

# Релаксация возбужденных состояний доноров в кремнии с излучением междолинных фононов

© В.В. Цыпленков<sup>¶</sup>, Е.В. Демидов, К.А. Ковалевский, В.Н. Шагин

Институт физики микроструктур Российской академии наук,  
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 7 ноября 2007 г. Принята к печати 21 декабря 2007 г.)

Анализируется процесс низкотемпературной релаксации возбужденных состояний доноров V группы в Si, обусловленный взаимодействием связанных кулоновским центром электронов с междолинными фононами. Вычислена скорость перехода из состояния  $2p_0$  в группу состояний  $1s(E, T_2)$  при излучении междолинных акустических LA-g- и TA-f-фононов для доноров фосфора, сурьмы, мышьяка и висмута. Показано, что TA-f-фононы вносят существенный вклад в безызлучательный распад состояния  $2p_0$ , которое определяет стимулированное инфракрасное излучение доноров фосфора и сурьмы в кремнии.

PACS: 81.05.Cy, 63.20.Mt, 78.30.Am

## 1. Введение

Мелкие примесные центры в полупроводниках представляют интерес с точки зрения создания новых источников стимулированного излучения в дальнем инфракрасном диапазоне длин волн ( $\lambda = 30\text{--}300\text{ мкм}$ ). При этом особый интерес вызывает кремний, что во многом объясняется малым коэффициентом поглощения инфракрасного (ИК) излучения решеткой кристалла. К настоящему времени показано, что стимулированное излучение оптически возбуждаемых доноров V группы (Bi, P, As, Sb) развивается на внутрицентровых переходах при низких температурах решетки ( $T < 30\text{ К}$ ) и лежит в диапазоне длин волн  $\lambda = 45\text{--}230\text{ мкм}$  [1–4]. Получено большое число экспериментальных данных относительно спектральных, временных и других характеристик такого рода эффектов излучения и для дальнейшего развития этого направления необходима их теоретическая проработка. Особенно важным является анализ процесса релаксации электронных состояний доноров, сопровождаемых возбуждением различных колебаний решетки кристалла. При этом для доноров в кремнии существенную и во многом определяющую роль из-за многодолинной структуры зоны проводимости играют междолинные процессы электрон-фононного взаимодействия, которые к тому же зависят от химической природы элемента легирования. Энергия основного состояния для различных доноров отличается достаточно сильно (42–71 мэВ), и в процесс релаксации связанных состояний электронов по этой причине могут вовлекаться различные типы междолинных фононов. Так, безызлучательный распад состояния  $2p_0$  контролируется испусканием междолинных акустических продольных LA-g- и поперечных TA-f-фононов для доноров фосфора и сурьмы, для мышьяка существенным является также процесс излучения LA-f-фонона, а для висмута — поперечного оптического TO-f-фонона. Распад  $2p_{\pm}$  и  $2s$ -состояний доноров мышьяка и висмута определяется излучением продольного

оптического LO-g-, а также LA-f- и TO-f-фононов. В то же самое время состояния  $1s(T_2, E)$  для фосфора и сурьмы распадаются с излучением TA-g-фононов, а для мышьяка, по-видимому, это происходит при излучении LA-g- и TA-f-фононов.

Заметим, что состояния  $2p_0$ ,  $2p_{\pm}$  и  $1s(E, T_2)$  являются уровнями рабочего перехода при стимулированном излучении света перечисленными донорами, и поэтому их исследование вызывает особый интерес.

Определяющая роль междолинных процессов электрон-фононного взаимодействия в релаксации перечисленных состояний особенно хорошо проявляется при стимулированном излучении доноров в одноосно-деформированном кремнии. Под воздействием такой деформации происходит сдвиг по энергии минимумов зоны проводимости (долин) кремния и спектр энергий примесных состояний изменяется [5]. Последнее сильно меняет взаимодействие доноров с междолинными фононами и проявляется на таких характеристиках лазерной среды, как спектральный состав, интенсивность стимулированного излучения, порог накачки и т. д. [6,7].

