

## ВЛИЯНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЦЕНТРОВ НА ЗАХВАТ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НЕЙТРАЛЬНЫМИ ПРИМЕСЯМИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Гольдгур Е. Б., Рабинович Р. И.

Рассматривается захват медленных электронов ( $ka_0 \ll 1$ ,  $k$  — волновой вектор,  $a_0$  — боровский радиус) нейтральным центром (НЦ), расположенным на расстоянии  $R \gg a_0$  от кулоновского центра. Потенциал НЦ моделируется потенциалом нулевого радиуса. Коэффициент захвата в кулоновском поле притяжения вычислен для «близких» ( $R \ll 2/k^2 a_0$ ) и «далеких» ( $R \gg 2/k^2 a_0$ ) НЦ.

Наличие кулоновского центра существенно увеличивает коэффициент захвата и изменяет его энергетическую зависимость на «близких» расстояниях.

Захват на НЦ, находящиеся вблизи отталкивающего кулоновского, оказывается пренебрежимо малым.

1. В работах [1-3] было показано, что в легированных полупроводниках с малой компенсацией при низких температурах

$$T \ll E_i = \hbar^2/2ma_i^2 \quad (1)$$

время жизни медленных электронов с волновым вектором  $k = \hbar^{-1} \sqrt{2m\varepsilon}$

$$ka_0 \ll 1 \quad (2)$$

определяется захватом на нейтральные центры (НЦ). При этом образуются  $D^-$ -центры [1]. В формулах (1), (2)  $E_i$  и  $a_i$  — энергия связи и длина спада волновой функции «лишнего» электрона на изолированном НЦ,  $\varepsilon$  — полная энергия электрона,  $a_0$  — эффективный боровский радиус. Для водородоподобных примесей  $E_i \approx 0.055 E_0$ ,  $a_i \approx 4.2 a_0$ , где  $E_0 = \hbar^2/2ma^2$  — эффективный Ридберг [1].

Захват на НЦ рассматривался в [3]. Предполагалось, что захват происходит в результате испускания одного акустического фонона, а НЦ являются изолированными, т. е. их концентрация  $N_0$  удовлетворяет условию

$$N_0 a_i^3 \ll 1. \quad (3)$$

Короткодействующий потенциал НЦ заменялся на  $\delta$ -образный [4].

В настоящей работе мы рассмотрим влияние заряженного кулоновского центра на захват медленных электронов на НЦ, находящийся на расстоянии

$$R \gg a_0 \quad (4)$$

от заряженного центра (рис. 1). Интерес к такой задаче стимулируется тем, что, как установлено в [5-7], в легированном кремнии с очень малой компенсацией ( $K < 10^{-3}$ ) в определенных диапазонах  $N_0$  и  $T$  реализуется непрямая рекомбинация на притягивающих центрах, первым актом которой является захват на НЦ, расположенный в окрестности притягивающего центра, с последующим прыжковым (по НЦ) приближением захваченного носителя к притягивающему центру. При этом время жизни свободного носителя оказывается на несколько порядков меньше времени жизни относительно каскадного захвата на притягивающие центры [8].

С другой стороны, в [9] было показано, что деформация волновой функции (ВФ) свободного электрона заряженным центром приводит к существенному изменению амплитуды рассеяния медленных электронов на НЦ, находящихся от заряженного на «близких»

$$R \ll R_k = 2/k^2 a, \quad (5)$$

расстояниях ( $R_k$  — классическая точка поворота в кулоновском поле [10]). Это должно значительно повлиять на сечение захвата на близкие НЦ и на величину времени жизни в условиях непрямого захвата.

