right\},$$

$$D^m(\mathbf{k}) = (|F_{xx'}^m(\mathbf{k}) + M_{xx'}^m(\mathbf{k}) + \beta L_{xx'}^m(\mathbf{k})|^2 + \gamma |L_{xx'}^m(\mathbf{k})|^2)$$

с очевидными обозначениями для  $\beta, \gamma$  (ср. с (8)).

Если переход электрона происходит из предвзвешенно локализованного состояния (либо поляронного типа, либо из возбужденного состояния данного примесного центра), то  $w_{xx'}^m$  не зависит от  $k$  и проводить усреднение по  $k$  не требуется. В этом случае из (11) получаем окончательное выражение для  $w$

$$w = \frac{\sqrt{\pi}}{\hbar^2 B} D^m(l, l') \exp \left\{ - \frac{W_{l, l'}^k}{k_B T} - \frac{\hbar ((\varepsilon_l - \varepsilon_{l'}) / \hbar - A)^2}{4k_B T A} \right\}. \quad (12)$$

Выводы из этого выражения будут сделаны ниже.

Для вычисления интеграла в (11) требуются явные выражения для электронных матричных элементов  $F(k), M(k)$  и  $L(k)$ . Вычисляя эти матричные элементы на волновых функциях квазисвободного электрона и на водородоподобной функции связанного состояния, можно получить грубую оценку матричных элементов, в то время как более точные вычисления требуют подробных сведений об электронных состояниях кон-

кретного кристалла. Считая для оценок, что потенциал примеси представляет собой экранированный кулоновский потенциал, а также учитывая, что  $\epsilon_k = E_c + \hbar^2 k^2 / 2m^*$ , можно получить выражение для вероятности перехода, практически совпадающее с (12). Отличие состоит в замене  $\epsilon_l$  на  $\epsilon_c$ , хотя разность между этими величинами может быть малой по сравнению с  $W_{sm}$  и  $\hbar A$ . Таким образом, интегрирование по  $k$  в (11) не дает вклада в энергию активации.

Можно сравнить (12) с обычным выражением для энергии активации, полученным без учета электронного перехода (см., например, [18])

$$E_a = W_{sm} + \hbar A \quad (13)$$

причем выражение для  $E_a$  в (12) сводится к (13) при  $\epsilon_l - \epsilon_0 \rightarrow 0$ . Из такого сравнения следует, что электронный переход может стимулировать диффузионный переход, только если

$$\frac{(\epsilon_c - \epsilon_0 - \hbar A)^2}{4\hbar A} < \frac{\hbar A}{4} \quad \text{или} \quad \epsilon_c - \epsilon_0 < 2\hbar A. \quad (14)$$

При этом уменьшение энергии активации сравнимо с энергией электронного перехода, только если  $\epsilon_c - \epsilon_0 \approx \hbar A$ . Другими словами, глубина залегания электронного уровня должна быть сравнима с энергией переноса деформации решетки при диффузионном переходе («поляронной» энергией активации). В этом случае вся энергия электронного перехода затрачивается на компенсацию «поляронной» энергии активации, т. е. электронная энергия передается не одной выделенной «диффузионной» моде решетки, а всем модам, создающим деформацию решетки вокруг примеси. Поскольку электронный уровень лежит достаточно глубоко, то рекомбинационно-стимулированные переходы возможны только для примесей, создающих достаточно большие деформации кристаллической решетки и, следовательно, имеющих большую «поляронную» энергию активации миграции. В некотором смысле задача получается самосогласованной: глубокий уровень является сильно локализованным с сильными электрон-фононным взаимодействием, которое обуславливает большие деформации решетки вокруг примеси; это сильное взаимодействие является также условием (и причиной) безызлучательного перехода, энергия которого затрачивается на компенсацию больших деформаций при прыжке примеси в соседнее положение (напомним, что выражение (8) справедливо при больших  $A$  или высоких  $T$ ).

Интересно отметить, что влияние электрического поля или вообще неравновесной функции распределения в приближении горячих электронов скажется только на предэкспоненциальном множителе коэффициента диффузии, не затрагивая при этом энергию активации. Этот вывод противоположен выводу работ [4-6], где отмечается заметное влияние разогрева электронов на полную вероятность перехода.

