

НЕРАВНОВЕСНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДЕФЕКТОВ ПО ЭНЕРГИЯМ КОЛЕБАНИЙ ПРИ МНОГОФОНОННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

И. Н. Ясиевич, В. М. Чистяков

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

(Получена 29.04.1992. Принята к печати 7.05.1992)

Методом численного моделирования найдено неравновесное распределение дефектов по энергиям колебаний, устанавливающееся в стационарных условиях за счет многофононной рекомбинации электронно-дырочных пар. При этом предполагается, что концентрация неравновесных носителей контролируется внешним источником возбуждения и рекомбинационными процессами (включая в себя излучательные и оже-процессы). Показано, что в полупроводнике *n*-типа при увеличении концентрации неравновесных дырок экспоненциально нарастает «хвост» функции распределения, что в эксперименте может проявиться как уменьшение энергии активации при рекомбинационно-стимулированном отжиге дефектов.

В процессах многофононной рекомбинации носителей через дефекты основную роль обычно играет взаимодействие электронов (дырок) с локальными колебаниями. Каждый акт многофононной рекомбинации электронно-дырочной пары сопровождается передачей дефекту энергии порядка ширины запрещенной зоны ϵ_g . Естественно, что в ходе рекомбинации должно устанавливаться распределение дефектов по энергиям локальных колебаний, существенно отличающееся от равновесного. Впервые это было отмечено в работе [1]. В работах [2, 3] выписана система кинетических уравнений для нахождения функции распределения дефектов по энергиям колебаний и рассмотрены асимптотические решения соответствующей системы уравнений в предельных случаях.

Этот подход позволяет найти общий характер спада распределения при $\epsilon \gg \epsilon_g$. Однако он не позволяет установить поведение решения при энергиях порядка ϵ_g , а именно этой области соответствуют энергия активации практически всех дефектных реакций и энергия активации для диффузии дефектов. Для нахождения функции распределения при «средних» энергиях необходимо численное решение системы кинетических уравнений.

Данная работа посвящена построению методики нахождения численного решения соответствующих уравнений. Конкретный расчет выполнен применительно к дефектам *E3* в GaAs. Найденные функции распределения использованы для интерпретации результатов эксперимента по рекомбинационно-стимулированному отжигу данного дефекта.

1. Система кинетических уравнений для функции распределения дефектов по энергии колебаний

Следуя работе [2], вводим в рассмотрение две функции распределения: $f_1(E)$ и $f_2(E)$, которые описывают распределение дефектов двух различных зарядовых состояний по энергиям колебаний E .

Пусть состоянию 1 отвечает центр со связанным электроном, а состоянию 2 — центр без электрона. При многофононной рекомбинации в стационарных условиях система уравнений для определения функций f_1 и f_2 имеет вид

$$nC_n(E - \varepsilon_{Tc}) f_2(E - \varepsilon_{Tc}) \rho_2(E - \varepsilon_{Tc}) - [pC_p(E) + e_n(E)] \rho_1(E) f_1(E) + \int_0^{\infty} W_p(E + \varepsilon_{Tv} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_2(E + \varepsilon_{Tv} + \varepsilon) f_2(E + \varepsilon_{Tv} + \varepsilon) d\varepsilon + \frac{d}{dE} \left\{ B_1(E) \left[f_1(E) + kT \frac{df_1}{dE} \right] \right\} = 0, \quad (1)$$

$$pC_p(E - \varepsilon_{Tv}) f_1(E - \varepsilon_{Tv}) \rho_1(E - \varepsilon_{Tv}) - [nC_n(E) + e_p(E)] \rho_2(E) f_2(E) + \int_0^{\infty} W_n(E + \varepsilon_{Tc} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_1(E + \varepsilon_{Tc} + \varepsilon) f_1(E + \varepsilon_{Tc} + \varepsilon) d\varepsilon + \frac{d}{dE} \left\{ B_2(E) \left[f_2(E) + kT \frac{df_2}{dE} \right] \right\} = 0. \quad (2)$$

Здесь n и p — концентрации избыточных носителей (электронов и дырок соответственно); ε_{Tc} — термическая энергия ионизации центра в состоянии 1 с вылетом электрона; ε_{Tv} — термическая энергия ионизации центра в состоянии 2 с вылетом дырки; $\rho_{1, 2}(E)$ — плотность колебательных состояний дефекта; $W_n(E; \varepsilon)$ — вероятность эмиссии электрона с энергией ε дефектом в состояние 1 с колебательной энергией E ; $W_p(E; \varepsilon)$ — соответствующая вероятность эмиссии дырки из состояния 2.