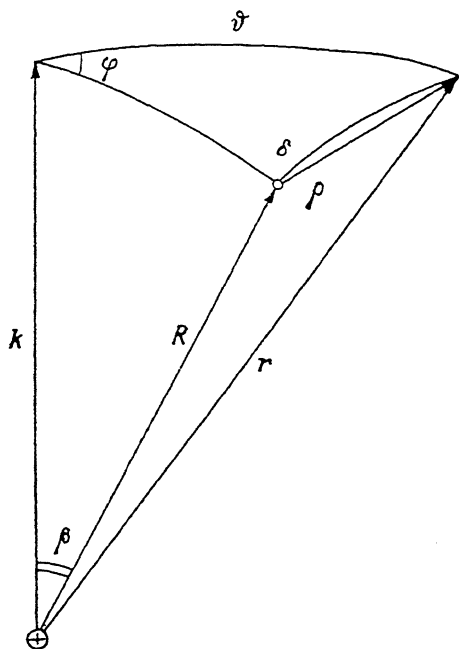


Рис. 1. Взаимное расположение центров

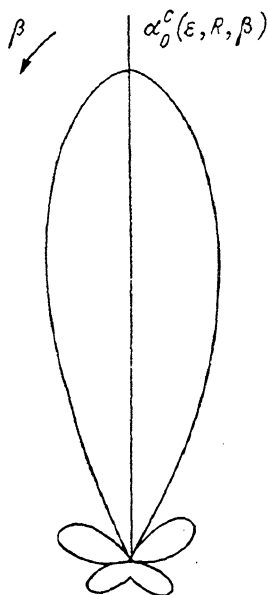


Рис. 2. Угловая зависимость  $\alpha_0^c(\epsilon, R, \beta)$ .  
 $R = 12.5 a_0$ .

Будет рассмотрен захват на близкие и дальние НЦ с

$$R \gg R_k. \quad (6)$$

2. Потенциал, как и в [3], будем моделировать потенциалом нулевого радиуса. Будем рассматривать захват электрона с энергией  $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$  с испусканием акустического фонона с энергией

$$\hbar \omega_q = \hbar s q = \epsilon + E_i(R), \quad (7)$$

где  $\omega_q$  — частота фонона,  $q$  — волновой вектор,  $s$  — скорость звука,  $E_i(R)$  — энергия связи электрона на  $\delta$ -центре, зависящая от расстояния между нейтральным и кулоновским центрами. Вдали от псевдопересечения термов, согласно [11],

$$E_i(R) = E_i \pm \frac{e^2}{\chi R} = E_i \pm \frac{2a_0}{R} E_0, \quad (8)$$

где  $\chi$  — диэлектрическая постоянная. Знак плюс отвечает полю притяжения, минус — полю отталкивания. Энергия связи (8) соответствует ВФ связанного состояния

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_i(R)}} \frac{e^{-\rho/a_i(R)}}{\rho} \xi(\mathbf{R}, \rho), \quad (9)$$

где  $\rho = r - R$ ,  $a_i(R) = \hbar(2mE_i(R))^{-1/2}$  [о функции  $\xi(\mathbf{R}, \rho)$  см. далее] ВФ состояния в зоне найдена в [6]:

$$\psi_k^\pm(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \varphi_k^\pm(\mathbf{r}) - \frac{2\pi\varphi_k^\pm(\mathbf{R})}{z + \Lambda_k(\mathbf{R})} G_k^\pm(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (10)$$

где  $x^{-1} = a_i(\infty)$ .  $\varphi_k^\pm$  — кулоновская ВФ непрерывного спектра,  $G_k^\pm(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  — кулоновская функция Грина [12]. Через  $\Lambda_k$  обозначена величина

$$\Lambda_k(\mathbf{R}) = -2\pi \frac{\partial}{\partial \varphi} (\rho G_k^\pm(\mathbf{R}, \mathbf{r})) \Big|_{\rho=0}. \quad (11)$$

Множитель перед  $G_k^\pm(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  есть амплитуда рассеяния  $f_{\delta k}^\pm(\mathbf{R})$  на  $\delta$ -центре, находящемся в кулоновском поле.

3. Найдем зависящий от угла  $\beta$  (рис. 1) коэффициент захвата  $\alpha_0^c(\varepsilon, R, \beta)$  электрона на НЦ, находящийся на расстоянии  $R$  от кулоновского. По определению,  $\alpha_0^c(\varepsilon, R, \beta) = VW$ , где  $V$  — нормировочный объем, а вероятность перехода  $W$  есть

$$W(\varepsilon, R, \beta) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Gamma}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} |M_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \varepsilon - E_i(R)). \quad (12)$$

В (12)  $M_{\mathbf{q}}$  — матричный элемент гамильтониана электрон-фононного взаимодействия между состояниями в зоне и на  $\delta$ -центре:

$$M_{\mathbf{q}} = iE_c \left( \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\Gamma ds^2} \right)^{1/2} \int d\mathbf{r} \psi_k^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{R}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_i(\mathbf{r}). \quad (13)$$

Здесь  $E_c$  — константа деформационного потенциала,  $d$  — плотность кристалла. При вычислении матричного элемента необходимо учесть, что произведение  $qa_i(R)$  составляет по крайней мере несколько единиц:

$$qa_i(R) = \left( \frac{E_i(R)}{2ms^2} \right)^{1/2} \left( 1 + \frac{\varepsilon}{E_i(R)} \right). \quad (14)$$

