

- [1] R. A. Street, C. C. Tsai. *Phil. Mag. B*, **57**, 663 (1988).
 [2] Физика гидрогенизированного аморфного кремния. Вып. 1 (под ред. Дж. Джоунопулоса, Дж. Люковски), 12. М. (1987).
 [3] M. Stutzmann. *Phil. Mag. B*, **60**, 531 (1989).
 [4] R. A. Street, K. Miner. *J. Non-Cryst. Sol.*, **114**, 645 (1989).
 [5] Ю. Д. Чистяков, Ю. П. Райнова. Физико-химические основы технологии микроэлектроники М., (1979).
 [6] T. V. Herak, R. D. McLeod, K. C. Kao, H. C. Card, H. Watanabe, K. Katoh, M. Yasui, Y. Shibata. *J. Non-Cryst. Sol.*, **69**, 39 (1984).
 [7] B. Dunnett, D. I. Jones, A. D. Steward. *Phil. Mag. B*, **53**, 159 (1986).
 [8] A. Morimoto, Y. Tsujimura, M. Kumeda, T. Shimizu. *Japan. J. Appl. Phys.*, **24**, 1394 (1985).
 [9] А. А. Айвазов, Б. Г. Будагян, Е. Л. Приходько, А. Ю. Сазонов *ФТП*, **25**, 1802 (1991).
 [10] A. A. Aivazov, B. G. Budaguan, A. Yu. Sazonov, D. A. Stryahilev. *J. Non-Cryst. Sol.*, **148**, 130 (1992).
 [11] I. Umezu, K. Maeda. *Japan. J. Appl. Phys.*, **30**, 2547 (1991).

Редактор Т. А. Полянская

ФТП, том 27, вып. 8, 1993

РЕЛАКСАЦИЯ РЕШЕТКИ ПРИ ФОТОИОНИЗАЦИИ ГЛУБОКИХ ПРИМЕСЕЙ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ

А. И. Рыскин, Ежи М. Лангер

Государственный оптический институт им. С. И. Вавилова, 199034, Санкт-Петербург, Россия
 (Получено 11 декабря 1992 г. Принято к печати 24 декабря 1992 г.)

Изменение состояния глубокого примесного центра, обусловленное его фотоионизацией, сопровождается смещением близлежащих ионов и, в некоторых случаях, самой примеси, т. е. релаксацией решетки. В принципе возможны три типа релаксационных эффектов.

1. Релаксация по «дышащей моде», непосредственно обусловленная изменением заряда примесного иона.

2. Релаксация по ян—теллеровским модам, возникающая в том случае, если основное или возбужденное (перезаряженное) состояние центра вырождено.

3. Релаксация, обусловленная перестройкой решетки из-за изменения позиции примеси или ее ближайшего соседа.

Релаксация типа 2 характерна для $3d$ -примесей. Релаксация типа 3 наблюдается для DX -центров.

Релаксация решетки влияет на спектральную зависимость сечения фотоионизации, которое представляет свертку электронного сечения $\sigma(\hbar\omega)$ и вибронной функции формы спектра $f(\hbar\omega)$:

$$\sigma(\hbar\omega) = \int d(\hbar\omega') \cdot f(\hbar\omega') \cdot \sigma_{el}(\hbar\omega - \hbar\omega') \quad (1)$$

$$\sigma_{el}(\hbar\omega) = C\omega \int_0^{\infty} dE \cdot \rho(E) \cdot M^2(E) \cdot \delta(\hbar\omega - E - E_0) \quad (2)$$

В выражении (2) C — постоянная, $\rho(E)$ — плотность электронных состояний кристалла с примесью, $M(E)$ — матричный элемент оптического перехода электрона из центра в зону проводимости или из валентной зоны на центр, E_0 — порог фотоионизации. Запись (1) предполагает, что исходное состояние центра невырождено или подвержено статическому эффекту Яна—Теллера, т. е. элект-

тронное и ядерное движения могут быть разделены. Вибронная функция формы спектра представляет квадрат интеграла перекрытия колебательных волновых функций в основном и возбужденном (перезаряженном) состояниях центра. Эта функция может быть записана аналитически лишь в простейшем случае одноосцилляторной модели и линейного вибронного взаимодействия. В этом случае она представляет (при $T = 0$) распределение Пуассона $e^{-S}(S^n/n!)$, S — параметр распределения (фактор Хуанга—Риса), характеризующий величину линейного вибронного взаимодействия. Энергия релаксации решетки $E_{rel} = S \cdot \hbar\omega$, где ω — частота осциллятора. С учетом реального колебательного спектра примесного кристалла аналитически может быть записана лишь фурье (лаплас)-компонента функции формы спектра (производящая функция вибронного перехода) [1]. Само спектральное распределение выступает в теории лишь как фурье (лаплас)-образ производящей функции. При этом также может быть введен фактор Хуанга—Риса, который выражается через параметры примесного кристалла — константу вибронного взаимодействия и плотность колебаний, за счет которых осуществляется релаксация решетки. В том случае, если в ходе фотоионизации имеют место процессы 2 и 3, т. е. если релаксация осуществляется не по одной (дышащей) моде, параметр Хуанга—Риса, строго говоря, введен быть не может.

Непосредственное восстановление функции $f(\hbar\omega)$ из сечения фотоионизации невозможно, поскольку электронное сечение σ и ρ_{i0i} также неизвестно. Поступают одним из следующих способов.