Скорости эмиссий электронов и дырок определяются этими вероятностями:

$$e_n(E) = \int_0^{\infty} W_n(E; \varepsilon) d\varepsilon; \quad (3)$$

$$e_p(E) = \int_0^{\infty} W_p(E; \varepsilon) d\varepsilon. \quad (4)$$

Коэффициенты захвата электронов и дырок $C_n(E)$ и $C_p(E)$, характеризующие скорость захвата соответственно электронов и дырок в единице объема дефектом с энергией колебаний E , определяются соотношениями

$$C_n(E) = \int_0^{\infty} W_n(E + \varepsilon_{Tc} + \varepsilon; \varepsilon) F_n(\varepsilon) \frac{\rho_1(E + \varepsilon_{Tc} + \varepsilon)}{\rho_2(E)} d\varepsilon; \quad (5)$$

$$C_p(E) = \int_0^{\infty} W_p(E + \varepsilon_{Tv} + \varepsilon; \varepsilon) F_p(\varepsilon) \frac{\rho_2(E + \varepsilon_{Tv} + \varepsilon)}{\rho_1(E)} d\varepsilon, \quad (6)$$

где $F_n(\varepsilon)$ и $F_p(\varepsilon)$ — функции распределения по энергии свободных электронов и дырок, нормированные условиями

$$\int_0^{\infty} \bar{\rho}_{n,p}(\varepsilon) F_{n,p}(\varepsilon) d\varepsilon = 1,$$

в которых $\bar{\rho}_{n,p}(\varepsilon)$ — плотности состояний в зоне проводимости и в валентной зоне.

Формулы (3) и (4) получены в приближении, что характерная энергия свободных носителей существенно меньше рассматриваемой энергии колебаний E .

Предполагается, что концентрация носителей n и p существенно отличаются от равновесной в силу существования внешнего источника генерации. При этом значения n и p при высоком уровне накачки могут контролироваться излучательными или оже-рекомбинационными процессами.

Дифференциальные члены в уравнениях (1), (2) определяют релаксацию энергии возбуждения в колебательной системе дефекта за счет взаимодействия с решеткой (распад локальных фононов на решеточные за счет ангармонизма). Коэффициенты динамического трения $B_{1, 2}(E)$ связаны с временем энергетической релаксации $\tau_{1, 2}$ соотношениями

$$B_i(E) = E\rho_i(E)/\tau_i.$$

Систему (1), (2) следует дополнить граничными условиями, соответствующими равенству нулю потоков в пространстве энергий при $E=0$ и $E=\infty$,

$$\left(f_i(E) + kT \frac{df_i(E)}{dE} \right)_{E=0, \infty} = 0, \quad i = 1, 2. \quad (7)$$

Функции распределения f_1 и f_2 нормированы условиями

$$\int_0^{\infty} f_1(E) \rho_1(E) dE + \int_0^{\infty} f_2(E) \rho_2(E) dE = 1. \quad (8)$$

Как показано в [2, 4], характерная энергия свободных носителей, вылетающих при ионизации дефекта, много меньше термических энергий ионизации ε_{Tc} , ε_{Tv} , поэтому интегральные члены в уравнениях (1), (2) могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} W_p(E + \varepsilon_{Tv} + \varepsilon; \varepsilon) \rho_2(E + \varepsilon_{Tv} + \varepsilon) f_2(E + \varepsilon_{Tv} + \varepsilon) d\varepsilon = \\ & = e_p(E + \varepsilon_{Tv}) \rho_2(E + \varepsilon_{Tv}) f_2(E + \varepsilon_{Tv}) + \\ & + \frac{d}{dE} \left\{ \frac{(E + \varepsilon_{Tv}) \rho_2(E + \varepsilon_{Tv}) f_2(E + \varepsilon_{Tv}) e_p(E + \varepsilon_{Tv})}{\tau_p(E + \varepsilon_{Tv}) p C_p(E)} \right\}. \end{aligned}$$

Аналогично преобразуется и второй интеграл.

