

УДК 537.311.33:537.37

©1995

РЕКОМБИНАЦИЯ НОСИТЕЛЕЙ НА ПОДВИЖНЫХ ДЕФЕКТАХ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В.И.Беляевский, В.В.Свиридов

Воронежский государственный педагогический университет
(Поступила в Редакцию 23 мая 1994 г.
В окончательной редакции 21 декабря 1994 г.)

Предлагается феноменологическое описание захвата и рекомбинации носителей на дефектах с глубокими уровнями в полупроводниках. Для дефекта в каждом электронном состоянии записывается уравнение непрерывности, учитывающее диффузию и дрейф дефекта в кристаллическом потенциальном рельефе, а также сток в смежные состояния. На модельном примере показано, что для получения содержательных результатов, таких как температурная зависимость эффективной скорости электронных переходов на дефекте, достаточно весьма общих физических соображений о скорости стока в различных точках потенциального рельефа.

Известно, что ряд термоактивируемых процессов в полупроводниках, таких как диффузия точечных дефектов, скольжение и переползание дислокаций, может быть существенно ускорен при достаточно сильном возбуждении электронной подсистемы кристалла путем освещения или инжекции носителей [1-4]. Для объяснения эффекта было выдвинуто несколько моделей (например, [1,5-8]), большая часть которых сходится в том, что при захвате носителя дефект переходит в состояние, в котором заметно ниже потенциальные барьеры для перемещения дефекта в кристаллической решетке. В свою очередь электрические свойства дефектов могут зависеть от их подвижности. Так, в теории многофононного захвата носителей на глубокие центры [9-13] термофлуктуационное движение дефекта к некоторой оптимальной конфигурации, в которой скорость перехода максимальна, рассматривается как необходимая стадия процесса захвата.

Скорости многофононных безызлучательных переходов вычисляются различными способами, которые, давая близкие по смыслу результаты, отличаются деталями вычислений. Для доведения расчетов до более или менее замкнутых выражений чаще всего используются следующие упрощения [9,10]: а) приближение Кондона, согласно которому вероятность электронного перехода не зависит от конфигурации решетки; б) гармоническое приближение, согласно которому листы адиабатического потенциала представляют собой правильные параболоиды в конфигурационном пространстве; с) одномодовое

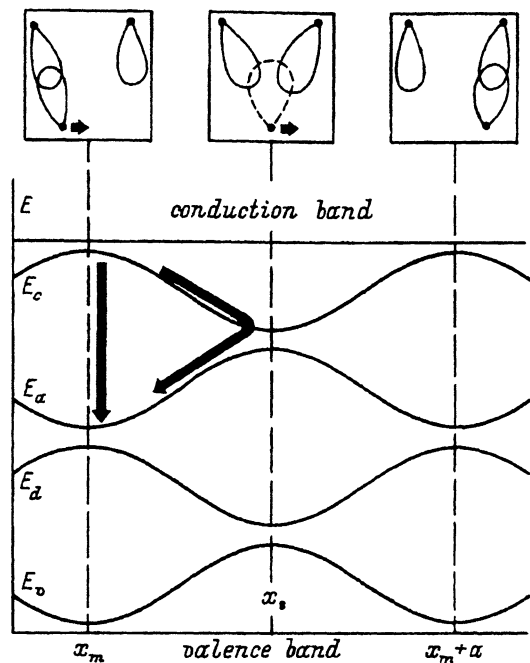


Рис. 1. Динамика переключения ковалентных связей при перемещении дефекта и соответствующая динамика электронных термов.

x — конфигурационная координата,
 1 — прямой безызлучательный переход, 2 — переход по эскалаторному механизму.

приближение, при котором единственная нормальная координата используется для описания как конфигурации дефекта, так и колебаний, возбуждаемых при электронном переходе.

