

# Температурная зависимость инверсной заселенности на внутрицентровых переходах мелких примесей в полупроводниках

© Е.Е. Орлова<sup>†</sup>

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

(Получена 8 апреля 2010 г. Принята к печати 20 апреля 2010 г.)

Проведен анализ основных факторов температурной зависимости инверсной заселенности на переходах мелких примесей в полупроводниках в рамках четырехуровневой схемы инверсии: заполнение нижнего состояния лазерного перехода при разогреве с основного состояния, уменьшение населенности долгоживущего примесного состояния из-за термической ионизации и при увеличении скорости прямой рекомбинации на основное состояние с излучением оптических фононов. Определены температуры, при которых указанные факторы становятся существенными. Показано, что термическая ионизация с долгоживущего состояния является основным фактором, определяющим температурное гашение стимулированного излучения на переходах по состояниям мелких доноров в кремнии.

## 1. Введение

Относительно долгие времена жизни, большие сечения оптических переходов и каскадный характер процессов релаксации по состояниям мелких примесных центров в полупроводниках делают их привлекательными в качестве активной среды терагерцового диапазона. Стимулированное излучение на внутрицентровых переходах получено в *n*-Si при относительной накачке [1], в нелинейном режиме лазера *p*-Ge на межподзонных переходах [2] и в деформированном *p*-Ge при разогреве сильным электрическим полем [3]. Существенным препятствием, ограничивающим потенциальную область применения лазеров на примесных переходах, является низкая рабочая температура. Температуры, при которых наблюдается стимулированное излучение на переходах мелких донорных центров в кремнии (менее 35 К [4]), намного ниже рабочих температур, достигнутых в терагерцовых квантовых каскадных лазерах [5], и существенно ниже температур, соответствующих энергии кванта излучения, энергии ионизации долгоживущего состояния и разности энергий основного состояния примеси и нижнего состояния стимулированного перехода. Теоретический анализ температурной зависимости стимулированного излучения на внутрицентровых переходах мелких примесей в полупроводниках до сих пор не проводился.

В настоящей работе исследуется температурная зависимость инверсной заселенности в рамках четырехуровневой схемы инверсии на переходах между локализованными состояниями водородоподобного центра при накачке в зону свободных состояний. Рассмотрены такие факторы температурной зависимости инверсной заселенности на примесных переходах, как заполнение нижнего состояния лазерного перехода при разогреве, уменьшение населенности долгоживущего примесного состояния из-за термической ионизации и увеличения скорости прямой рекомбинации.

## 2. Метод расчета

Для анализа неравновесного распределения носителей заряда по верхним возбужденным примесным состояниям и в непрерывном спектре в настоящей работе используется квазиклассический подход, который использовался для расчета скорости каскадного захвата [6]. В рамках этого подхода функция распределения описывается уравнением Фоккера–Планка. Времена релаксации и плотность состояний квазинепрерывного спектра рассчитываются в рамках водородоподобной модели, в приближении изотропного закона дисперсии зоны свободных состояний. Энергии переходов между нижними примесными состояниями превышают характерный шаг релаксации с излучением длинноволновых фононов в квазиклассическом приближении. В отличие от спектра верхних возбужденных состояний, который слабо зависит от вида примеси, энергия ионизации основного состояния мелких примесей определяется потенциалом центральной ячейки и изменяется в широких пределах [7]. Скорости переходов в нижней части примесного спектра как при взаимодействии с длинноволновыми и междолинными фононами, так и при оже-процессах сильно зависят от энергии переходов и рассматриваются в настоящей работе как переменные параметры. Для описания распределения по нижним возбужденным состояниям используется вероятностный подход [8]. Вероятностное описание позволяет получить граничное условие для функции распределения по состояниям квазинепрерывного спектра и тем самым достичь согласованного описания распределения по состояниям дискретного и непрерывного спектра. Такой подход дает возможность учесть влияние особенностей дискретного спектра примесных состояний на рекомбинацию.