Подставляя эти выражения в уравнения (1), (2), приходим к системе для функций распределения f_1 и f_2

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dE} \left\{ B_1(E) \left[f_1(E) + kT \frac{df_1}{dE} \right] \right\} + \\ & + \frac{d}{dE} \left\{ \frac{(E + \varepsilon_{Tv}) \rho_2(E + \varepsilon_{Tv}) f_2(E + \varepsilon_{Tv}) e_p(E + \varepsilon_{Tv})}{\tau_p(E + \varepsilon_{Tv}) p C_p(E)} f_2(E + \varepsilon_{Tv}) \right\} + \\ & + e_p(E + \varepsilon_{Tv}) \rho_1(E + \varepsilon_{Tv}) f_2(E + \varepsilon_{Tv}) + \\ & + n C_n(E - \varepsilon_{Tc}) \rho_2(E - \varepsilon_{Tc}) f_2(E - \varepsilon_{Tc}) - [p C_p(E) + e_n(E)] \times \\ & \times \rho_1(E) f_1(E) = 0, \quad (9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dE} \left\{ B_2(E) \left[f_2(E) + kT \frac{df_2}{dE} \right] \right\} + \\
& + \frac{d}{dE} \left\{ \frac{(E + \varepsilon_{Tc}) \rho_1(E + \varepsilon_{Tc}) f_1(E + \varepsilon_{Tc}) e_n(E + \varepsilon_{Tc})}{\tau_n(E + \varepsilon_{Tc}) n C_n(E)} f_1(E + \varepsilon_{Tc}) \right\} + \\
& + e_n(E + \varepsilon_{Tc}) \rho_2(E + \varepsilon_{Tc}) f_1(E + \varepsilon_{Tc}) + \\
& + p C_p(E - \varepsilon_{Tv}) \rho_1(E - \varepsilon_{Tv}) f_1(E - \varepsilon_{Tv}) - \\
& - [n C_n(E) + e_p(E)] \rho_2(E) f_2(E) = 0.
\end{aligned} \tag{10}$$

Система (9), (10) является системой дифференциально-разностных уравнений второго порядка. К ней добавляются краевые условия (5) и условие нормировки (6).

2. Построение решения

К сожалению, в настоящее время нет хорошо разработанной математической теории этих уравнений. Существует целый ряд работ, посвященных уравнениям с запаздывающим аргументом [5, 6], однако методы, применяемые в этих работах, не могут быть использованы для нашей системы, которая содержит как запаздывающий, так и опережающий аргументы и переменные коэффициенты. Правда, методами, изложенными в [6], может быть доказано существование решения задачи Коши, однако работы, в которых бы обсуждалось решение краевой задачи для подобной системы, нам не известны. Здесь мы будем рассматривать нашу систему для простейшей физической модели, для которой коэффициенты являются кусочно-постоянными.

Будем предполагать, что коэффициенты захвата и эмиссии имеют следующий вид:

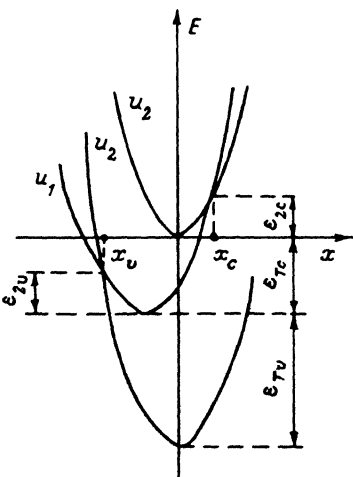
$$\begin{aligned}
C_n(E) &= C_n^0 \Theta(E - \varepsilon_{2c}), \quad C_p(E) = C_p^0 \Theta(E - \varepsilon_{2v}); \\
e_n(E) &= e_n^0 \Theta(E - \varepsilon_{Tc} - \varepsilon_{2c}), \quad e_p(E) = e_p^0 \Theta(E - \varepsilon_{Tv} - \varepsilon_{2v}).
\end{aligned} \tag{11}$$

Здесь $\Theta(x)$ — функция, равная нулю при $x < 0$ и единице при $x > 0$.