## 2. Теоретическая модель

### 2.1. Волновые функции состояний мелких доноров

Задача о мелком примесном центре, который создается ионом примеси, замещающим один из атомов решетки, подробно исследовалась в рамках метода эффективных масс [8]. Для аналитического определения волновых функций и энергии  $E$  мелкого примесного центра в методе эффективной массы решается уравнение Шредингера, в котором потенциал, создаваемый ионом примеси, считается обычным кулоновским. При этом гамильтониан, описывающий состояния донора, имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{e^2}{\epsilon r}. \quad (1)$$

Здесь  $m_{\parallel} = 0.92m_0$  и  $m_{\perp} = 0.19m_0$  — продольная и поперечная эффективные массы электрона в кремнии,

<sup>¶</sup> E-mail: Tsyplenkov1@yandex.ru

$m_0$  — масса свободного электрона [9],  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость кремния. Согласно методу эффективных масс, в многодолинных полупроводниках волновая функция связанного состояния кулоновского центра является линейной комбинацией волновых функций состояний различных долин, имеющих соответствующую энергию  $E$ , и представляется в виде [8]

$$\Psi_n = \sum_l \alpha_l F_n^l(\mathbf{r}) \varphi_l(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (2)$$

Здесь  $\varphi_l(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  — блоховская волновая функция на дне зоны проводимости  $l$ -й долины, а  $F_n^l(\mathbf{r})$  — огибающая волновой функции донорного состояния  $n$ -го уровня  $l$ -й долины. Коэффициенты  $\alpha_l$  определяют распределение волновой функции по всем шести долинам зоны проводимости кремния в соответствии с симметрией точечной группы тетраэдра  $T_d$ . Для рассматриваемых в данной работе состояний  $1s$  и  $2p_0$  коэффициенты  $\alpha_l$  имеют следующие значения [5]:

$$\begin{aligned} (A_1)(\text{синглет}) & \quad \frac{1}{\sqrt{6}} (1, 1, 1, 1, 1, 1), \\ (E)(\text{дублет}) & \quad \begin{cases} \frac{1}{2} (1, 1, -1, -1, 0, 0), \\ \frac{1}{\sqrt{12}} (1, 1, 1, 1, -2, -2), \end{cases} \\ (T_2)(\text{триплет}) & \quad \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -1, 0, 0, 0, 0), \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (0, 0, 1, -1, 0, 0), \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (0, 0, 0, 0, 1, -1). \end{cases} \end{aligned} \quad (3)$$

В уравнении Шредингера с гамильтонианом (1), определяющем огибающие волновых функций  $F_n^l(\mathbf{r})$ , переменные в общем случае ( $m_{\parallel} \neq m_{\perp}$ ) не разделяются. Поэтому для решения уравнения Шредингера в [8] применялся прямой вариационный метод с пробными волновыми функциями, которые для состояний  $2p_0$  и  $1s$   $l$ -й долины имеют вид

$$\begin{aligned} F_{1s}^l(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_1^2 b_1}} \exp \left\{ -\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a_1^2} + \frac{x_l^2}{b_1^2}} \right\}, \\ F_{2p_0}^l(\mathbf{r}) &= \frac{x_l}{\sqrt{2\pi a_2^2 b_2^3}} \exp \left\{ -\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a_2^2} + \frac{x_l^2}{b_2^2}} \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Ось  $x_l$  сонаправлена с осью  $l$ -й долины. Варьируемые параметры  $a$  и  $b$  находятся минимизацией энергии состояний из гамильтониана (1). Заметим, что вариационный подход для  $m_{\parallel} = m_{\perp}$  дает точное решение и для реальных значений масс хорошо согласуется с численным подходом в решении уравнения Шредингера [8]. Максимальное расхождение между ними при определении энергий состояний не превышает 8%. Однако, как известно, выражение (1) является не точным, так как не учитывает короткодействующий потенциал,

который зависит от химической природы примесного центра. Без соответствующих поправок гамильтониан (1) приводит к шестикратному вырождению основного состояния  $1s$  с энергией 31.27 мэВ. Реально же это состояние расщеплено на синглет  $1s(A_1)$ , дублет  $1s(E)$  и триплет  $1s(T_2)$  [8], их энергии заметно отличаются от значения, приведенного выше. Если для состояний  $1s(E)$  и  $1s(T_2)$  расхождение не превышает 8%, то для основного состояния  $1s(A_1)$  оно может превышать все 100%. Например, энергия связи состояния  $1s(A_1)$  для донора фосфора составляет 45.2 мэВ, а для висмута — 70.98 мэВ. Другой не решенной проблемой, связанной с короткодействующим потенциалом, является определение волновых функций четных состояний и в частности, что наиболее для нас важно, состояний  $1s$ .

Для преодоления обозначенных трудностей при расчете темпов междолинных переходов при излучении фононов мы предлагаем использовать упрощенный подход. Будем исходить из того, что величина матричного элемента безызлучательного перехода преимущественно определяется параметром локализации волновых функций участвующих состояний, а другие детали их устройства сказываются не столь сильно. Тогда волновые функции состояний  $1s$  можно оставить в формуле (4), как предложено в работе [8], а соответствующие параметры локализации  $a$  и  $b$  определить, используя единственно известный точно параметр — это энергия состояний. Связь между энергией состояния и параметрами  $a$  и  $b$  получается при рассмотрении асимптотического поведения волновой функции на больших расстояниях от примесного иона [10]. Необходимо, чтобы асимптотическое поведение волновой функции вдали от кулоновского центра соответствовало асимптотике, вычисленной в квазиклассическом приближении.