## 3. Рост населенности нижнего состояния лазерного перехода

Для анализа сглаживания инверсии при тепловом возбуждении носителей заряда с основного состояния

<sup>†</sup> E-mail: orlova@ipm.sci-nnov.ru

в нижнее состояние лазерного перехода удобно использовать вероятностный метод [8]. В рамках этого подхода отношение населенностей верхнего (долгоживущего)  $n_2$  и нижнего  $n_1$  состояний лазерного перехода равно отношению полных скоростей переходов между этими состояниями:

$$n_1/n_2 = \tilde{W}_{2,1}/\tilde{W}_{1,2}. \quad (1)$$

Скорости  $\tilde{W}_{j,k}$  включают все возможные маршруты по лестнице возбужденных примесных состояний и состояний континуума:

$$\tilde{W}_{j,k} = W_{j,k} + \sum_{i \neq k,j} W_{j,i} P_{i,k,j}, \quad (2)$$

где  $W_{j,k}$  — скорость прямого перехода между уровнями  $j$  и  $k$ , а  $P_{i,j,k}$  — вероятность для носителя с уровня  $i$  после серии переходов достичь уровня  $j$  до попадания на уровень  $k$ . Система уравнений для вероятностей  $P_{i,j,k}$

$$P_{i,j,k} = \frac{W_{i,j} + \sum_{l \neq i,j,k} W_{i,l} P_{l,j,k}}{\sum_l W_{i,l}} \quad (3)$$

эквивалентна системе стационарных уравнений баланса для населенностей [8].

В условиях каскадного захвата вероятность релаксации с верхних возбужденных состояний, минуя долгоживущее состояние, мала. Это связано с быстрым спадом вероятностей переходов с излучением акустических фононов с увеличением энергии перехода выше характерного шага фононной релаксации. Например, скорости прямых переходов с излучением акустических фононов в рамках водородоподобной модели примесного центра [9,10] с состояния  $2s$  доноров в кремнии в состояние  $1s$  на 2 порядка меньше скорости перехода с уровня  $2s$  в состояние  $2p_0$ . Таким образом, полная скорость релаксации с долгоживущего состояния определяется скоростью прямого перехода:

$$\tilde{W}_{2,1} \approx W_{2,1}. \quad (4)$$

Вероятность прямого возбуждения долгоживущего уровня при температурах меньше температуры, соответствующей энергии кванта накачки, мала. Возбуждение носителей заряда с первого уровня на второй в рамках четырехуровневой схемы инверсии осуществляется в основном по маршруту, включающему переход на основное состояние с последующим возбуждением в процессе накачки:

$$\tilde{W}_{1,2} \approx W_{1,0} P_{0,2,1}. \quad (5)$$

В случае, когда преобладает каскадный захват, а прямая рекомбинация незначительна, доля носителей, которые попадают с основного состояния на долгоживущий уровень до релаксации на уровень  $I$ , определяется соотношением скорости накачки  $W_{\text{pump}}$  и вероятности термического возбуждения с основного уровня  $W_{0,1}$ :

$$P_{0,2,1} = W_{\text{pump}}/(W_{\text{pump}} + W_{0,1}). \quad (6)$$

Используя (1)–(6) и условие детального баланса для вероятностей переходов между состоянием  $I$  и основным состоянием, получаем для соотношения населенностей инвертированных уровней:

$$n_1/n_2 = (1 + \exp(-E_{1,0}/k_B T) W_{1,0}/W_{\text{pump}}) W_{2,1}/W_{1,0}, \quad (7)$$

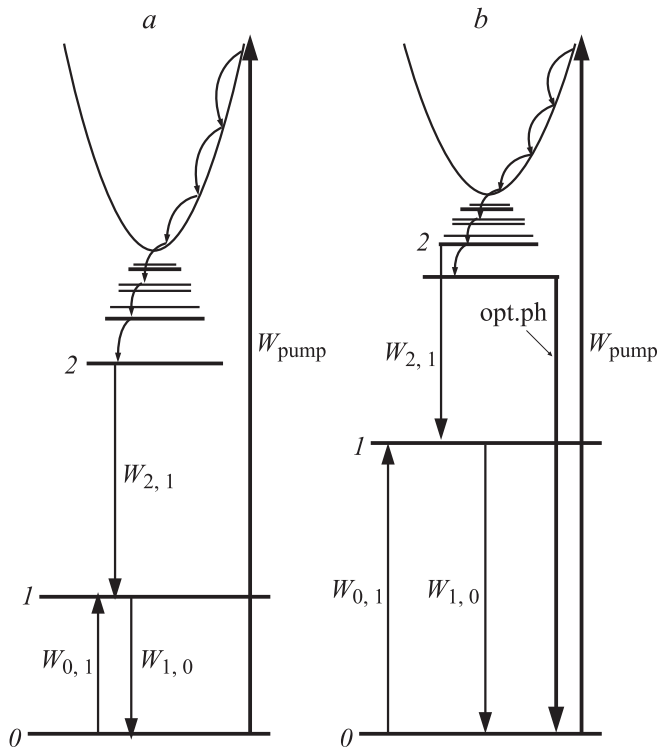
где  $E_{1,0}$  — энергия перехода с основного состояния на нижний уровень. В соответствии с (7) необходимым условием инверсии населенностей является соотношение для вероятностей переходов  $W_{1,0} > W_{2,1}$ . При больших мощностях накачки  $W_{\text{pump}} > W_{2,1}$  и  $W_{\text{pump}} > W_{1,0}$  соотношение населенностей инвертированных уровней слабо зависит от температуры. Однако пороговый уровень накачки может быть существенно ниже. Например, в лазере на кремнии, легированном фосфором [1], условие превышения усиления над уровнем потерь достигается, когда менее 10% частиц находится на долгоживущем уровне, что соответствует  $W_{\text{pump}} < 0.1 W_{2,1}$ . Полное сглаживание инверсии ( $n_1/n_2 = 1$ ) возможно при  $W_{\text{pump}} < W_{2,1}$  и происходит при температуре:

$$k_B T = E_{1,0} / \ln((W_{\text{pump}}/W_{2,1} - W_{\text{pump}}/W_{1,0})^{-1}). \quad (8)$$

Поскольку температуры, соответствующие энергии  $E_{1,0}$  для доноров в кремнии, лежат в диапазоне 134–400 К, а пороговая скорость накачки составляет величину порядка десятой доли от скорости релаксации с долгоживущего состояния [1], эта температура  $\sim 60$ –170 К, что много выше температуры гашения стимулированного излучения, наблюдаемого при температурах 12–35 К. Однако населенность нижнего состояния лазерного перехода может существенно меняться при меньших температурах. При уровне накачки  $W_{\text{pump}} < W_{1,0}$  отношение  $n_1/n_2$  увеличивается в 2 раза при

$$k_B T = E_{1,0} / \ln(W_{1,0}/W_{\text{pump}}). \quad (9)$$

В кремнии, легированном фосфором (рис. 1, *a*), скорость релаксации отщепленного  $1s$  при спонтанном излучении междолинного фонона  $g$ -ТА составляет около  $W_{1,0} \approx 10^{11} \text{ с}^{-1}$ , в то время как скорость релаксации с долгоживущего состояния  $2p_0$  при взаимодействии с фононами  $g$ -LA составляет  $W_{2,1} \approx 5 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$  [11]. Соответственно  $W_{1,0}$  и  $W_{\text{pump}}$  могут отличаться более чем на 2 порядка величины. Температура  $k_B T$ , при которой существенно меняется населенность состояния  $1s$  в Si:P, составляет около 25 К при уровне накачки, близком к пороговой. В кремнии, легированном висмутом (рис. 1, *b*), инверсия населенностей реализуется на переходах между уровнем  $2p_{\pm}$  и отщепленными состояниями  $1s(E; T)$ , которые оказываются относительно малозаселенными, поскольку благодаря резонансному взаимодействию с оптическими фононами большинство носителей заряда релаксирует с состояний  $2p_0$  и  $2s$  непосредственно в основное состояние, минуя отщепленные. Скорость релаксации с отщепленных состояний  $1s$  определяется взаимодействием с длинноволно-



**Рис. 1.** Схема переходов по состояниям доноров в кремнии при накачке в зону свободных состояний: *a* — Si:F, *b* — Si:Bi.

выми акустическими фононами и значительно медленнее, чем в Si:P:  $W_{1,0} \approx 2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ . Поскольку скорость пороговой накачки в Si:Bi  $W_{\text{pump}} > 10^9 \text{ с}^{-1}$  [4], в этом материале не происходит существенного увеличения населенности состояний 1s при увеличении температуры до комнатной.