Эта модель соответствует классическому приближению для описания многофононных переходов. В рамках этого приближения вероятность многофононных переходов равна нулю в туннельной области $E < \varepsilon_{2c}, \varepsilon_{2v}$; $\varepsilon_{2c}, \varepsilon_{2v}$ — активационные энергии, при которых захват становится возможным в рамках классического приближения для колебаний дефекта (рис. 1) [3-5; 7, 8].

В рамках этой модели вероятность $W_n(E; \varepsilon)$ эмиссии электрона с энергией ε дефектом с энергией колебания E при использовании для описания взаимодействия электрона с дефектом модели потенциала нулевого радиуса определяется выражением [3]

Рис. 1. Конфигурационная диаграмма: U_1, U_2 — адиабатические потенциалы для колебаний дефектов в состояниях 1 и 2; $\varepsilon_{Tc}, \varepsilon_{Tv}$ — электронная и дырочная энергии термической ионизации; $\varepsilon_{Tc} + \varepsilon_{Tv} = \varepsilon_g$ — ширина запрещенной зоны; $\varepsilon_{2c}, \varepsilon_{2v}$ — активационные энергии для многофононного захвата в рамках классического приближения; x_c, x_v — значения конфигурационных координат, при которых электронный уровень выходит в зону проводимости и в валентную зону соответственно.



$$W_n(E, \varepsilon) = \frac{\omega_1}{2\pi} \frac{3}{2} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{[\varepsilon_m(E)]^{3/2}} \exp \left[- \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_m(E)} \right]^{3/2} \right],$$

$$\varepsilon_m(E) = \left[\frac{9\beta}{16} (\hbar\omega_2)^2 (E - \varepsilon_2 - \varepsilon_T) \right]^{1/3} \quad (12)$$

при

$$E \gg \varepsilon_{2c} + \varepsilon_{Tc} + ((\hbar\omega_2)^2 \varepsilon_{2c})^{1/3},$$

где $\omega_{1, 2}$ — частоты колебаний ядра в состояниях 1 и 2. При этом использовано одномодовое приближение, в рамках которого плотность колебательных состояний

$$\rho_i(E) = \frac{1}{\hbar\omega_i}, \quad i = 1, 2.$$

Энергия ε_m определяет характерную энергию вылетевших электронов. Легко видеть, что для нее выполнено условие: $kT \ll \varepsilon_m \ll \varepsilon_{Tc}$. Безразмерный параметр β , определяемый соотношением $\beta\varepsilon_{2c} = (1 - \beta)\varepsilon_{Tc}$ [7], играет роль константы связи электрон-фононного воздействия.

Из (3) с учетом (12) следует, что в рассматриваемой области энергий скорость эмиссии электронов

$$e_n(E) = \frac{\omega_1}{2\pi}.$$

Аналогичные выражения можно использовать и для вероятности выброса дырки:¹

$$e_p(E) = \frac{\omega_2}{2\pi}.$$

Именно эти значения следует использовать в качестве констант e_0^n и e_0^p в (11).

Из формул (5) и (12) при $E \gg \varepsilon_{2c} + ((\hbar\omega_1)^2 \varepsilon_{2c})^{1/3}$ получаем

$$C_n(E) = \frac{\pi}{2m^{3/2}} \frac{\hbar}{\sqrt{\beta(E - \varepsilon_{2c})}}$$

при условии, что $((\hbar\omega_1)^2 \varepsilon_{2c})^{1/3} \ll \varepsilon_{2c}$.