Согласно [10], асимптотика представляет собой экспоненциально спадающую функцию:

$$F(\mathbf{r}) = e^{-q(\mathbf{n})r}, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} q(\mathbf{n}) &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_{\perp}|E|(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2/\gamma)}, \\ \gamma &= m_{\perp}/m_{\parallel}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{r}/r. \end{aligned}$$

Подчеркнем, что методика определения асимптотического поведения волновой функции в квазиклассическом приближении не опирается на конкретный вид потенциала донорного центра, так как данная асимптотика отражает поведение волновой функции глубоко под энергетическим барьером, созданным ионом примеси, и определяется лишь энергией состояния.

Приравнивая показатель экспоненты асимптотики (5) к показателю экспоненты волновой функции состояния  $1s$  (4), легко получить следующие выражения для параметров  $a$  и  $b$ :

$$a^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}E}, \quad b^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}E}. \quad (6)$$

Численные значения этих параметров отличаются от значений, получаемых вариационным методом. На-

пример, для значения энергии основного состояния  $E = 31.27$  мэВ, которое дает метод эффективных масс, по формулам (6) параметры  $a$  и  $b$  имеют значения:  $a = 4.67a_0$ ,  $b = 2.13a_0$ , а в рамках вариационного метода  $a = 4.58a_0$ ,  $b = 2.57a_0$ , где  $a_0$  — постоянная решетки кремния.

Предложенная процедура построения волновых функций  $1s$ -состояний позволяет легко учесть поправки, связанные с особенностью короткодействующего потенциала того или иного донора, опираясь на экспериментальные значения энергий состояний. Указанный подход полезен, в частности, при анализе влияния одноосной деформации кристалла кремния на релаксацию различных состояний доноров.

## 2.2. Взаимодействие с междолинными фононами

Вероятность перехода электрона проводимости между различными долинами в предположении, что междолинные константы деформационного потенциала  $D_{rk}$  не зависят от волнового вектора фонона (нулевой порядок), дается формулой [11]

$$P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{\pi(D_{rk})^2}{\rho V \omega_q} \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}) - \hbar\omega_q), \quad (7)$$

где  $E(\mathbf{k}')$  и  $E(\mathbf{k})$  — энергии конечного и начального состояний электрона,  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  — начальный и конечный импульс,  $\omega_q$  — частота излучаемого (поглощаемого) фонона,  $\rho$  — плотность материала,  $V$  — его объем,  $D_{rk}$  — междолинная константа деформационного потенциала. Для ТА- $f$ -фононов в Si  $D_{rk} = 0.3 \cdot 10^8$  эВ/см, для LA- $g$  —  $0.8 \cdot 10^8$  эВ/см [11].

Пользуясь предположением о том, что огибающие  $F_n^l(\mathbf{r})$  достаточно плавные и почти не изменяются на масштабах элементарной ячейки, матричный элемент перехода между примесными состояниями при взаимодействии с фононами можно выразить через матричный элемент перехода между состояниями электрона проводимости [12]:

$$M_{nm}^{lj} = M_0^{lj} \int F_n^{l*}(\mathbf{r}) F_m^j(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{g}-\mathbf{q})\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (8)$$

Здесь  $M_0$  — матричный элемент перехода между состояниями электрона проводимости, описываемыми блоховскими функциями,  $n$  и  $m$  обозначают номера уровней состояний донора, а  $l, j$  — номера долин, между которыми происходит переход,  $\mathbf{g}$  — вектор обратной решетки. Рассматривая формулу (7) как „Золотое правило Ферми“, можно получить выражение для  $M_0^{lj}$  через константу  $D_{rk}$ . Тогда матричный элемент перехода имеет вид

$$M_{nm}^{lj} = \sqrt{\frac{\hbar(D_{rk})^2}{2\rho V \omega_q}} \int F_n^{l*}(\mathbf{r}) F_m^j(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{g}-\mathbf{q})\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (9)$$

Таблица 1. Коэффициенты междолинных переходов  $K_f$  и  $K_g$

	$K_g$ ( $g$ -переходы)			$K_f$ ( $f$ -переходы)		
	$A_1$	$E$	$T_2$	$A_1$	$E$	$T_2$
2	1					
$A_1$	1/6	1/6	1/6	4/3	1/3	2/3
$E$	1/3	1/3	1/3	2/3	5/3	4/3
$T_2$	1/2	1/2	1/2	2	2	2

Примечание. Цифрой „1“ (во 2-й строке) обозначены верхние уровни переходов, цифрой „2“ (1-я колонка) — нижние уровни.