Смысл и физические основания приближения Кондона, которое в настоящее время представляется слишком искусственным, достаточно широко обсуждаются в литературе [9–11]. В противоположность этому гармоническое приближение обычно принимается без какого-либо обсуждения, хотя истинная зависимость энергии электронного состояния, локализованного на дефекте, от конфигурации последнего практически никогда не известна. Нет также гарантии, что параболическая форма термов служит более или менее приемлемой аппроксимацией, поскольку область конфигурационного пространства, через которую в основном идут электронные переходы, может находиться довольно далеко от минимумов соответствующих термов (см., например, рис. 1, 2). Что касается одномодового приближения, то ясно, что единственная конфигурационная координата не может отразить все возможные варианты атомных смещений, если считать их независимыми. Такой подход подразумевает, что перемещение дефекта и возбуждаемые при безызлучательной рекомбинации на нем фононы связаны с одной и той же модой, что вовсе не обязательно. Попытки учета более, чем одной моды, известны [9], но приводят к слишком громоздким выражениям даже в простейших случаях (например, [14]).

Независимо от использования указанных и других приближений результаты, полученные в различных подходах, в главном различаются мало [9] и имеют ясный физический смысл. Примером может служить вывод о наличии активационного барьера для реакции захвата, к которому приводит и классическая схема, и теория термоактивационного

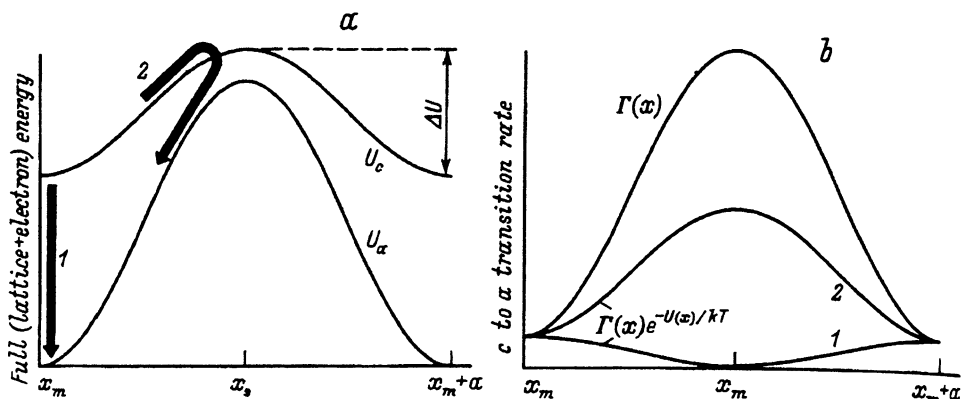


Рис. 2. а) Конфигурационные диаграммы перегиба в состояниях с и а: 1 и 2 — то же, что на рис. 1. б) Зависимость скорости Γ и взвешенной скорости $\Gamma e^{-U/kT}$ электронного перехода $c \rightarrow a$ от конфигурационной координаты: 1 — низкие температуры (преобладают прямые переходы), 2 — высокие температуры (преобладают эскалаторные переходы).

туннелирования Абакумова и др. [12], и подход Иоселевича и Рашбы [13], которые рассматривают безызлучательный захват как частный случай автолокализационного процесса. Другим общим результатом, не чувствительным к применяемой технике, является характерная зависимость скорости перехода Γ от энергии ΔE , передаваемой из электронной в фононную подсистему, и характерной фононной энергии $\hbar\omega$

$$\Gamma \sim \exp\left(-b \frac{\Delta E}{\hbar\omega}\right), \quad (1)$$

где b — некоторая константа. Происхождение закономерности (1) вполне понятно: вероятность испускания одновременно n фононов грубо пропорциональная α^n , где α — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. Учитывая, что в ковалентных полупроводниках $\alpha \ll 1$, $n \approx \Delta E/\hbar\omega$, получаем (1).

Очевидный вывод, который следует из инвариантности физической картины безызлучательного захвата относительно выбора исходных приближений, заключается в том, что эти приближения носят не принципиальный, а технический характер. Поэтому представляется полезным поставить и решить задачу о безызлучательном захвате, не используя одномодового, гармонического и кондоновского приближений. Такая постановка задачи о рекомбинации неравновесных носителей на подвижных структурных дефектах в полупроводниках и является целью настоящей работы. При этом мы следуем по пути, намеченному в [15], где в основу рассмотрения многофононной рекомбинации положено представление об изменении положения электронного уровня в запрещенной зоне при локальных колебаниях центра, и в нашей работе [8], в которой развиваются сходные представления о динамике электронных термов при движении дефекта. Затем задача решается для важного модельного случая.