Из структуры интеграла (13) с учетом (9) видно, что основной вклад будут давать расстояния до НЦ  $\leq q^{-1}$ . Поэтому, а также в силу (4)  $\varphi_k^\pm(\mathbf{r})$  и  $G_k^\pm(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  можно разложить в ряд по степеням  $\rho/R$ ,  $a_0/R$  [разложению ВФ по степеням  $a_i/R$  соответствует разложение матричного элемента по степеням  $1/qa_i(R)$ ]. Окончательно выражение для  $\psi_k(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  при  $\rho \ll R$  имеет вид

$$\psi_k^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \varphi_k^\pm(\mathbf{R}) \left( 1 - \frac{1}{z + \Lambda_k(\mathbf{R})} \right). \quad (15)$$

ВФ связанного состояния легко записать с помощью кулоновской функции Грина, потребовав, чтобы логарифмическая производная при  $\rho \rightarrow 0$  равнялась  $(-x)$ . Таким образом может быть получена функция  $\xi(R, \rho)$  в (9). В нашем случае ( $\rho \ll R$ ) эта функция мало отличается от единицы. Для коэффициента захвата при наличии кулоновского поля получаем

$$\alpha_0^c(\varepsilon, \mathbf{R}) = A \frac{|\varphi_k^\pm(\mathbf{R})|^2}{|z + \Lambda_k(\mathbf{R})|^2} \frac{qa_i(R)}{a_i^2(R)} \left( 1 - 2 \frac{za_i(R) + 1}{\pi qa_i(R)} \right)^2, \quad (16)$$

где  $A = \pi^2 E_c^2 / \hbar ds^2$ . Из (16) может быть получено выражение для коэффициента захвата в отсутствие заряженного центра [3].<sup>1</sup> Для этого следует в (16) заменить  $\varphi_k^\pm(\mathbf{R})$  на плоскую волну, а кулоновскую функцию Грина — на свободную, что дает  $\Lambda_k = ik$ .

4. Найдем теперь вид  $\alpha_0(\varepsilon, R, \beta)$  в случае захвата на близкие центры. С учетом условий (2), (4), (5)  $|\varphi_k^\pm(\mathbf{R})|$  может быть записано в виде [10]

$$|\varphi_k^\pm(\mathbf{R})| = \left( \frac{2\pi}{ka_0} \right)^{1/2} J_0 \left( 2 \sqrt{\frac{R}{a_0}} (1 - \cos \beta) \right) \quad (17)$$

для кулоновского поля притяжения и

$$|\varphi_k^\pm(\mathbf{R})| = \left( \frac{2\pi}{ka_0} \right)^{1/2} J_0 \left( 2 \sqrt{\frac{R}{a_1}} (1 - \cos \beta) \right) e^{-\pi i / ka_0} \quad (18)$$

<sup>1</sup> В формуле (15) из [3] для  $\alpha_0(\varepsilon)$  имеется лишний множитель  $(1+x)$ .

для поля отталкивания ( $J_0$  — функция Бесселя).  $\Lambda_k(R)$  при выполнении условий (2), (4), (5) вычислено в [9]:

$$\Lambda_k(R) = \pm i (2/Ra_0)^{1/2}. \quad (19)$$

Плюс соответствует притяжению, минус — отталкиванию. Для поля притяжения получаем

$$\alpha_0^{\epsilon}(\epsilon, R, \beta) = \frac{2\pi}{k\pi} \frac{A}{z^2 + 2/Ra_0} \frac{qa_i}{a_i^2} \left(1 - \frac{2}{\pi} \frac{\alpha_i(R) + 1}{qa_i(R)}\right)^2 J_0 \left(2\sqrt{\frac{R}{a_0}} (1 - \cos \beta)\right). \quad (20)$$

В соответствующей формуле для поля отталкивания имеется дополнительный множитель  $\exp(-2\pi/k a_0) \ll 1$ .

Непосредственно видно, что коэффициент захвата сильно зависит от угла  $\beta$ . Максимальное значение  $\alpha_0^{\epsilon}(\epsilon, R, \beta)$  принимает при малых  $\beta$ ,  $\beta < (a_0/8R)^{1/2}$ , когда функция Бесселя близка к единице. С изменением  $\beta$  при постоянном  $R$  значение  $\alpha_0^{\epsilon}(\epsilon, R, \beta)$  осциллирует и при некоторых углах обращается в нуль. Угловая зависимость  $\alpha_0^{\epsilon}(\epsilon, R, \beta)$  приведена на рис. 2 ( $R=12.5a_0$ ).