а вероятность перехода, согласно „Золотому правилу Ферми“, составляет

$$P_{nm}^{lj} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |M_{nm}^{lj}|^2 \delta(\epsilon_{nm} - \hbar\omega_q), \quad (10)$$

где  $\epsilon_{nm}$  — энергия перехода между уровнями  $n$  и  $m$ . Если учесть, что волновые функции примесных состояний имеют вид (2) и

$$\Psi_n = \sum_l \alpha_l F_n^l(\mathbf{r}) \varphi_l(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

— волновая функция начального, а

$$\Psi_m = \sum_l \beta_l F_m^l(\mathbf{r}) \varphi_l(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

— волновая функция конечного состояний, то для  $f$ - и  $g$ -процессов суммарную вероятность перехода  $P_{nm}$  можно записать как

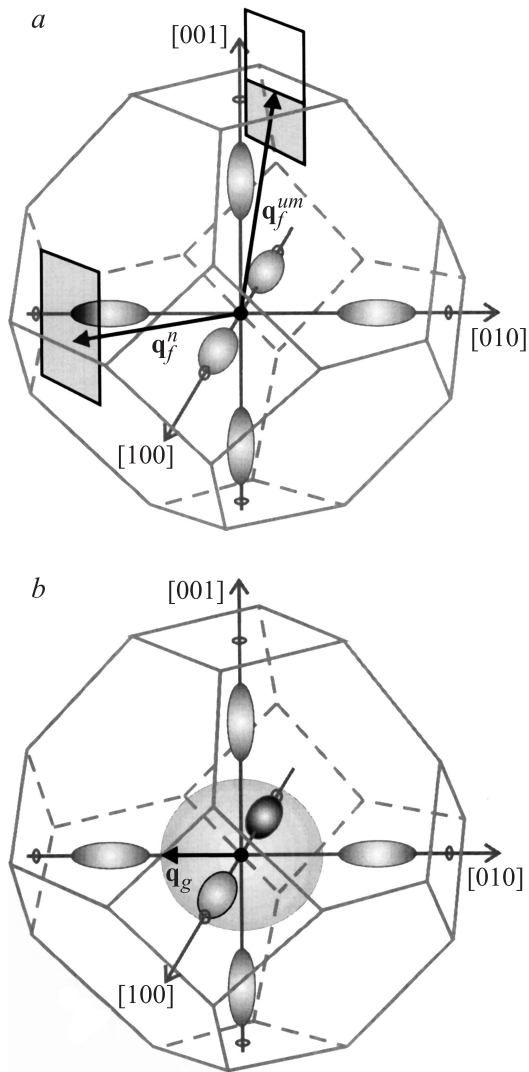
$$P_{nm} = K_t P_{nm}^{lj}, \quad (11)$$

где коэффициент  $K_t$  ( $t = f, g$ ) зависит как от симметрии распределения волновых функций по долинам, так и от типа перехода. Легко показать, что для переходов  $f$  и  $g$  эти коэффициенты имеют вид:

$$\begin{aligned} K_f = & (\alpha_3\beta_3 + \alpha_6\beta_4)^2 + (\alpha_5\beta_3 + \alpha_4\beta_6)^2 + (\alpha_3\beta_6 + \alpha_5\beta_4)^2 \\ & + (\alpha_6\beta_3 + \alpha_4\beta_5)^2 + (\alpha_1\beta_3 + \alpha_4\beta_2)^2 + (\alpha_3\beta_1 + \alpha_2\beta_4)^2 \\ & + (\alpha_1\beta_4 + \alpha_3\beta_2)^2 + (\alpha_4\beta_1 + \alpha_2\beta_3)^2 + (\alpha_1\beta_5 + \alpha_6\beta_2)^2 \\ & + (\alpha_5\beta_1 + \alpha_2\beta_6)^2 + (\alpha_1\beta_6 + \alpha_5\beta_2)^2 + (\alpha_6\beta_1 + \alpha_2\beta_5)^2, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} K_g = & (\alpha_1\beta_2)^2 + (\alpha_2\beta_1)^2 + (\alpha_3\beta_4)^2 + (\alpha_4\beta_3)^2 \\ & + (\alpha_5\beta_6)^2 + (\alpha_6\beta_5)^2. \end{aligned}$$

Здесь  $\alpha_l$  и  $\beta_j$  — коэффициенты, определяющие симметрию распределения верхнего и нижнего состояний по долинам соответственно (см.(3)). Численные значения симметричных коэффициентов  $K_f$  и  $K_g$  междолинных переходов даны в табл. 1.