1. Постановка задачи

Предположим, что все актуальные конфигурации дефекта можно задать набором конфигурационных координат Q_β , где $\beta = 1, 2, \dots, N$. Будем предполагать, что выполняется принцип Франка-Кондона, гласящий, что в момент электронного перехода конфигурационные координаты дефекта не изменяются [9,10]. Другими словами, эти координаты связаны с фоновыми модами, степень возбуждения которых почти не изменяется при электронном переходе.

Адиабатический потенциал дефекта в i -м электронном состоянии имеет вид

$$U_i(Q_\beta) = U_i^{(l)}(Q_\beta) + U_i^{(e)}(Q_\beta), \quad (2)$$

где $U_i^{(l)}$ — часть потенциала U_i , обусловленная деформацией решетки, $U_i^{(e)}$ — энергия электронных состояний, локализованных на дефекте. В одноэлектронном приближении $U_i^{(e)}$ равна просто сумме энергий заполненных электронных состояний дефекта.

Пусть в каждой точке конфигурационного пространства $\{Q_\beta\}$ известна вероятность перехода в единицу времени из i -го электронного состояния в j -е, $\Gamma_{ij}(Q_\beta)$, обусловленная взаимодействием с неактуальными для конфигурации дефекта фоновыми модами. Тогда для плотности вероятности $w_i(Q_\beta, t)$, если в момент времени t дефект в i -м электронном состоянии находится в конфигурации $\{Q_\beta\}$, имеет место уравнение непрерывности

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} = G_i + \sum_j \Gamma_{ij} w_j - \sum_j \Gamma_{ji} w_i - \text{div } J_i, \quad (3)$$

где $G_i(Q_\beta)$ — скорость появления дефекта в состоянии $\{i, Q_\beta\}$ «извне» (например, при захвате носителя непосредственно из объема кристалла, а не через другие состояния того же дефекта),

$$J_i(Q_\beta) = -\frac{kT}{\eta} \left\{ w_i \text{grad} \left(\frac{U_i}{kT} \right) + \text{grad } w_i \right\} \quad (4)$$

— поток вероятности, возникающий за счет диффузии и дрейфа дефекта в адиабатическом потенциале U_i , η — коэффициент вязкого трения.

Уравнения (3), (4) записаны в приближении высокой вязкости фоновго газа, который для дефекта является термостатом. Это позволяет пренебречь зависимостью w_i от скоростей \dot{Q}_β . Приближение высокой вязкости и вытекающие из него диффузионные уравнения достаточно широко используются в теории молекулярных реакций, в том числе для короткодействующих потенциалов межмолекулярного взаимодействия [16,17]. Другим обоснованием служат соображения о том, что столкновения дефекта и даже отдельного атома с фононами происходят с частотой, по крайней мере, не меньшей частоты решеточных колебаний [18,19]. Следовательно, можно считать, что релаксация скоростей \dot{Q}_β происходит достаточно быстро. Наконец, есть основания

полагать, что приближения высокой и низкой вязкости дают результаты, не различимые экспериментально [20].

В качестве примера, иллюстрирующего возможность получения содержательных результатов в рамках обсуждаемого подхода, рассмотрим задачу о рекомбинации через электронные состояния, локализованные на дислокациях.

Известно [21-23], что с дислокациями в ковалентных полупроводниках (Si, Ge, A^3B^5) связаны локализованные в ядре дислокации электронные состояния оборванных или сильно деформированных химических связей. Энергии этих состояний (E_d и E_a на рис. 1) лежат глубоко в запрещенной зоне. Кроме того, деформация связей вокруг дислокации обуславливает существование слабо локализованных мелких состояний (состояния v и c на рис. 1). В процессе перемещения дислокации, реализуемом через боковое движение дислокационных перегибов, некоторые «хорошие» связи разрываются, а оборванные восстанавливаются. При этом происходят соответствующие изменения энергий этих состояний. В результате с учетом взаимодействия, не допускающего действительного пересечения электронных термов, динамика последних при перемещении перегиба на период трансляции вдоль дислокационной линии должна выглядеть [6,24] так, как показано на рис. 1. Добавляя решеточную часть $U^{(l)}$ энергии перегиба, получаем для него естественную одномерную конфигурационную диаграмму (рис. 2), аргумент x которой очевидно характеризует смещение перегиба вдоль дислокационной линии. Диаграмма может быть периодически продолжена как вправо, так и влево.