Отсюда видно, что коэффициент захвата электрона $C_n(E)$ имеет слабую (корневую) зависимость от энергии колебания E . В модельных расчетах в качестве констант C_0^n и C_0^p будем использовать выражения

$$C_0^n = \frac{\pi}{2m^{3/2}} \frac{\hbar^2}{\sqrt{\beta\varepsilon_{2c}}}, \quad C_0^p = \frac{\pi}{2m^{3/2}} \frac{\hbar^2}{\sqrt{\beta\varepsilon_{2v}}}$$

и соответственно для коэффициентов эмиссии

¹ Отметим, что в рамках потенциала нулевого радиуса адиабатические потенциалы u_1, u_2 касаются, а не пересекаются в точках x_c, x_v (рис. 1), соответствующих выходу электронного уровня в областях сплошного спектра.

$$e_n(E) = \begin{cases} 0, & E < \varepsilon_{2c}; \\ \omega_1 / 2\pi, & E > \varepsilon_{2c}; \end{cases} \quad e_p(E) = \begin{cases} 0, & E < \varepsilon_{2v}; \\ \omega_2 / 2\pi, & E > \varepsilon_{2v}. \end{cases}$$

Константы β — электрон-фононного и β' — дырочно-фононного взаимодействия могут отличаться, при этом β' определяется выражением

$$\beta' \varepsilon_{2v} = (1 - \beta') \varepsilon_{Tv}.$$

При расчетах мы будем пренебрегать также членами, определяющими релаксацию колебательной энергии дефекта за счет выброса горячего и захвата холодного носителя, [4] т. е. учтем только релаксацию за счет ангармонизма локальных колебаний. В результате в нашем приближении система принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\hbar\omega}{\tau} \frac{d}{dE} \left(f_1 + kT \frac{df_1}{dE} \right) - \left(pC_0^p \Theta(E - \varepsilon_1) + e_0^n \Theta(E - (\varepsilon_{Tc} + \varepsilon_2)) \right) f_1(E) = \\ = -nC_0^n \Theta(E - (\varepsilon_{Tc} + \varepsilon_2)) f_2(E - \varepsilon_{Tc}) - e_0^p \Theta(E - \varepsilon_1) f_2(E + \varepsilon_{Tv}); \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\hbar\omega}{\tau} \frac{d}{dE} \left(f_2 + kT \frac{df_2}{dE} \right) - \left(nC_0^n \Theta(E - \varepsilon_1) e_0^p \Theta(E - (\varepsilon_{Tv} + \varepsilon_1)) \right) f_2(E) = \\ = -pC_0^p \Theta(E - (\varepsilon_{Tv} + \varepsilon_1)) f_1(E - \varepsilon_{Tv}) - e_0^n \Theta(E - \varepsilon_2) f_1(E + \varepsilon_{Tc}); \end{aligned} \quad (14)$$

а условия нормировки запишутся как

$$\int_0^{\infty} (f_1(E) + f_2(E)) dE = \hbar\omega. \quad (15)$$

Преобразуем систему (13), (14), введя следующие безразмерные величины $x = E/\varepsilon_g$; $\hbar\omega/\tau\varepsilon_g = a$; $kT/\varepsilon_g = b$:

$$\begin{aligned} \tau p C_0^p = a_{11}; \quad \tau n C_0^n = a_{12}; \quad \tau e_0^n = b_1; \quad \tau e_0^p = b_2; \\ \varepsilon_1 / \varepsilon_g = x_1; \quad \varepsilon_2 / \varepsilon_g = x_2; \quad \varepsilon_{Tc} / \varepsilon_g = x_3; \quad \varepsilon_{Tv} / \varepsilon_g = x_4. \end{aligned}$$

В новых переменных система принимает вид

$$\begin{aligned} a \frac{d}{dx} \left(f_1 + b \frac{df_1}{dx} \right) - \left(a_{11} \Theta(x - x_1) + b_1 \Theta(x - (x_2 + x_3)) \right) f_1(x) + \\ + \left(a_{12} \Theta(x - (x_2 + x_3)) f_2(x - x_3) + b_2 \Theta(x - x_1) f_2(x + x_4) \right) = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} a \frac{d}{dx} \left(f_2 + b \frac{df_2}{dx} \right) - \left(a_{12} \Theta(x - x_2) + b_2 \Theta(x - (x_1 + x_4)) \right) f_2(x) + \\ + \left(a_{11} \Theta(x - (x_1 + x_4)) f_1(x - x_4) + b_1 \Theta(x - x_2) f_1(x + x_3) \right) = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