В том случае, когда на низкочастотном краю сечения фотоионизации наблюдается отчетливо выраженная вибронная структура (в виде сглаженных ступенек) по ней определяют параметры актуального осциллятора (или небольшого их числа) [2].

Если — как это обычно бывает — подобная структура отсутствует, то, используя одноосцилляторную модель и аппроксимируя электронное сечение простой формулой Луковского [3], подбирают параметры модели таким образом, чтобы наилучшим способом описать температурную эволюцию сечения фотоионизации. Физическим основанием для подобной процедуры является тот факт, что температура изменяет функциональную зависимость лишь одной из функций, входящих в свертку (1), а именно — вибронной функции формы спектра. Подобная процедура была впервые применена в работе [4] и широко используется как простейшая.

В работе [5] предложен способ непосредственного определения $f(\hbar\omega)$ по температурной зависимости $\sigma(\hbar\omega)$, основанный на переходе из спектрального во временное представление (см. выше). Метод позволяет найти фактор Хуанга—Риса и энергию релаксации решетки для реального колебательного спектра примесного кристалла (если спектр известен, если же нет, то он может быть с известным приближением заменен на колебательный спектр кристалла-матрицы).

В таблице приведены энергии релаксации в расчете на один лиганд для ряда примесных полупроводниковых систем (n — число лигандов для данного соединения). Для двух систем, в которых релаксация решетки осуществляется практически по механизму 1, а именно, для $ZnS:Fe$ и $CdF_2:In$, указаны также значения фактора Хуанга—Риса S . Несмотря на неодинаковую точность определения энергии релаксации для систем, представленных в таблице, и заметный разброс значений, общая тенденция очевидна: энергия релаксации, равно как и фактор Хуанга—Риса, для $3d$ -ионов существенно меньше, нежели для других примесей. Этот результат может быть объяснен на основе механизма саморегуляции, предложенного для данного класса дефектов Халденем и Андерсеном [6] и Кикоиным и Флеровым [7]. Указанный механизм заключается в том, что вследствие сильного кулоновского взаимодействия в $3d$ -оболочке ее заряд в процессе фотоионизации остается практически неизменным, а изменение заряда осуществляется в основном за счет связей.

Кристалл	Примесь	E_{rel}/λ , мэВ	S	Литература
ZnS	Fe	63	6.7	[5]
ZnS	Cr	93		[8]
ZnSe	Cr	83		[8]
ZnTe	Cr	40		[8]
CdTe	Cr	40		[8]
CdF ₂	In	250	50—80	[7, 9]
AlGaAs	Se	188		[10]
AlGaAs	Te	188		[10]
AlGaAs	Si	298		[10]
AlGaAs	Sn	250		[10]
GaAsP	S	333		[10]
GaAsP	Te	145		[10]

Реакция лигандов на такое делокализованное изменение заряда (т. е. релаксация решетки) оказывается подавленной по сравнению с ситуацией, когда изменение заряда в процессе фотоионизации происходит в ядре примесного центра.

Таким образом, относительно слабая релаксация решетки при фотоионизации $3d$ -примесей является еще одним (насколько нам известно, ранее не упоминавшимся) подтверждением механизма саморегуляции, определяющего специфику этих глубоких примесей в полупроводниках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] R. Kubo, Y. Toyozava. *Progr. Theor. Phys.*, **13**, 160 (1955).
- [2] B. Monemar, L. Samuelsen. *Phys. Rev. B*, **18**, 809 (1978).
- [3] G. Lukovsky. *Sol. St. Commun.*, **3**, 299 (1965).
- [4] U. Piekara, J. M. Langer, B. Krukowska-Fulde. *Sol. St. Commun.*, **23**, 583 (1977).
- [5] А. В. Васильев, Г. М. Зингер, Ю. Б. Розенфельд, А. И. Рыскин. *ФТП*, **27**, 1305 (1992).
- [6] R. D. M. Haldane, P. W. Andersen. *Phys. Rev. B*, **13**, 2553 (1976).
- [7] V. N. Flerov, K. A. Kikoin. *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **9**, 1673 (1976).
- [8] J. M. Baranowsky. In: *Deep Centers in Semiconductors* (ed. by T. Pantelides), 691. N. Y. (1985).
- [9] J. E. Dmochowsky, J. M. Langer, Z. Kalinski, W. Jantsch. *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 1735 (1986).
- [10] D. Lang. In: *Deep Centers in Semiconductors* (ed. by T. Pantelides), 489. N. Y. (1985).

Редактор Т. А. Полянская

ФТП, том 27, вып. 8, 1993

СВЕТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ ШОТТКИ НА ПОРИСТОМ КРЕМНИИ

Л. В. Беляков, Д. Н. Горячев, О. М. Сресели, И. Д. Ярощецкий

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021, Санкт-Петербург, Россия

(Получено 22 декабря 1992 г. Принято к печати 24 декабря 1992 г.)

Введение. Пористый кремний (por-Si) привлекает внимание исследователей благодаря его интенсивному и широкому спектру фотолюминесценции в видимой области спектра [1]. Существенно меньшее внимание уделяется его фотоэлектрическим свойствам. В данной работе исследованы фотоэлектрические свойства пористого кремния в контакте с некоторыми металлами и рассмотрена корреляция их со спектрами фотолюминесценции.