Для перехода $c \rightarrow a$ число сбрасываемых фононов n велико во всем конфигурационном пространстве, за исключением, может быть, окрестности седловой точки $x = x_s$, где $\Delta E = E_c - E_a$ достигает минимального значения. Поэтому эти переходы должны идти быстрее всего в седловой конфигурации. Правда, в этой конфигурации перегиб бывает достаточно редко, поскольку его полная энергия в ней максимальна. Возникает вопрос о конкуренции двух каналов дальнейшей релаксации электрона, захваченного в мелкое состояние c : 1) прямой переход в состояние a в той же точке конфигурационного пространства; 2) «эскалаторный» переход, когда перегиб за счет термической активации «подвозит» захваченный электрон к той точке конфигурационного пространства (в данном случае, $x = x_s$), где максимальна скорость дальнейших переходов.

Сформулируем теперь математическую задачу. Пусть вероятность перехода в единицу времени из состояния c в состояние a есть некоторая функция $\Gamma(x)$. Из приведенных выше соображений следует, что она периодична вдоль дислокационной линии, что она имеет максимумы вблизи седловых, а минимумы — у равновесных конфигураций перегиба, наконец, что ее максимальные и минимальные значения могут различаться на несколько порядков (рис. 2). Вместо введения постоянного генерационного слагаемого в уравнение (3) будем считать, что в момент $t = 0$ электрон захватывается в состояние c при конфигурации перегиба $x = 0$. Наконец, предположим, что переход $c \rightarrow a$ является узким местом рекомбинационного канала (в противном случае вычисление его эффективной скорости не было бы актуальным). Это дает возможность пренебречь обратным переходом $a \rightarrow c$.

Благодаря сделанным предположениям задача (3), (4) сводится к одному уравнению

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{kT}{\eta} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{du}{dx} w + \frac{\partial w}{\partial x} \right\} - \Gamma w \quad (5)$$

с начальным и граничным условиями

$$w(t' = 0, x) = \delta(x), \quad w(t, x = \pm\infty) = 0. \quad (6)$$

Здесь $u(x) = u(x)/kT$ — адиабатический потенциал перегиба в состоянии s , нормированный на температуру, $w(x, t)$ — плотность вероятности обнаружения перегиба в конфигурации x в этом состоянии спустя время t после захвата электрона. Эффективное время жизни в этом состоянии (т.е. среднее время электронного перехода $s \rightarrow a$) можно определить как

$$\tau = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\infty} dt w(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Theta(x), \quad (7)$$

где $\Theta(x)dx$ имеет смысл среднего времени, проводимого перегибом до перехода в конфигурациях от x до $x + dx$. Функция Θ удовлетворяет уже обыкновенному дифференциальному уравнению

$$(\Theta' + u'\Theta)' - \gamma\Theta = 0 \quad (8)$$

с граничными условиями

$$\Theta(-0) = \Theta(+0), \quad \Theta'(-0) - \Theta'(0) = \frac{\eta a}{kT}, \quad \Theta(\pm\infty) = 0. \quad (9)$$

Здесь и далее штрихи означают дифференцирование по безразмерной координате $\xi = x/a$, a — период трансляции по конфигурационной координате x , который мы для простоты будем полагать совпадающим с периодом решетки,

$$\gamma = \frac{\eta a^2}{kT} \Gamma \ll 1 \quad (10)$$

— безразмерная скорость рекомбинации. Оценка ее величины в (10) основана на следующих соображениях. В соответствии с соотношением Эйнштейна ($kT/\eta = D_0$), где D_0 имеет смысл коэффициента диффузии в отсутствие потенциального рельефа, т.е. предэкспоненциального множителя в аррениусовском представлении коэффициента диффузии дефекта. Согласно стандартной оценке [25], $D_0 \sim \omega_D a^2$, где ω_D — дебаевская частота. Отсюда следует, что $\gamma \sim \Gamma/\omega_D$. Поскольку скорость Γ безызлучательной рекомбинации, вызванной электрон-фононным взаимодействием, вряд ли может превышать дебаевскую частоту, то и $\gamma \ll 1$ даже в конфигурации, в которой достигает максимума.

Таким образом, проблему рекомбинации на перегибе мы свели к математической задаче (8), (9) с учетом оценки (10).