Остановимся на различиях в коэффициенте захвата, обусловленных знаком заряда кулоновского центра. Прежде всего, согласно [9], в поле отталкивающего центра связанное состояние существует лишь при  $R > (2E_0/E_i)a_0$ . При этом коэффициент захвата в случае поля отталкивания меньше, чем в случае поля притяжения в  $\exp(2\pi/ka_0)$  раз, т. е. при выполнении (2) захват электронов на НЦ, находящиеся вблизи отрицательных центров, пренебрежимо мал.

4. Найдем усредненный по углам  $\beta$  коэффициент захвата на НЦ, находящийся вблизи притягивающего кулоновского центра, считая все углы равновероятными. Усредняя квадрат функции Бесселя, получаем

$$\alpha_0^{\epsilon}(\epsilon, R) = 2A \frac{ms}{\hbar} \frac{(2/Ra_0)^{1/2}}{z^2 + 2/Ra_0} \beta^{-2}(R) \frac{1+x(R)}{x^{1/2}(R)} \times \left\{1 - \frac{2}{\pi} \beta(R) [1 + E_i^{1/2}/E_i^{1/2}(R)] [1+x(R)]^{-1}\right\}^2, \quad (21)$$

где через  $x(R)$  обозначено отношение  $\epsilon/E_i(R)$ , а

$$\beta(R) = |E_i(R)/2ms^2|^{-1/2}. \quad (22)$$

Обсудим далее захват электронов с энергией  $\epsilon < E_i$ . Коэффициент захвата на изолированный центр, согласно [3] (с учетом примечания на с. 1676), есть

$$\alpha_0(\epsilon) = A\beta^{-1}(\infty) \left[1 - \frac{4}{\pi} \frac{\beta(\infty)}{1+x(\infty)}\right]^2. \quad (23)$$

Полагая квадратные скобки в (21) и (23) примерно одинаковыми и  $x(R) \sim x(\infty) < 1$ , получим из (21) и (23) приближенно

$$\frac{\alpha_0^{\epsilon}(\epsilon, R)}{\alpha_0(\epsilon)} \sim (k^2 Ra_0)^{-1/2} \left(\frac{E_i(R)}{E_i}\right)^{1/2} > 1. \quad (24)$$

Таким образом, на близких расстояниях (5) коэффициент захвата электронов с энергиями  $\epsilon < E_i$  возрастает.

На рис. 3 представлены зависимости  $\alpha_0^{\epsilon}$  от  $\epsilon$  и  $R$  в области  $R < 2/k^2 a_0$ . Для сравнения приведена зависимость  $\alpha_0(\epsilon)$ .

Для далеких и нейтральных центров (6) можно пренебречь влиянием кулоновского центра на ВФ электронов с  $\epsilon > 0$ . Тогда для коэффициента захвата можно воспользоваться формулой (23), в которой энергию  $E_i$  следует считать зависящей от  $R$ , т. е. заменить  $\beta(\infty)$  на  $\beta(R)$  и  $x(\infty)$  на  $x(R)$ . Легко показать, что коэффициент захвата на далекие центры не отличаются существенно от  $\alpha_0(\epsilon)$ .

6. Обсудим влияние деформации волновой функции свободного носителя притягивающим центром (ПЦ) на непрямую рекомбинацию в  $p$ -Si [5, 7], первый акт которой представляет собой захват дырки на ПЦ, расположенный вблизи ПЦ на сфере радиуса  $R_{эфф}$ . Для  $p$ -Si имеем  $E_0=45$  мэВ,  $a_0=23 \text{ \AA}$ ,  $E_i=2$  мэВ. Будем ориентироваться на образец с  $N_0=N_A=10^{16} \text{ см}^{-3}$  и концентрацией притягивающих центров  $N_D=6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ , для которого в [7] была сделана оценка времени жизни при  $T=10 \text{ К}$ .

Очевидно, что деформация волновой функции может проявиться только в случае, если  $R_k > R_{эфф}$ . С другой стороны, для того чтобы можно было пренебречь влиянием нескольких ПЦ одновременно, необходимо, чтобы среднее расстояние между ними  $R_D$  было больше  $R_k$ . Для указанных выше условий  $R_D \approx 3 \cdot 10^{-5}$ ,  $R_k \approx 2 \cdot 10^{-5}$  и  $R_{эфф} = 3 \cdot 10^{-6}$  см. Таким образом, влияние должно иметь место ( $R_k > R_{эфф}$ ), и его можно рассматривать в «одноцентровом» приближении ( $R_D > R_k$ ).