При этом условие нормировки запишется

$$\int_0^{\infty} (f_1(x) + f_2(x)) dx = a, \quad (18)$$

а граничные условия

$$b \frac{df_i}{dx} + f_i \Big|_{x=0, \infty} = 0. \quad (19)$$

Дополнительные условия следует из равенства $\varepsilon_{Tc} + \varepsilon_{Tv} = \varepsilon_g$ и имеет вид

$$x_3 + x_4 = 1. \quad (20)$$

Рассмотрим теперь задачу (16), (17) подробнее. Пусть для определенности $0 < x_1 \leq x_2 \leq x_3 \leq x_4$.

При малых энергиях ($0 \leq x \leq x_1$) в нашем приближении система принимает вид

$$\frac{d}{dx} \left(f_i + b \frac{df_i}{dx} \right) = 0, \quad i = 1, 2,$$

что означает постоянство потоков. С учетом же граничных условий при $x = 0$ делаем вывод, что на участке $0 < x \leq x_1$ потоки нулевые, а функции распределения имеют вид

$$f_i(x) = C_i^{(1)} e^{-x/\beta}. \quad (21)$$

Теперь рассмотрим другой предельный случай — очень больших энергий $x \gg x_4$. В этом случае система также принимает простой вид

$$a \frac{d}{dx} \left(f_1 + b \frac{df_1}{dx} \right) - (a_{11} + b_1) f_1(x) + a_{12} f_2(x - x_3) + b_2 f_2(x + x_4) = 0,$$

$$a \frac{d}{dx} \left(f_2 + b \frac{df_2}{dx} \right) - (a_{12} + b_2) f_2(x) + a_{11} f_1(x - x_4) + b_1 f_1(x + x_3) = 0.$$

Характеристическое уравнение для этой системы имеет вид

$$a^2 \lambda^2 (1 + b\lambda)^2 - a\lambda (1 + b\lambda) (a_{11} + b_1 + a_{12} + b_2) + (a_{11} + b_1) (a_{12} + b_2) - (a_{11} b_2 + a_{12} b_1 + a_{12} e^{-\lambda(x_3 + x_4)} + b_1 b_2 e^{\lambda(x_3 + x_4)}) = 0. \quad (22)$$

Интерес представляет случай малой диффузии, когда слагаемыми, содержащими a , в первом приближении можно пренебречь. Тогда, отбрасывая корень $\lambda = 0$ и учитывая, что $x_3 + x_4 = 1$, получаем

$$a_{11} a_{12} / b_1 b_2 = e^{\lambda}.$$

Введем обозначение

$$\kappa = \frac{a_{11} a_{12}}{b_1 b_2} = \frac{np C_0^{\alpha} C_0^{\beta}}{e_0^{\alpha} e_0^{\beta}}$$

и учтем, что $\kappa \ll 1$ [9],

$$\lambda_{\infty} = -\ln(1/\kappa). \quad (23)$$

Итак, на высоких энергиях хвосты функций распределения имеют асимптотику

$$f_i(x) = C_i^{\infty} e^{\lambda_{\infty} x}, \quad (24)$$

где $C_1^{(\infty)}$ и $C_2^{(\infty)}$ линейно зависимы и связаны соотношением (18).

Несложно доказать, что учет диффузионного слагаемого в уравнении (22) весьма незначительно изменяет показатель λ_{∞} , определяемый (23), и не добавляет корней с отрицательной вещественной частью.

Итак, найдены решения, определенные с точностью до констант на больших энергиях $x > x_1$ и малых $x < x_1$.

Теперь можно построить итерационную процедуру для нахождения решения на всей оси.

В первом приближении будем учитывать диффузию только на начальном участке $[0, x_1]$. Уравнения системы (16), (17) при отбрасывании оператора диффузии по энергии превращаются в конечно-разностные уравнения и позволяют построить решение до точки x_1 (справа), при этом обе функции (f_1 и f_2) зависят от одной произвольной постоянной ($C_1^{(w)}$ или $C_2^{(w)}$). Слева от x_1 функции определены равенствами (21), содержащими еще две константы, которые должны быть использованы для сшивки решений в точке x_1 . С помощью оставшейся константы решение нормируется по формуле (18), при этом граничные условия (19) выполняются автоматически.