**Рис. 1.** *a* — зона Бриллюэна и положения долин зоны проводимости кремния;  $\mathbf{q}_f^n$  и  $\mathbf{q}_f^{um}$  — волновые вектора междолинного  $f$ -фонона в случае нормального процесса и процесса с переброном. Плоскости на рисунке показывают локальную аппроксимацию изоэнергетических поверхностей фононов, соответствующих  $f$ -переходам. *b* — сфера в центре зоны Бриллюэна — изоэнергетическая поверхность фононов с энергией  $g$ -фонона;  $\mathbf{q}_g$  — волновой вектор  $g$ -фонона.

Междолинные переходы типа  $f$  и  $g$  обычно относят к процессам переброма, т. е. рассеянию с участием вектора обратной решетки. Однако отметим, что междолинный переход между состояниями доноров может происходить и без участия вектора обратной решетки, вследствие размытости волновых функций этих состояний в импульсном пространстве. В этом случае вклад в матричный элемент дают лишь „хвосты“ волновых функций в  $k$ -пространстве и соответствующие вероятности переходов малы.

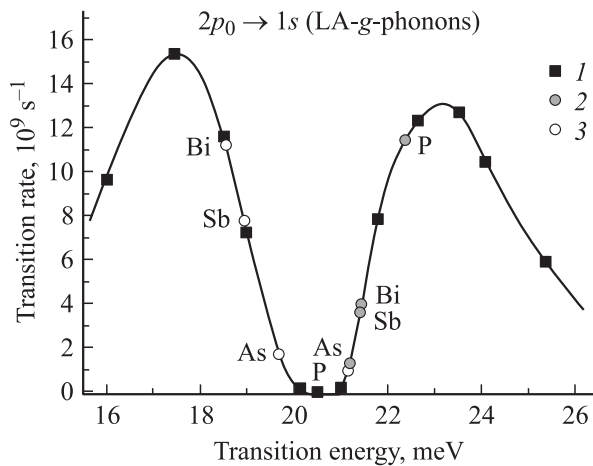
Матричный элемент (9) зависит от вида изоэнергетической поверхности фононов, по которой производится интегрирование. Волновой вектор  $f$ -фонона в случае

процесса переброма лежит на самой границе зоны Бриллюэна в направлении, близком кристаллографическому направлению  $\langle 100 \rangle$ , которое соответствует направлению ориентации долин. Очевидно, что на границе закон дисперсии фононов нельзя считать изотропным. Но из соображений симметрии можно заключить, что изоэнергетическая поверхность подходит ортогонально к рассматриваемой границе зоны Бриллюэна. А так как локализация донорных состояний мала по сравнению с периодом обратной решетки, то на таких масштабах данную изоэнергетическую поверхность фононов можно считать плоскостью, подходящей перпендикулярно к границам зоны Бриллюэна в направлениях ориентации долин (рис. 1, *a*). Для сравнения, когда междолинный переход с участием  $f$ -фонона происходит без переброма, волновой вектор фонона лежит в направлении  $\langle 110 \rangle$ , а изоэнергетическая поверхность аппроксимируется тоже плоскостью, но ортогональной волновому вектору  $f$ -фонона, т. е. направлению  $\langle 110 \rangle$  (рис. 1, *a*). Волновой вектор фононов, соответствующий  $g$ -переходам, расположен в направлении  $\langle 100 \rangle$  и имеет длину, равную примерно третьей части расстояния от центра зоны Бриллюэна до ее края, и в этой области закон дисперсии фононов можно считать изотропным, а изоэнергетические поверхности сферами (рис. 1, *b*).

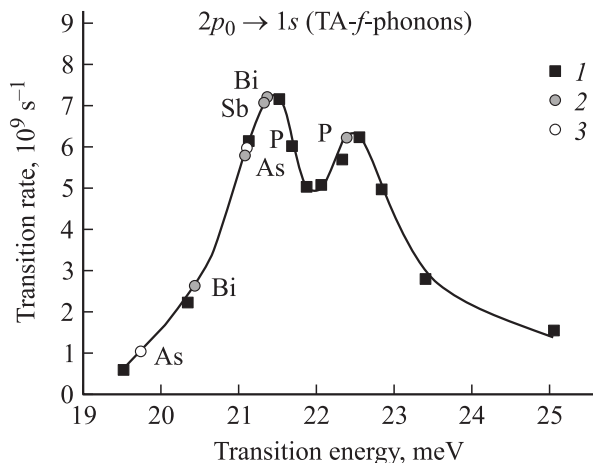
### 3. Релаксация состояния $2p_0$ на переходе в отщепленную группу состояний $1s(E, T_2)$