2. Решение модельной задачи

Будем искать решение уравнения (8) в виде

$$\Theta_{\pm}(\xi) = \Theta_0 \exp\left(-u(\xi) + \int_0^{\xi} e^{u(\xi)} \psi_{\pm}(\xi) d\xi\right), \quad (11)$$

где Θ_+ и Θ_- — решения (8) соответственно при $\xi > 0$ и $\xi < 0$, а

$$\Theta_0 = \frac{\eta a}{kT(\psi_-(0) - \psi_+(0))}, \quad (12)$$

при этом выполняются первые два из граничных условий (9).

Для новых неизвестных $\psi_{\pm}(\xi)$ получается уравнение Риккати

$$\psi'_{\pm} = \gamma(\xi)e^{-u(\xi)} - e^{u(\xi)} \psi_{\pm}^2. \quad (13)$$

Уравнение (8) имеет периодические коэффициенты. Поэтому в силу теоремы Флоке [26] его решение должно иметь вид

$$\Theta(\xi) = f(\xi)e^{-p\xi}, \quad (14)$$

где $f(\xi)$ — некоторая периодическая функция с тем же периодом, что и коэффициенты уравнения (8), p — некоторая константа. Уравнение (14) совместимо с (11), только если функции ψ_{\pm} также периодичны по ξ

$$\psi_{\pm}(\xi + 1) = \psi_{\pm}(\xi). \quad (15)$$

Условие (15) необходимо для отбора физических решений уравнения Риккати (13) из всех возможных. Их оказывается два. Действительно, общее решение уравнения Риккати есть дробно-линейная функция от постоянной интегрирования [27]. Это, в частности, означает, что

$$\psi(1) = \frac{G + H\psi(0)}{1 + F\psi(0)}, \quad (16)$$

где F, G, H — функционалы от коэффициентов уравнения (13). Для периодических решений $\psi(1) = \psi(0)$, отсюда следует, что

$$\psi_{\text{periodic}}(0) = \frac{1}{2} \left[H - 1 \pm \sqrt{(H - 1)^2 + 4G/F} \right]. \quad (17)$$

Далее, F, G и H все положительны. Действительно, заметим, что если

$$\psi(0) \geq 0, \quad \text{то} \quad \psi(1) > 0, \quad (18)$$

так как $\psi'|_{\psi=0} = \gamma e^{-u} > 0$; другими словами, никакое решение (13) не может стать отрицательным с ростом ξ . При $\psi(0) = 0$ и $\psi(0) = +\infty$ условие (18) требует $G > 0$ и $H/F > 0$. Кроме того, $G/H > 0$, иначе

существовало бы такое $\psi(0) = -G/H \geq 0$, что $\psi(1) = 0$, а это противоречит условию (18). Следовательно, F , G и H обязаны быть положительными. Отсюда следует, что, во-первых, периодических решений ровно два и, во-вторых, что одно из них везде положительно (знак плюс в (17)), а второе — везде отрицательно. Для выполнения последнего из граничных условий (9) необходимо отождествить первое с ψ_- , а второе — с ψ_+ .

Явный вид искомых функций $\psi_{\pm}(\xi)$ можно получить, используя малость безразмерной скорости рекомбинации. Положим

$$\gamma(\xi)e^{-u(\xi)} = \kappa^2 \left(\frac{\gamma(\xi)e^{-u(\xi)}}{\kappa^2} \right), \quad (19)$$

$$\psi_{\pm}(\xi) = \sum_{i=1}^{\infty} \kappa^i \psi_i^{\pm}(\xi), \quad (20)$$

где константа κ выбирается так, чтобы среднее значение величины в скобках было равно единице.

$$\kappa = \sqrt{\langle \gamma e^{-u} \rangle}. \quad (21)$$

Здесь и далее $\langle \dots \rangle$ означает усредненное по периоду трансляции.