#### 4. Термическая ионизация долгоживущих состояний

Для анализа влияния термической ионизации с долгоживущего состояния на время жизни свободных носителей заряда используется квазиклассическое описание [6], которое удовлетворительно описывает релаксацию при взаимодействии с длинноволновыми акустическими фононами по возбужденным состояниям примесного спектра, пока энергии переходов между уровнями не превышают характерной энергии испускаемого фонона. Квазиупругий характер взаимодействия с акустическими фононами позволяет считать, что функция распределения носителей заряда зависит только от полной энергии  $\mathcal{E} = E - e^2/\epsilon r$  в поле притягивающего кулоновского центра и описывается уравнением Фоккера–Планка:

$$\tilde{\rho} \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial E}, \quad (10)$$

где  $\tilde{\rho}$  — плотность состояний в пространстве полной энергии,  $J$  — поток носителей заряда в пространстве

полной энергии:

$$J = -B(E) \left( f + k_B T \frac{\partial f}{\partial E} \right), \quad (11)$$

коэффициент динамического энергетического трения  $B(E)$  получается в предположении, что рассеяние в каждой точке орбиты в поле примесного центра происходит с той же вероятностью, что и рассеяние свободного носителя заряда с энергией, равной кинетической энергии  $E$  в поле центра:

$$B(E) = \frac{1}{V} \int \int \mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) \tau_{\mathcal{E}}^{-1}(\mathcal{E}) \delta(E - \mathcal{E} - e^2/\epsilon r) d\mathcal{E} dr, \quad (12)$$

где  $\tau_{\mathcal{E}}$  — время энергетической релаксации при спонтанном излучении акустических фононов, в модели изотропного квадратичного закона дисперсии  $\tau_{\mathcal{E}}^{\text{ac}}(\mathcal{E}) = l_0 \sqrt{m^*/2\mathcal{E}}$ ,  $l_0$  — характерная длина свободного пути при рассеянии на длинноволновых акустических фононах. Расчет каскадного захвата при взаимодействии с акустическими фононами проводился ранее в предположении, что носители заряда, достигшие состояний с энергией ионизации больше  $k_B T$ , являются захваченными. Действительно, в рамках модели квазинепрерывного спектра вероятность прилипания, т.е. вероятность достижения основного состояния до ионизации, для носителей заряда с этих уровней близка к единице. Это предположение соответствует нулевому граничному условию для функции распределения (10) при больших отрицательных энергиях. Сечение захвата, полученное таким образом, не зависит от особенностей релаксации по нижним возбужденным состояниям [6]. Энергии переходов между нижними возбужденными состояниями превышают характерный шаг релаксации при взаимодействии с длинноволновыми акустическими фононами. Замедление релаксации при увеличении энергии переходов между уровнями приводит к уменьшению вероятности прилипания. Как показано далее, наличие долгоживущих состояний может существенно влиять на сечение захвата, даже если их энергия ионизации больше  $k_B T$ .

Для анализа влияния замедления релаксации по состояниям дискретного спектра на скорость каскадного захвата следует поставить граничное условие для функции распределения, используя населенность долгоживущего уровня  $n_2$ , рассчитанную в рамках вероятностного метода. При этом предполагается, что вышележащие возбужденные состояния удовлетворительно описываются в рамках квазиклассического приближения. Связь между квазиклассической функцией распределения и населенностью уровня устанавливается исходя из того, что оба подхода должны давать одинаковое число частиц в единичном интервале энергии:

$$f(-E_2) = n_2/N^+, \quad (13)$$

где  $N^+$  — концентрация притягивающих центров,  $E_2$  — энергия связи долгоживущего уровня. Стационарное

решение уравнения Фоккера–Планка, соответствующее постоянству потока частиц в пространстве полных энергий и граничному условию (13):

$$f = \frac{J \exp(-E/k_B T)}{k_B T} \int_{-E_2}^E \frac{\exp(\mathcal{E}/k_B T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E} + f(-E_2) \exp\left(\frac{-E_2 - E}{k_B T}\right). \quad (14)$$

В качестве граничного условия при  $E = 0$ , как и в [6], использовалось равновесное значение функции распределения  $f(E = 0) = n/N(T)$ , где  $n$  — концентрация свободных носителей заряда, а  $N(T) = (m^* k_B T / 2\pi \hbar^2)^{3/2}$  — эффективное число свободных состояний в единице объема с энергией меньше  $k_B T$ :

$$\frac{J}{k_B T} \int_{-E_2}^0 \frac{\exp(\mathcal{E}/k_B T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E} + f(-E_2) \exp\left(\frac{-E_2}{k_B T}\right) = n/N(T). \quad (15)$$