Энергии перехода из состояния  $2p_0$  в состояния  $1s(E)$  и  $1s(T_2)$  для доноров фосфора, висмута, мышьяка и сурьмы разнятся в диапазоне 19.6–22.41 мэВ. Но в случае междолинных процессов даже такое не очень существенное отличие энергий переходов в разных примесях приводит к достаточно сильным отличиям темпов переходов между этими состояниями. Поэтому имеет смысл произвести расчет зависимости скорости перехода между рассматриваемыми состояниями от величины энергетического зазора между ними.

Расчет проводился численно на основе методики, описанной выше. Значения констант  $D_{ik}$  взяты из работы [11], где они выбирались исходя из сопоставления численных расчетов и результатов измерений транспортных характеристик электронного кремния. Далее, мы предполагали, что положение минимумов зоны проводимости кремния, которые определяют длину волнового вектора и энергию междолинного фонона, равно  $k_0 = 0.835 2\pi/a_0$ . Отметим, что положение долин не известно точно, а литературные данные на этот счет разнятся в диапазоне  $(0.83-0.85)2\pi/a_0$ . Мы использовали значение  $k_0$ , указанное в [13], поскольку вычисленные времена жизни состояний с выбранным значением положения долин наилучшим образом согласуются с данными измерений [14].



**Рис. 2.** Темп перехода  $2p_0 \rightarrow 1s$  при взаимодействии с LA-g-фононами в приближении однодолинных волновых функций, т. е. без учета распределения волновых функций верхнего и нижнего состояния по долинам кремния. Точками 1 на графике показаны расчетные значения, которые соединены интерполяционной сплошной линией. 2, 3 — значения, соответствующие реальным переходам в донорах P, Bi, As и Sb. Точки 2 соответствуют переходам из состояния  $2p_0$  в состояния  $1s(T_2)$ , 3 — из  $2p_0$  в  $1s(E)$ .



**Рис. 3.** Темп перехода  $2p_0 \rightarrow 1s$  при взаимодействии с TA-f-фононами. Обозначения на графике такие же, как на рис. 2.

Энергии переходов  $2p_0 \rightarrow 1s(E)$  и  $2p_0 \rightarrow 1s(T_2)$  для всех мелких доноров имеют значения, близкие к 21 мэВ. Это обуславливает то, что  $f$ -переходы происходят с участием фононов, принадлежащих верхней ветке ТА фононной дисперсионной характеристики в направлении  $\langle 110 \rangle$ , а  $g$ -переходы — с участием фононов, лежащих на LA-ветви фононного спектра в направлении  $\langle 100 \rangle$ . Дисперсионные характеристики фононов взяты из работ [15–17].

Результаты расчета (10) для переходов с излучением LA-g-фононов приведены на рис. 2, а для переходов

с излучением TA-f-фононов на рис. 3. По оси ординат на этих графиках отложен темп междолинного перехода  $P_{nm}^{lj}(E)$ , не учитывающий распределения состояний по долинам. Как уже было сказано выше, чтобы получить истинную вероятность перехода, нужно вероятность  $P_{nm}^{lj}(E)$ , взятую из графика, умножить на соответствующий коэффициент  $K_f$  для  $f$ -переходов и  $K_g$  для  $g$ -переходов (см. (11), (12)), зависящий от этого распределения.

Как видно из рис. 2 и 3, на обеих характеристиках наблюдается провал в окрестности точного резонанса, который характеризуется тем, что энергия фонона с волновым вектором, равным расстоянию между центрами долин, равняется энергии соответствующего внутривалентного перехода. При точном резонансе матричный элемент равен нулю из-за различной четности волновых функций состояний  $2p_0$  и  $1s$ . Вследствие этого при расчете скорости релаксации состояния  $2p_0$  имеет место эффект компенсации вкладов в матричный элемент положительной и отрицательной части волновой функции состояния  $2p_0$ . Разница величин провалов для  $f$ - и  $g$ -переходов объясняется, во-первых, различной ориентацией волновых функций состояний перехода в обратном пространстве друг относительно друга, а во-вторых, отличием фононных изоэнергетических поверхностей, по которым производилось интегрирование. В случае  $g$ -переходов изоэнергетическая поверхность, как отмечалось выше, представляет собой сферу, а при радиусе сферы, равном длине волнового вектора  $g$ -фонона, эта сфера локально является почти плоскостью, ортогональной волновому вектору фонона. И при интегрировании по этой поверхности, вследствие симметричной ориентации изоэнергетической поверхности по отношению к оси, вдоль которой вытянуты волновые функции,<sup>1</sup> вклады в матричный элемент положительной и отрицательной части волновой функции состояния  $2p_0$  всегда почти одинаковы. Поэтому значение вероятности перехода в точке минимума на зависимости на рис. 2 равно почти нулю. В случае  $f$ -переходов изоэнергетическая поверхность ориентирована так, что определяющий вклад в матричный элемент в основном всегда дает только одна из частей волновой функции состояния  $2p_0$ , либо положительная, либо отрицательная. Поэтому эффект упомянутой компенсации проявляется в меньшей степени.