Подставляя теперь (20) в (13) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях κ , получаем рекуррентную систему дифференциальных уравнений для $\psi_i^{\pm}(\xi)$, интегрирование которой дает

$$\psi_1^{\pm}(\xi) = \psi_{10}^{\pm} = \text{const},$$

$$\psi_2^{\pm}(\xi) = \psi_{20}^{\pm} + \int_0^{\xi} d\xi \left(\frac{\gamma(\xi)e^{-u(\xi)}}{\langle \gamma e^{-u} \rangle} - e^{u(\xi)} (\psi_{10}^{\pm})^2 \right), \quad (22)$$

$$\psi_i^{\pm}(\xi) = \psi_{i0}^{\pm} - \sum_{m=1}^{i-1} \int_0^{\xi} d\xi e^{u(\xi)} \psi_m^{\pm}(\xi) \psi_{i-m}^{\pm}(\xi), \quad i > 2.$$

Постоянные интегрирования ψ_{i0}^{\pm} определяются из условия периодичности (15), из которого следует, что $\psi_i^{\pm}(1) = \psi_i^{\pm}(0)$. При $i = 2$ и 3 это условие с учетом выбора (21) дает

$$\psi_1^{\pm}(\xi) = \psi_{10}^{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{\langle e^u \rangle}}, \quad (23)$$

$$\psi_{20}^{\pm} = \frac{1}{2} - \left\langle \frac{e^{u(\xi)}}{\langle e^u \rangle} \int_0^{\xi} \frac{\gamma(\xi)e^{-u(\xi)}}{\langle \gamma e^{-u} \rangle} d\xi \right\rangle. \quad (24)$$

Остальные величины ψ_{i0}^{\pm} могут быть вычислены аналогично, но особой необходимости в этом нет. Действительно, из (22)–(24) можно сделать вывод о том, что по порядку величины $|\psi_{i+1}^{\pm}/\psi_i^{\pm}| \sim \langle e^u \rangle^{1/2}$. Отсюда следует, что при условии

$$\varepsilon = \kappa \sqrt{\langle e^u \rangle} = \sqrt{\langle \gamma e^{-u} \rangle \langle e^u \rangle} \ll 1 \quad (25)$$

ряд (20) быстро сходится, что дает возможность ограничиться в нем первыми членами. Условие (25) выполняется при преобладании эскалаторного механизма рекомбинации, когда большая скорость перехода в седловой конфигурации перевешивает малую вероятность ее достижения, т.е. когда взвешенная скорость перехода $\Gamma e^{-U/kT}$ максимальна в седловой позиции (рис. 2,б). В этом случае

$$\langle e^u \rangle \sim e^{u(x_s)}, \quad \langle \gamma e^{-u} \rangle \sim \gamma(x_s) e^{-u(x_s)}, \quad \varepsilon \sim \sqrt{\gamma(x_s)} \ll 1. \quad (26)$$

С понижением температуры поведение взвешенной скорости перехода начинает определяться бoльцмановским множителем e^{-u} , и тогда

$$\langle \gamma e^{-u} \rangle \sim \gamma(x_m) e^{-u(x_m)}, \quad \varepsilon \sim \sqrt{\gamma(x_m) e^{\Delta u}} > \sqrt{\gamma(x_s)}, \quad (27)$$

где x_m — конфигурация, соответствующая минимуму потенциального рельефа, $\Delta u = u(x_s) - u(x_m) = \Delta U/kT$ (рис. 2). В конечном счете параметр расходимости ε может стать и больше единицы, но физически условия (27) все равно соответствуют преобладанию обычного механизма рекомбинации, когда подвижность дефекта не играет роли.

Если теперь ограничиться в разложении (20) первым слагаемым и вычислить определенное формулой (7) эффективное время перехода τ , то в этом приближении получим

$$\tau = \frac{\langle e^{-u} \rangle}{\langle \Gamma e^{-u} \rangle}. \quad (28)$$

3. Обсуждение результатов

Если задачи о рекомбинации в постановке (3) и (4) несет информацию об эффективной скорости переходов между различными электронными состояниями дефекта, что дает возможность в конечном счете определить темп рекомбинации. Кроме того, оно характеризует эффективную подвижность дефекта при заданном уровне возбуждения электронный подсистемы, определяющем преимущественное электронное состояние дефекта и, следовательно, высоту потенциальных барьеров для его перемещения. Таким образом, подвижность и рекомбинационная активность дефектов в полупроводниках оказываются взаимосвязанными, что в предлагаемой постановке задачи о рекомбинации выглядит совершенно естественным.