В соответствии с результатами работы [5] коэффициент диффузии, стимулированный рекомбинацией электронов и дырок, можно представить в виде

$$D(1 + \gamma_n/\gamma_p)^{-1} g a^2 u, \quad (15)$$

где  $g$  — геометрический фактор, определяемый симметрией решетки [19];  $Q$  — длина диффузионного скачка;  $\gamma_n, \gamma_p$  — вероятности захвата электроном незаряженным атомом и дырки атомом со связанным электроном. Множитель в скобках определяет долю атомов с незанятым электронным состоянием и готовых совершить скачок. Этот множитель равен единице, если дырка мгновенно захватывается на дефект после скачка и если существует запрет на переход электрона в состояние со связанной дыркой (свободное от электрона). Если такого запрета нет, то необходимо, вообще говоря, проанализировать влияние электронного перехода на функцию распределения  $P(s)$  примесных атомов по колебательным состояниям в исходном междоузлии (т. е. механизм Вика, Тулли, Кимерлинга). Рассмотренный в данной работе механизм скорее всего имеет место именно

при наличии такого запрета, так что множитель в скобках (15) можно считать равным единице.

В заключение подведем некоторые итоги. Рассмотрен механизм рекомбинационно-стимулированной диффузии, состоящий в одновременном переходе примесного атома в соседнее положение и электрона на основной уровень дефекта. Показано, что электронный переход может стимулировать диффузионный переход примесных атомов, для которых поляронная энергия активации  $\epsilon_p = A\hbar/4$  составляет значительную долю полной энергии активации. При этом энергия электронного перехода не передается выделенной «диффузионной» моде решетки, а затрачивается на создание деформации решетки вокруг примеси, для чего в отсутствие электронного перехода требуется тепловая флуктуация. Условием уменьшения энергии активации диффузионного перехода является неравенство  $\epsilon_c - \epsilon_0 < 2\hbar A = 8\epsilon_p$ , которое, вероятно, может выполняться для примесей, имеющих глубокий уровень в запрещенной зоне. Рассмотренный механизм наиболее вероятен, когда существует запрет на переход электрона в основное состояние в начальном положении. Разогрев электронов в зоне проводимости не затрагивает энергию активации перехода, а только несколько изменяет предэкспоненциальный множитель. Предложенная теория справедлива при большом «поляронном» эффекте и при высоких температурах.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Lang D. V., Kimerling L. C. Phys. Rev. Lett., 1974, vol. 33, N 2, p. 489—493.
- [2] Weeks J. D., Tully J. C., Kimerling L. C. Phys. Rev. B, 1975, vol. 12, N 8, p. 3286—3295.
- [3] Kimerling L. C. Sol. St. El., 1978, vol. 21, N 4, p. 1391—1401.
- [4] Chaika G. E., Vinetskii V. L. Phys. St. Sol. (b), 1980, vol. 98, N 2, p. 727—735.
- [5] Винецкий В. Л., Чайка Г. Е. ФТТ, 1982, т. 24, № 7, с. 2170—2177.
- [6] Винецкий В. Л., Чайка Г. Е. ФТТ, 1986, т. 28, № 11, с. 3389—3395.
- [7] Шейнкман М. К. Письма в ЖЭТФ, 1983, т. 38, № 6, с. 278—280.
- [8] Елисеев П. Г., Завестовская И. Н., Полуэктов И. А. Квант. электр., 1978, т. 5, № 1, с. 203—206.
- [9] Bourgoin L. C., Corbett J. W. Phys. Lett., 1972, vol. 38A, N 1, p. 135—137.
- [10] Тележкин В. А., Толыго К. Б. Препринт ФТИ-82-53. Донецк, 1982. 37 с.
- [11] Defects in Insulating Crystals / Ed. V. M. Tuckevich, K. R. Shvarts. Riga: Zinatne, 1981. 773 p.
- [12] Flynn C. P., Stoneham A. M. Phys. Rev. B, 1970 vol. 1, N 8, p. 3966—3977.
- [13] Лубченко А. Ф., Павлович В. Н., Фищук И. И. ФММ, 1976, т. 42, № 6, с. 1127—1136.
- [14] Pavlovich V. N., Rudko V. N. Phys. St. Sol. (b), 1978, vol. 88, N 1, p. 407—415.
- [15] Боголюбов Н. Н. Избранные труды. Киев: Наукова думка, 1971, т. 2, с. 400.
- [16] Павлович В. Н. УФЖ, 1976, т. 21, № 12, с. 1985—1991.
- [17] Павлович В. Н. Препринт КИЯИ-75-31. Киев, 1975. 21 с.
- [18] Kagan Yu., Klinger M. I. J. Phys. C, 1974, vol. 1, N 9, p. 2791—2801.
- [19] Маннинг Дж. Кинетика диффузии атомов в кристаллах. М.: Мир, 1971. 277 с.

Институт ядерных исследований  
АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
28 августа 1987 г.  
В окончательной редакции  
26 апреля 1988 г.