Используя полученные энергетические зависимости, легко получить суммарные значения темпов переходов из состояния  $2p_0$  в состояния отщепленной группы  $1s(E)$  и  $1s(T_2)$  для доноров фосфора, висмута, мышьяка и сурьмы. Результат этих вычислений, учитывающих распределение состояний по долинам, представлен в табл. 2.

<sup>1</sup> Волновые функции примесных состояний имеют цилиндрическую симметрию, и в случае  $g$ -переходов оси симметрии состояний вытянуты вдоль одного направления.

**Таблица 2.** Результирующий темп переходов  $2p_0 \rightarrow 1s(E, T_2)$  на фонах LA-g и TA-f для доноров V группы в кремнии в единицах  $10^9 \text{ c}^{-1}$ 

Примесь	P			Bi			As			Sb		
	Симметрия состояния $2p_0$	$A_1$	$E$	$T_2$	$A_1$	$E$	$T_2$	$A_1$	$E$	$T_2$	$A_1$	$E$
$1s(E)$	4.3	10.1	8.2	3.5	3.5	3.5	1.3	2.3	2	5.2	13.1	10.4
$1s(T_2)$	18	18	18	5.3**	5.3**	5.3**	16.8*	16.8*	16.8*	13.3	13.3	13.3
				16.8*	16.8*	16.8*	13.3	13.3	13.3	16	16	16

*Примечание.* В доноре Bi состояние  $1s(T_2)$  расщеплено из-за спин-орбитального взаимодействия [20], поэтому для перехода в состояние  $1s(T_2)$  донора Bi указаны два значения. \* состояние  $1s(T_2 : \Gamma_7)$ , \*\* состояние  $1s(T_2 : \Gamma_8)$ .

**Таблица 3.** Вероятности внутридолинных переходов между состояниями мелкого донорного центра в Si с излучением поперечных ( $W_{TA}$ ) и продольных ( $W_{LA}$ ) акустических фононов. Диэлектрическая проницаемость  $\epsilon = 11.4$ 

Переходы	$W_{LA}, 10^9 \text{ c}^{-1}$	$W_{TA}, 10^9 \text{ c}^{-1}$	$\Delta E, \text{ мэВ}$
$2p_0 \rightarrow 1s$	1.9	0.02	19.8
$2s \rightarrow 2p_0$	22	1.2	2.7
$2s \rightarrow 1s$	5.6	0.15	22.4
$2p_{\pm 1} \rightarrow 2s$	3.8	0.8	2.4
$2p_{\pm 1} \rightarrow 2p_0$	14	0.4	5.1
$2p_{\pm 1} \rightarrow 1s$	0.01	0	24.9
$3p_0 \rightarrow 2p_{\pm 1}$	0.8	0.52	0.9
$3p_0 \rightarrow 2s$	3.8	0.8	3.4
$3p_0 \rightarrow 2p_0$	24	0.48	6.0
$3p_0 \rightarrow 1s$	0.14	0	25.8
$3p_{\pm 1} \rightarrow 3p_0$	0.10	0.52	2.4
$3p_{\pm 1} \rightarrow 2p_{\mp 1}$	3.8	0.3	3.3
$3p_{\pm 1} \rightarrow 2p_{\pm 1}$	2.4	0.07	3.3

Для сравнения в табл. 3 приведены результаты расчетов скорости внутридолинных переходов с излучением акустических фононов между состояниями кулоновского центра в кремнии [18]. Данные расчеты получены в рамках метода эффективной массы с учетом анизотропии долин кремния, когда расщепление  $s$ -состояний (химический сдвиг) отсутствует.