Следующие итерации состоят в последовательном учете диффузионных потоков на участках $[x_1, x_2]$, $[x_2, x_3]$ и т. д. При учете диффузионных слагаемых на каждом участке характеристическое уравнение имеет 4 корня, вообще говоря, не всегда вещественных. При этом на отдельных участках решение может носить немонотонный характер. Условия сшивки потоков и функций распределения в точках разрыва коэффициентов позволяют однозначно определить произвольные постоянные. Из этих условий, с учетом условия нормировки (18), решение определяется однозначно.

Для численного решения системы (16), (17) использовался метод конечных разностей, при этом граничные условия на левом конце задаются формулами (19), а в качестве граничных условий на правом конце берется асимптотика (24). Единственная свободная константа определяется из условия нормировки.

3. Обсуждение результатов численного расчета

На рис. 2 представлены результаты численного расчета для функции f_1 при различных концентрациях дырок. Расчет производился со следующими параметрами:

$$T = 300 \text{ К}; \quad \varepsilon_{Tc} = 0.3 \text{ эВ}; \quad \varepsilon_{Tv} = 1.13 \text{ эВ}; \quad \varepsilon_{2c} = 0.08 \text{ эВ}; \quad \varepsilon_{2v} = 0.16 \text{ эВ};$$

$$e_B^p = 1.5 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}; \quad e_0^n = 4.5 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1};$$

$$C_0^n = 9 \cdot 10^{-8} \text{ с}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}; \quad C_B^p = 10^{-5} \text{ с}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}.$$

Выбранные значения соответствуют центру E_3 в GaAs [10, 11]. Немонотонный ход функции распределения связан с «дискретной» диффузией вверх по энергии. При энергиях, больших $1.5 \varepsilon_g$, решение практически выходит на экспоненциальный спад, определяемый асимптотическими решениями (23) и (24). На рис. 3 представлены функции распределения f_1 и f_2 при концентрации носителей $n = 10^{17}$, $p = 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

В настоящее время известно большое число экспериментальных данных по

рекомбинационно-стимулированному отжигу дефектов (см., например, обзоры [10, 12]). Ряд экспериментов был выполнен именно применительно к радиационному дефекту E_3 в GaAs.

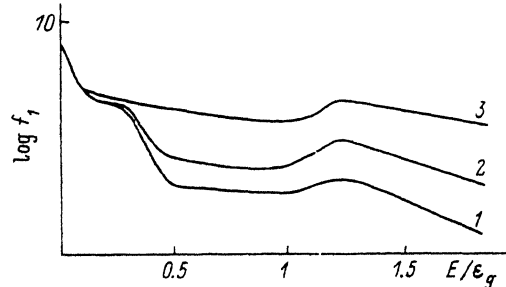


Рис. 2. Функция распределения дефектов в состоянии 1 по энергиям E при различных значениях концентрации дырок p , см^{-3} : 1 — 10^{15} , 2 — 10^{16} , 3 — 10^{17} ; ε_g — ширина запрещенной зоны.

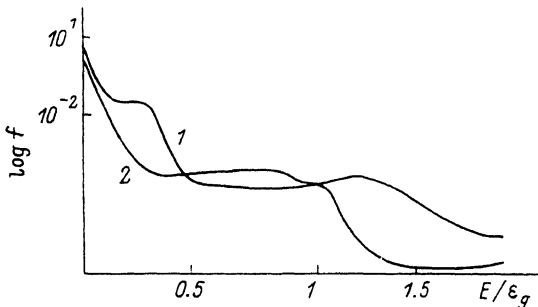


Рис. 3. Функция распределения дефектов в состояниях 1 и 2 с энергией колебаний, большей чем 1.4 эВ, рассчитанная для дефекта с параметрами: $\epsilon_{Tc} = 0.3$, $\epsilon_{T\gamma} = 1.13$, $\epsilon_{2c} = 0.08$, $\epsilon_{2\nu} = 0.16$ эВ; $n = 10^{17}$ см $^{-3}$, $p = 10^{13}$ см $^{-3}$.