Различие между  $\alpha_0^{\epsilon}$  ( $\epsilon$ ,  $R$ ) и  $\alpha_0$  ( $\epsilon$ ) может повлиять на непрямую рекомбинацию двояко. Прежде всего увеличивается вероятность захвата на ПЦ, расположенный в сфере радиуса  $R_{эфф}$ . Помимо этого могут измениться и само  $R_{эфф}$ , и, следовательно, число центров в сфере захвата.

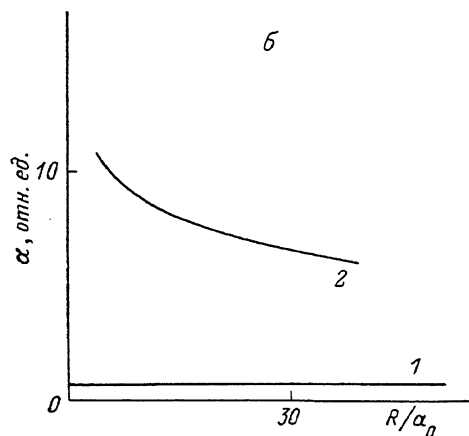
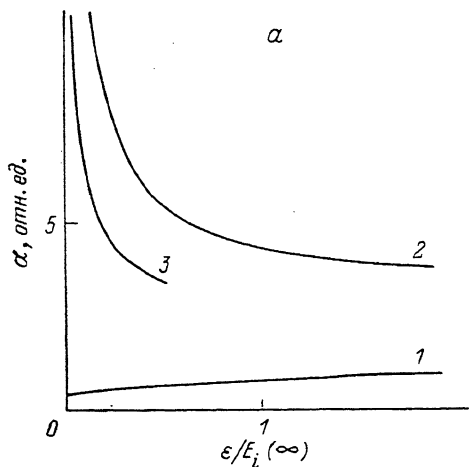


Рис. 3. Зависимость  $\alpha_0^{\epsilon}$  от  $\epsilon$  (а) и  $R$  (б).  
а, б) 1 —  $\alpha_0$ , 2 —  $\alpha_0^{\epsilon}$ ; а) 2 —  $R = 4a_0$ , 3 —  $R = 36a_0$ ;  
б)  $\epsilon = 0.1 E_i(\infty)$ .

Легко показать, что в нашем примере последнее не должно иметь места. Меняется только вероятность захвата на ПЦ. В результате коэффициент непрямого захвата увеличивается в  $\alpha_0^{\epsilon}(T, R_{эфф})/\alpha_0(T) \approx 4$  раза. [Использована формула (24)]. Этот множитель несколько сближает оценку времени жизни и его измеренное значение, приведенные в [7]. Однако каких-либо определенных выводов из этого сделать нельзя, поскольку оценка в [7] была слишком грубой. Для проверки настоящей теории нужны специальные эксперименты.

#### Список литературы

- [1] Гершензон Е. М., Мельников А. П., Рабинович Р. И., Серебрякова Н. А. // УФН. 1980. Т. 132. В. 2. С. 359—378.
- [2] Гершензон Е. М., Мельников А. П., Рабинович Р. И., Смирнова В. Б. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 3. С. 499—502.
- [3] Гольдгур Е. В., Рабинович Р. И. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. В. 3. С. 1109—1118.
- [4] Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975.
- [5] Ворожцова Л. А., Гершензон Е. М., Гурвич Ю. А., Исмагилова Ф. М., Мельников А. П., Рабинович Р. И. // Письма ЖЭТФ. 1986. Т. 43. В. 10. С. 480—482.
- [6] Ворожцова Л. А., Гершензон Е. М., Гурвич Ю. А., Исмагилова Ф. М., Литвак-Горская Л. Б., Мельников А. П. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. В. 4. С. 1419—1430.
- [7] Ворожцова Л. А., Гершензон Е. М., Гурвич Ю. А., Исмагилова Ф. М., Мельников А. П. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. В. 1. В. 2. С. 350—363.

- [8] Абакумов В. Н., Перель В. И., Ясневич И. Н. // ФТП. Т. 12. В. 1. С. 3—32.  
[9] Рабинович Р. И. // ЖЭТФ. 1986. Т. 88. В. 5. С. 1718—1728.  
[10] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., 1974.  
[11] Preshnyakov L. P. // Phys. Rev. 1970. V. 2. P. 1720.  
[12] Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., 1971.

Московский  
государственный педагогический институт  
им. В. И. Ленина

Получена 23.01.1989  
Принята к печати 19.05.1989