В условиях каскадного захвата при температуре меньше энергии кванта стимулированного излучения отношение населенности долгоживущего и основного примесных состояний определяется отношением скорости накачки и полной скорости релаксации с долгоживущего состояния:

$$n_2/n_0 = \mathbf{W}_{\text{pump}}/\tilde{W}_{2,0}. \quad (16)$$

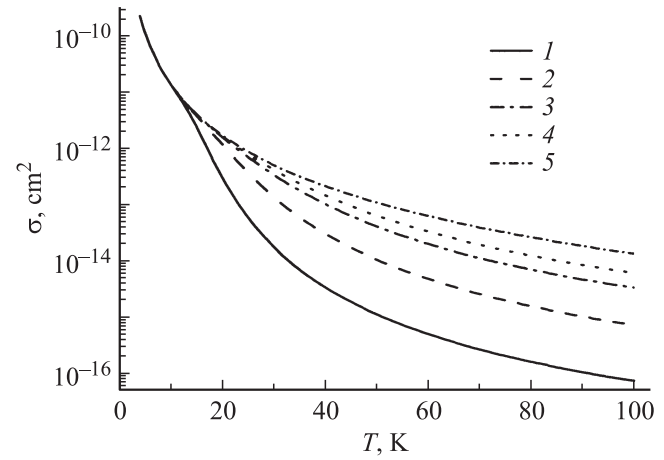
В соответствии с условием сохранения числа частиц величина рекомбинационного потока в единице объема равна числу частиц, ионизованных с основного состояния излучением накачки:

$$N^+ J = n_0 \mathbf{W}_{\text{pump}}. \quad (17)$$

Выражая рекомбинационный поток через сечение захвата  $J = n\sigma\bar{v}(T)$ , где  $\bar{v}(T) = \sqrt{8k_B T/\pi m^*}$  — средняя скорость носителей заряда, и используя (13), (15)–(17), получаем

$$\sigma = 1/\left(\sigma_c^{-1}(1 - \exp(-E_2/k_B T))(E_2/k_B T + 1) + \sigma_2^{-1} \exp(-E_2/k_B T)\right), \quad (18)$$

где  $\sigma_c = W_c/N(T)\bar{v}(T)$  — сечение захвата в приближении квазинепрерывного спектра,  $W_c = 4e^6 m^*/3\pi\epsilon^3 L_0 \hbar^3 k_B T$  — характерная скорость релаксации по верхним возбужденным состояниям кулоновского центра при взаимодействии с акустическими фононами, эта величина определяет сечение захвата при низких температурах;  $\sigma_2 = \tilde{W}_{2,0}/N(T)\bar{v}(T)$  — сечение каскадного захвата при высоких температурах, когда существенно тепловая ионизация с долгоживущего состояния. Поскольку отношение  $\sigma_2/\sigma_c = \tilde{W}_{2,0}/W_c$  может быть много меньше единицы, температура, при



**Рис. 2.** Сечения захвата носителей заряда на притягивающий кулоновский центр с долгоживущим состоянием. Параметры, использованные в расчетах, соответствуют зоне проводимости кремния [6]. Энергия связи долгоживущего состояния соответствует энергии  $2p_0$  состояния доноров в кремнии, 11,4 мэВ. Время жизни долгоживущего состояния предполагалось равным, с: 1 —  $10^{-8}$ , 2 —  $10^{-9}$ , 3 —  $5 \cdot 10^{-9}$ , 4 —  $10^{-10}$ . 5 — Сечение захвата в приближении квазинепрерывного спектра возбужденных состояний кулоновского центра [6].

которой наличие долгоживущего состояния сказывается на сечении каскадного захвата,

$$k_B T \approx E_2 / \ln(W_c/\tilde{W}_{2,0}), \quad (19)$$

может быть существенно меньше энергии ионизации долгоживущего состояния. Например, для доноров кремния  $W_c = 2 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$  при 40 К, а  $\tilde{W}_{2,0} = \mathbf{W}_{2,1} \approx 5 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$  в Si:P при релаксации с излучением междолинных фононов [11], и тепловая ионизация с долгоживущего состояния существенно влияет на концентрацию свободных носителей уже при температуре порядка 30 К. В соответствии с (18) при температурах ниже (19) сечение каскадного захвата уменьшается обратно пропорционально кубу температуры. При выполнении условия (19) и до температур порядка энергии ионизации долгоживущего уровня зависимость сечения захвата от температуры экспоненциальная, а при температурах много больше энергии ионизации сечение обратно пропорционально квадрату температуры. На рис. 2 приведены сечения захвата, рассчитанные по формуле (18) с параметрами, соответствующими зоне проводимости кремния, для нескольких значений времен жизни долгоживущего состояния. Времена порядка  $5 \cdot 10^{-9} \text{ с}$  соответствуют переходам с состояния  $2p_0$  в отщепленное состояние  $1s(E, T)$  Si:P при взаимодействии с междолинными фононами. Времена порядка  $10^{-8} \text{ с}$  соответствуют внутридолинным переходам, сечения, полученные с такими временами, дают представление о возможной температурной зависимости рекомбинационных процессов при отстройке энергии перехода от резонанса с междолинными фононами.