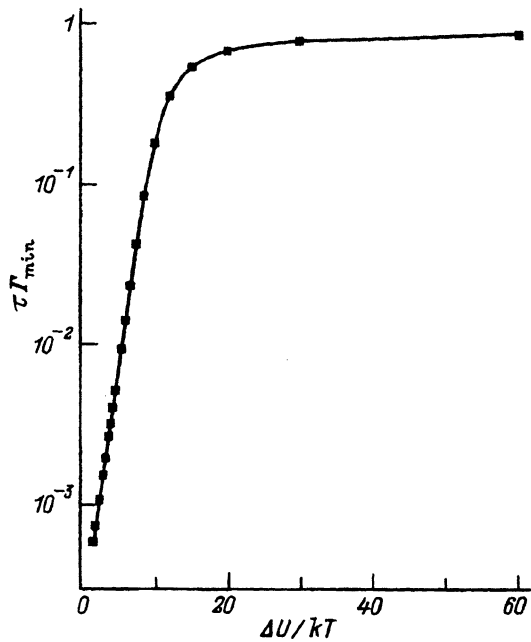


Рис. 3. Температурная зависимость среднего времени перехода $s \rightarrow a$ при синусоидальной зависимости U и $\ln \Gamma$ от конфигурационной координаты.

Квадраты — численное решение уравнения (12), сплошная линия — формула (28). $\Gamma_{\max}/\Gamma_{\min} = e^{10}$.

Формула (28) предсказывает не зависящую от температуры скорость (или сечение) перехода носителя на глубокий уровень подвижного дефекта при низких температурах $T < T^*$ и переход к термоактивационному поведению при высоких температурах, с энергией активации ΔU (рис. 3). Температура перехода определяется соотношением

$$kT^* = \frac{\Delta U}{\ln(\Gamma_{\max}/\Gamma_{\min})}, \quad (29)$$

где Γ_{\min} и Γ_{\max} — минимальная и максимальная скорости электронного перехода, достигаемые в доступной области конфигурационного пространства. Такое поведение согласуется как с экспериментами по захвату на точечные дефекты с глубокими уровнями, так и с теоретическими результатами (см., например, [9-13, 28]), однако получено с помощью менее изощренных средств. Это свидетельствует о том, что результат (28) отражает действительно фундаментальные закономерности процессов захвата и рекомбинации и имеет более широкую область применимости, чем можно было бы ожидать, исходя из использованных при его выводе предположений. Например, он физически разумен ($\tau \sim \Gamma^{-1}(x_m)$) даже при низких температурах, когда разложение (20) плохо или вообще не сходится. Это же подтвердилось и прямой проверкой на конкретном примере: уравнение (13) решалось численно в предположении, что

$$u(\xi) = \frac{\Delta U}{kT} \sin^2 \pi \xi, \quad \Gamma(\xi) = \Gamma_{\min} \left(\frac{\Gamma_{\max}}{\Gamma_{\min}} \right)^{\sin^2 \pi \xi}, \quad (30)$$

после чего вычислялось время перехода в соответствии с (11) и (7). При всех температурах получено очень хорошее совпадение с результатом расчетов по формуле (28) (рис. 3).

Использованный при решении модельной задачи метод является, насколько нам известно, оригинальным и может оказаться полезным при решении других проблем теории твердого тела. Так, он дает возможность написать точную асимптотику решения важной для теории внутренней подвижности в кристаллах задачи о диффузии в периодическом потенциальном рельефе [25], которая сводится к уравнению (5) без рекомбинационного члена $-\Gamma w$. Для изображения по Лапласу, $W(x, s)$, искомой плотности вероятности $w(x, t)$ получается задача (7), (8), в которой место Γ занимает спектральный параметр s . Выписывая для $W(x, s)$ разложение (20), ограничиваясь в нем первым слагаемым и обращая преобразование Лапласа, имеем при $t \gg a^2/D$

$$w(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \frac{e^{-U(x)/kT}}{\langle e^{U/kT} \rangle} \exp \left\{ -\frac{(x + h(x))^2}{4Dt} \right\}, \quad (31)$$

где

$$D = D_0 \frac{1}{\langle e^{U/kT} \rangle \langle e^{-U/kT} \rangle}, \quad (32)$$

а

$$h(x) = \text{sgn}(x) \int_0^x \left\{ \frac{e^{U(x)/kT}}{\langle e^{U/kT} \rangle} - 1 \right\} dx \quad (33)$$

описывает задержку блуждающей частицы перед потенциальными барьерами. Отметим, что если выражение (32) для коэффициента диффузии с недавних пор известно в литературе [29,30], то тонкая структура решения, определяемая формулами (31), (33), нами, по-видимому, получена впервые. Она оказывается существенной, например, если потенциал $U(x)$ принять не периодической, а случайной стационарной функцией, описывающей неупорядоченное твердое тело [31].