#### 4. Заключение

В работе проведены расчеты скорости безызлучательной релаксации состояния  $2p_0$ , которое является верхним рабочим состоянием в эффекте стимулированного излучения доноров в кремнии, при излучении различных акустических фононов. Дана количественная оценка и показана роль внутридолинных и междолинных LA-g- и TA-f-фононов в этом процессе. Указано на важный вклад TA-f-фононов в распад указанного состояния. Полученные оценки в целом хорошо согласуются с результатами измерений [19], а имеющее место небольшое завышение темпа распада состояния  $2p_0$  (1.5–2 раза)

в расчетах можно объяснить завышенным значением константы взаимодействия. Важно, что использованный подход легко обобщается на случай кремния с деформированной решеткой, который, по данным измерений, является более перспективным для получения эффекта стимулированного излучения.

Работа была выполнена при поддержке РФФИ (грант № 05-02-16734).

#### Список литературы

- [1] S.G. Pavlov, R.Kh. Zhukavin, E.E. Orlova, V.N. Shastin, A.V. Kirsanov, H.-W. Hübers, K. Auen, H. Riemann. Phys. Rev. Lett., **84**, 5220 (2000).
- [2] S.G. Pavlov, H.-W. Hübers, H. Riemann, R.Kh. Zhukavin, E.E. Orlova, V.N. Shastin. J. Appl. Phys., **92**, 5632 (2002).
- [3] S.G. Pavlov, H.-W. Hübers, M.H. Rummeli, R.Kh. Zhukavin, E.E. Orlova, V.N. Shastin, H. Riemann. Appl. Phys. Lett., **80**, 4717 (2002).
- [4] H.-W. Hübers, S.G. Pavlov, H. Riemann, N.V. Abrosimov, R.Kh. Zhukavin, V.N. Shastin. Appl. Phys. Lett., **84**, 3600 (2004).
- [5] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [6] R.Kh. Zhukavin, V.V. Tsyplenkov, K.A. Kovalevsky, V.N. Shastin, S.G. Pavlov, U. Böttger, H.-W. Hübers, H. Riemann, N.V. Abrosimov, N. Nötzel. Appl. Phys. Lett., **90**, 051 101 (2007).
- [7] S.G. Pavlov, U. Böttger, H.-W. Hübers, R.Kh. Zhukavin, K.A. Kovalevsky, V.V. Tsyplenkov, V.N. Shastin, N.V. Abrosimov, H. Riemann. Appl. Phys. Lett., **90**, 141 109 (2007).
- [8] W. Kohn, J.M. Luttinger. Phys. Rev., **90** (4), 915 (1955).
- [9] J.C. Hensel, H. Hasegawa, M. Nakayama. Phys. Rev., **138** (4), A225 (1965).
- [10] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [11] C. Jacoboni, L. Reggiani. Rev. Mod. Phys., **5** (3), 645 (1983).
- [12] S. Rodriguez, T. Shultz. Phys. Rev., **178** (3), 1252 (1969).
- [13] П. Ю, М. Кардона. *Основа физики полупроводников* (М., Физматлит, 2002).
- [14] C. Jagannath, Z.W. Grabowski, A.K. Ramdas. Phys. Rev. B, **23**, 2082 (1981).
- [15] G. Dolling. IAEA (Vienna), **11**, 37 (1963).
- [16] G. Nilsson, G. Nelin. Phys. Rev. B, **6**, 3777 (1972).

- [17] P. Giannozzi, de S. Gironcoli, P. Pavone, S. Baroni. Phys. Rev. B, **43**, 7231 (1991).
- [18] Е.В. Демидов, М.С. Кузнецов, В.В. Цыпленков, В.Н. Шастин. *Матер. X симпоз. по нанофизике и наноэлектронике* (ИФМ РАН, Н. Новгород, 13–17 марта 2006) т. 2, с. 320.
- [19] A.J. Mayur, M. Dean Sciacca, A.K. Ramdas, S. Rodriguez. Phys. Rev. B., **48**, 10 893 (1993-1).

*Редактор Т.А. Полянская*

## **Relaxation of excited donor states by emission of intervalley phonons**

*V.V. Tsyplenkov, E.V. Demidov, K.A. Kovalevsky,  
V.N. Shastin*

Institute for Physics of Microstructures,  
Russian Academy of Science,  
603950 Nizhniy Novgorod, Russia

**Abstract** Low temperature relaxation of excited group V donors in silicon due to intervalley phonon emission is analyzed. The rate of the  $2p_0-1s(E, T_2)$  transitions with the emission of LA-*g* and TA-*f* intervalley acoustical phonons has been specified for arsenic, phosphorus, bismuth and antimony donor centers. It is shown that TA-*f*-phonons give a considerable contribution in nonradiative decay of the  $2p_0$  state which is a laser state for IR stimulated emission from phosphorus and antimony donors in silicon.