Уменьшение сечения захвата начинает сказываться на населенности долгоживущего состояния, лишь когда его время жизни оказывается меньше времени жизни свободных носителей заряда. Времена переходов между нижними возбужденными состояниями сильно зависят от энергии переходов, которые в свою очередь зависят от возможных возмущений, например, приложенных полей и давления. Возникает вопрос — возможно ли увеличение рабочей температуры примесных лазеров при увеличении времен жизни долгоживущих состояний. Как показано выше, времена жизни свободных носителей заряда и долгоживущих состояний связаны благодаря влиянию термической ионизации с долгоживущих состояний на сечение захвата. Эта связь приводит к тому, что верхний предел температуры, при которой существенная доля носителей ионизована, не зависит от времени жизни долгоживущего состояния, а зависит от энергии его ионизации и уровня легирования. Действительно, используя (15)–(18), получаем для отношения концентрации свободных носителей к населенности долгоживущего состояния:

$$\frac{n}{n_2} = \frac{N(T)}{N^+} \left( \tilde{W}_{2,1}/W_c (1 - \exp(-E_2/k_B T)(E_2/k_B T + 1)) + \exp(-E_2/k_B T) \right). \quad (20)$$

Первое слагаемое (20) описывает поток частиц с долгоживущего уровня на основное состояние с последующей ионизацией излучением накачки, второе слагаемое соответствует вкладу термической ионизации с долгоживущего состояния. При выполнении условия (19) термическая ионизация дает основной вклад и соотношение населенностей (20) соответствует равновесному. Температура, при которой ионизация с долгоживущего состояния приводит к существенному уменьшению его населенности:

$$k_B T = E_2 / \ln(N(T)/N^+). \quad (21)$$

Эта температура зависит от концентрации заряженных центров захвата, которая в свою очередь зависит от уровня компенсации и скорости накачки. Верхний предел для (21) определяется уровнем легирования  $N_d$ . Поскольку уровень легирования, при котором происходит уширение линий примесных переходов, значительно ниже эффективной концентрации свободных состояний, эта температура существенно ниже энергии ионизации долгоживущего состояния. Так, в донорах кремния стимулированное излучение наблюдалось для  $N_d \leq 3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ , эффективная концентрация свободных состояний в зоне проводимости кремния  $N(T) \approx 10^{17} \text{ см}^{-3}$  при  $T \approx 40 \text{ К}$ , и температура, при которой падение населенности долгоживущего состояния за счет роста доли свободных носителей заряда становится существенным,  $k_B T < 40 \text{ К}$ .

## 5. Рост вероятности прямой рекомбинации

Прямая рекомбинация при спонтанном излучении оптических и междолинных акустических фононов может приводить к тому, что часть ионизованных носителей релаксирует в основное состояние, минуя верхнее состояние лазерного перехода, и не дает вклад в усиление. В соответствии с [7] населенность долгоживущего состояния при этом описывается формулой

$$n_2/n_0 = \mathbf{W}_{\text{pump}}(1 - P_{\text{zone},0,2})/\tilde{W}_{2,0}, \quad (22)$$

где  $P_{\text{zone},0,2} = \sigma_d/(\sigma + \sigma_d)$  — вероятность, что свободный носитель релаксирует в основное состояние, минуя долгоживущее состояние,  $\sigma_d$  — сечение прямой рекомбинации с излучением оптического фонона,  $\sigma$  — сечение каскадного захвата с учетом влияния долгоживущего состояния (18). Сечения прямой рекомбинации с излучением оптических и междолинных фононов вида  $k$  на примесное состояние с энергией связи  $E_i$ , рассчитанные для максвелловского распределения свободных носителей заряда в приближении плоских волн для огибающих волновых функций свободных электронов и постоянной частоты фононов  $\omega_k$  ( $\omega_k > E_i/\hbar$ ) в пределах неопределенности волнового вектора огибающей локализованного состояния

$$\sigma_d^k = W_k \exp((E_i - \hbar\omega_k)/k_B T) / N(T) \bar{v}(T), \quad (23)$$