Метод может быть также применен к исследованию распространения электронов и волн различной природы в неоднородных средах постольку, поскольку возникающие при этом задачи допускают сведение к проблеме диффузии в потенциале [32,33].

Список литературы

- [1] Kimerling L.C. Solid State Electron. **21**, 11/12, 1391 (1978)
- [2] Dzhafarov T.D. Phys. Stat. Sol. (a) **79**, 11 (1983).
- [3] Kusters K.H., Alexander H. Physica **BC 116**, 1-3, 594 (1983).
- [4] Belyavsky V.I., Kapustin Yu.A., Sviridov V.V. Defects and Diffusion in Solids. **103-105**, 265 (1993).
- [5] Lang D.V. Ann. Rev. Mater. Sci. **12**, 377 (1982).
- [6] Шейнкман М.К. Письма в ЖЭТФ **38**, 6, 278 (1983).
- [7] Sumi H. Phys. Rev. **B 29**, 8, 4616 (1984).
- [8] Белявский В.И., Даринский Б.М., Свиридов В.В. ФТТ **27**, 4, 1088 (1985).
- [9] Стоунхэм А.М. Теория дефектов в твердых телах. М. (1978).
- [10] Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М. (1986).
- [11] Бургуэн Ж., Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках. Экспериментальные аспекты. М. (1985).
- [12] Абакумов В.Н., Меркулов И.А., Перель В.И., Ясиевич И.Н. ЖЭТФ **89**, 4, 1472 (1985).

- [13] Иоселевич А.С., Рашба Э.И. *ЖЭТФ* **88**, 5, 1873 (1985).
- [14] Белоусов А.В., Коварский В.А., Чеботарь В.Н., Пишкова Т.В. Кинетические эффекты в молекулярных и твердотельных системах во внешних полях. Кишинев (1990). С. 102-108.
- [15] Абакумов В.Н., Курносова О.В., Пахомов А.А., Ясиевич И.Н. XIII Всесоюз. совещ. по теории полупроводников. Тез. докл. Ереван (1987). С. 4.
- [16] Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках. М. (1986).
- [17] Овчинников А.А., Тимашев С.Ф., Белый А.А. Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов. М. (1986).
- [18] Nardelli G.F., Reatto L. *Physica* **31**, 4, 541 (1965).
- [19] Brandt E.H. *J. Phys. Cond. Matter.* **1**, 50, 10003 (1989).
- [20] Mann E. *Phys. Stat. Sol. (h)* **111**, 2, 541 (1982).
- [21] Shokley W. *Phys. Rev.* **91**, 1, 228 (1953).
- [22] Ossipyan Yu.A. *Cryst. Res. Technol.* **16**, 2, 239 (1981).
- [23] Jones R. *Phil. Mag.* **B42**, 2, 213 (1980).
- [24] Тележкин В.А. Теория радиационных дефектов в полупроводниках. Киев (1988).
- [25] Маннинг Дж. Кинетика диффузии атомов в кристаллах. М. (1971).
- [26] Якубович В.А., Старжинский В.М. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. М. (1972).
- [27] Матвеев Н.М. Методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. М. (1963).
- [28] Henry C.H., Lang D.V. *Phys. Rev.* **B15**, 2, 989 (1977).
- [29] Festa R., Galleani d'Agliano E. *Physica* **90A**, 229 (1978).
- [30] Gunther L., Revzen M., Ron A. *Physica* **95A**, 367 (1979).
- [31] Свиридов В.В. *ФТТ* **33**, 5, 1569 (1991).
- [32] Schneider T., Politi A., Badii R. *Phys. Rev. A.* **34**, 3, 2505 (1986).
- [33] Фаткулин Н.Ф. *ЖЭТФ* **98**, 6, 2030 (1990).