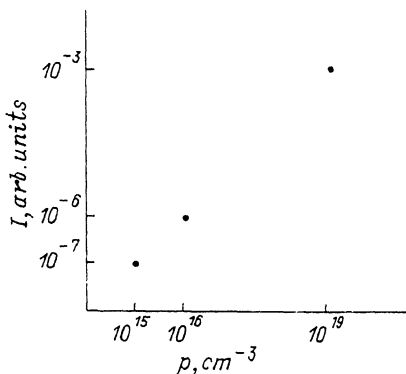


Рис. 4. Суммарное число дефектов в состояниях 1 и 2 с энергией колебаний, большей чем 1.4 эВ, рассчитанное для дефектов E3 в GaAs как функция от концентрации дырок, при концентрации электронов $n = 10^{17}$ см $^{-3}$.

Бургуэн и Стивинард [11] обнаружили, что при возрастании индукционного тока дырок в n -область энергия активации диффузии для дефекта E3 не остается постоянной, а уменьшается при подаче прямого смещения на p - n -переход от 0.3 до 0.19 эВ. Они считали, что этот результат противоречит тому предположению, что ускорение отжига обусловлено разогревом локальных колебаний при рекомбинации через дефекты, так как, согласно [1], уменьшение энергии активации диффузии вследствие рекомбинации должно быть равно энергии термической ионизации дырок, равной 1.1 эВ для дефекта E3, и не зависеть от количества инжектированных (т. е. участвующих в рекомбинации) дырок.

Из рис. 2 видно, что с ростом концентрации дырок (что соответствует росту тока инжекции в экспериментах [11]) существенно возрастает хвост функции распределения f_1 .

На рис. 4 представлена зависимость от концентрации дырок интеграла

$$I = \int_{E_a}^{\infty} (f_1(E) + f_2(E)) dE \quad \text{при } E_a = 1.4 \text{ эВ,}$$

которому пропорционально суммарное количество сильно возбужденных дефектов с энергией, большей энергии активации дефекта E_a . Вероятность скачка дефекта пропорциональна этому же интегралу [3]. Видно, что имеет место резкий (экспоненциальный) рост при увеличении концентрации дырок, что качественно соответствует экспериментальным данным работы [11].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] J. P. Weeks, J. Tully, L. C. Kimmerling. Phys. Rev. B, 12, 3286 (1975).
- [2] В. Н. Абакумов, А. А. Пахомов, И. Н. Ясиевич. ФТТ, 31, 135 (1989).
- [3] В. Н. Абакумов, А. А. Пахомов, И. Н. Ясиевич. ФТП, 25, 29 (1991).
- [4] В. Н. Абакумов, А. А. Пахомов, М. К. Шейнкман, И. Н. Ясиевич. ФТП, 23, 2232 (1989).
- [5] Л. Э. Эльсгольц. Введение в теорию дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. М. (1964).
- [6] С. Б. Норкин. Дифференциальные уравнения второго порядка с запаздывающим аргументом. М. (1965).

- [7] В. Н. Абакумов, И. А. Меркулов, В. И. Перель, И. Н. Яссиевич. ЖЭТФ, 89, 1472 (1985).
- [8] V. N. Abakumov, V. I. Perel, I. N. Yassievich. Nouradiative recombination in semiconductors (Modern problems in condensed matter sciences, 33). Amsterdam—Oxford.—N. Y.—Tokyo (1991).
- [9] В. Н. Абакумов, А. А. Пахомов, И. Н. Яссиевич. Письма ЖЭТФ, 53, 167 (1991).
- [10] D. Pons, J. C. Bourgain. Phys. Rev. C, 18, 3839 (1985).
- [11] P. Stievenard, J. C. Bourgain. Phys. Rev. B, 33, 8440 (1986).
- [12] L. C. Kimmerling. Sol. St. Electron., 21, 1391 (1978).

Редактор: В. В. Чалдышев