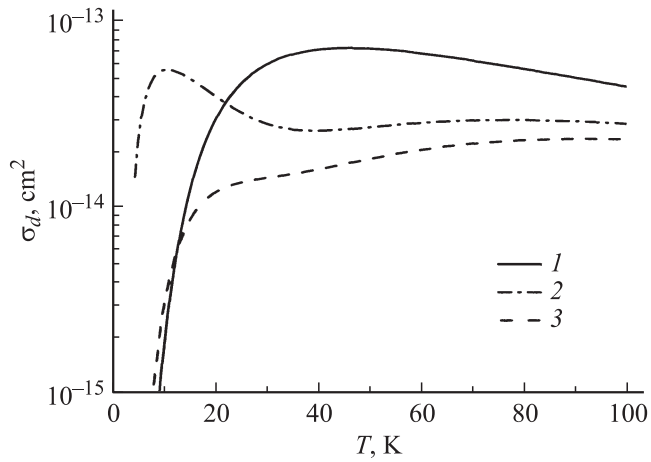
где  $W_k = \pi D_k^2 \rho(\hbar\omega_k - E_i) K C^2 / \rho_c \omega_k$  — характерная частота излучения фононов,  $D_k$  — константа потенциала деформации,  $\rho_c$  — плотность кристалла,  $\rho(E)$  — энергетическая плотность свободных состояний,  $K$  — число эквивалентных междолинных переходов,  $C$  — коэффициент, с которым вклад соответствующей долины входит в волновую функцию локализованного состояния. Предполагается, что рекомбинация с излучением оптических фононов не влияет существенно на распределение свободных носителей заряда и сечение каскадного захвата. В соответствии с (18) и (22), (23) для фононов с  $W_k < W_2$  вероятность прямой рекомбинации мала при любой температуре. В случае, когда  $W_2 < W_k < W_c$ , вероятность прямой рекомбинации на основное состояние с энергией связи  $E_l$  становится существенной при температуре

$$k_B T = (\hbar\omega_k - E_l + E_2) / \ln(W_k/\tilde{W}_{2,0}). \quad (24)$$

Для быстрых процессов рекомбинации с  $W_k > W_c$  прямая рекомбинация начинает преобладать при температуре

$$k_B T = (\hbar\omega_k - E_l) / \ln(W_k/W_c) \quad (25)$$

или при температуре (24), если она меньше. Для доноров кремния возможные процессы прямого захвата на основное состояние связаны с взаимодействием с фононами LO-g, TO-f (для P-, Sb- и As-доноров) и фононами LA-f (для P- и Sb-доноров). Характерные частоты



**Рис. 3.** Суммарное сечение прямого захвата электронов проводимости кремния с излучением фононов LO-g, TO-f и LA-f в основное состояние положительно заряженного кулоновского центра с энергией ионизации, мэВ: 1 — 53.76 (Si:As), 2 — 45.59 (Si:P), 3 — 42.74 (Si:Sb).

излучения фононов TO-f и LA-f  $W_{\text{TO-f}} = 3-5 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$ ,  $W_{\text{LA-f}} = 2-4 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$  значительно меньше характерной скорости каскадного захвата ( $W_c > 8 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$  для температур меньше 100 К). Температуры (24), при которых эти процессы вносят существенный вклад в рекомбинацию, больше 100 К. Основную роль в увеличении вероятности прямого захвата на доноры кремния играют фононы LO-g, для которых  $W_{\text{LO-g}} = 5-8 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$ . Суммарное сечение захвата на основное состояние доноров кремния при взаимодействии с фононами LO-g, TO-f и LA-f, полученными с использованием констант деформационного потенциала, приведенных в [12], представлены на рис. 3. Сравнение с рис. 2 показывает, что прямая рекомбинация на донорные центры становится существенной при температуре около 50 К для Si:As и порядка 70 К для Si:P и Si:Sb.

## 6. Обсуждение экспериментальных данных

Проведенный анализ показывает, что уменьшение населенности долгоживущего состояния из-за роста концентрации свободных носителей при тепловой ионизации с долгоживущего состояния является основным фактором, определяющим температурную зависимость инверсной заселенности на переходах мелких доноров в кремнии. Как показано выше, верхний предел температуры, при которой этот процесс становится существенным, составляет 40 К. Полученные теоретические результаты хорошо согласуются с наблюдаемой температурной зависимостью стимулированного излучения на переходах по состояниям доноров в кремнии [4]. Действительно, стимулированное излучение не наблюдалось при температурах более 35 К. Наблюдаемые отличия температуры

гашения стимулированного излучения в материалах с разными типами примеси могут быть связаны с разным уровнем компенсации и накачки, приводящим в соответствии с (21) к различию температуры ионизации долгоживущих состояний из-за разной концентрации заряженных центров. Роль ионизации с долгоживущих состояний подтверждается также данными измерений температурной зависимости примесной электролюминесценции и примесного поглощения в кремнии [13]. Гашение электролюминесценции на внутрицентровых переходах центров фосфора в кремнии с концентрацией легирования  $N_d = 1.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  происходило при температуре порядка 40 К. Температура, при которой наблюдалось существенное уменьшение примесного поглощения в материале с тем же уровнем легирования, была значительно выше (около 150 К). Различие объясняется тем, что температура, при которой уменьшается поглощение, определяется термической ионизацией основного состояния примеси, а температура гашения люминесценции связана с ионизацией более мелких долгоживущих состояний.

## 7. Заключение

Таким образом, в настоящей работе проведен анализ основных факторов температурной зависимости инверсной населенности состояний мелких примесных центров в полупроводниках. Показано, что термическая ионизация с долгоживущих примесных состояний может существенно влиять на сечение каскадного захвата и является основным механизмом гашения стимулированного излучения на переходах мелких донорных центров в кремнии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 09-02-97060.

## Список литературы

- [1] S.G. Pavlov, R.Kh. Zhukavin, E.E. Orlova, V.N. Shastin, A.V. Kirsanov, H.-W. Hubers, K. Auen, H. Riemann. Phys. Rev. Lett., **84**, 5220 (2000).
- [2] А.В. Муравьев, С.Г. Павлов, Е.Е. Орлова, В.Н. Шастин. Письма ЖЭТФ, **59** (2), 86 (1994).
- [3] M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, M.S. Kagan, Yu.M. Galperin, K.A. Chao. Phys. Rev. Lett., **83**, 644 (1999).
- [4] H.-W. Hubers, S.G. Pavlov, V.N. Shastin. Semicond. Sci. Technol., **20**, S211 (2005).
- [5] B.S. Williams. Nature Photon **1**, 517 (2007).
- [6] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясневич. ФТП, **12**, 3 (1978).
- [7] A.K. Ramdas, S. Rodriguez. Rep. Progr. Phys., **44**, 1297 (1981).
- [8] E.E. Orlova, R.Kh. Zhukavin, S.G. Pavlov, V.N. Shastin. Phys. Status Solidi B, **10**, 859 (1998).
- [9] G. Ascarelly, S. Rodriguez. Phys. Rev., **124**, 1321 (1961).
- [10] С.В. Мешков, Э.И. Рашба. ЖЭТФ, **76**, 2207 (1979).

- [11] E.E. Orlova. *26th Intern. Conf. Physics of Semiconductors* (Edinburgh, 2002) P61.
- [12] C. Iacoboni, L. Reggiani. *Rev. Mod. Phys.*, **55**, 645 (1983).
- [13] S.A. Lynch, P. Townsend, G. Matmon, D.J. Paul, M. Bain, H.S. Gamble, J. Zhang, Z. Ikonic, R.W. Kelsall, P. Harrison. *Appl. Phys. Lett.*, **87**, 101 114 (2005).

*Редактор Л.В. Беляков*

## **Temperature dependence of inverse population on intra-center transitions of shallow impurity centers in semiconductors**

*E.E. Orlova*

Institute for Physics of Microstructures,  
Russian Academy of Sciences,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** Analysis is made of the main factors of temperature dependence of inverse population on shallow impurity transitions in semiconductors in the frame of four-level inversion scheme: population of lower state of laser transition by heating from ground state, decrease of the population of long living impurity state due to thermal ionization and due to increase of the rate of direct recombination to ground state with optical phonon emission. Temperatures are determined when these factors are becoming essential. It is shown that thermal ionization from long living state is the main factor, which determines the temperature quenching of stimulated emission on donor transitions in silicon.