

# НОВЫЙ «ЭЛЕКТРОННЫЙ» МЕХАНИЗМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ЛОКАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ СИЛЬНО ВОЗБУЖДЕННЫХ ДЕФЕКТОВ

Абакумов В. Н., Пахомов А. А., Шейнкман М. К.,  
Ясневич И. Н.

Сильно возбужденные колебательные состояния дефектов могут образовываться как непосредственно под влиянием внешних факторов (например, при интенсивном радиационном или световом воздействии), так и в ходе междефектных реакций, а также за счет взаимодействия дефекта с электронной подсистемой [1, 2]. К числу процессов последнего типа относится многофононная рекомбинация носителей заряда через центры с глубокими уровнями [3].

Обычно считают, что релаксация по энергии таких сильно возбужденных дефектов обусловлена ангармонизмом колебаний, при этом энергия локального возбуждения переходит в энергию тепловых фононов. Будет показано, что при большой энергии локальных возбуждений возможен альтернативный «электронный» механизм энергетической релаксации, который при большой концентрации свободных носителей может успешно конкурировать с обычным «ангармоническим» механизмом. Электронный механизм релаксации состоит в последовательном многократно повторяющемся испускании возбужденным де-

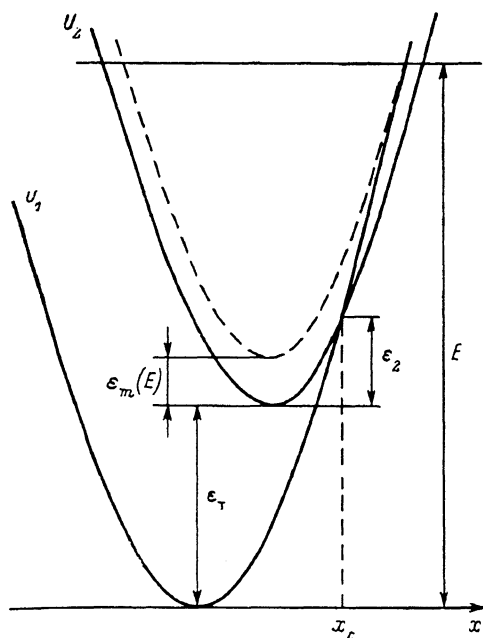


Схема адиабатических потенциалов (термов).

фектом «горячего» носителя (с кинетической энергией, значительно превышающей  $kT$ ) и захвате «холодного» (теплового) носителя. Предполагается, что захват и выброс электрона (дырки) происходит в результате многофононных переходов. Для простоты такие переходы будем описывать в рамках одномодового приближения. На рисунке представлена схема адиабатических потенциалов (термов)  $U_1(x)$  и  $U_2(x)$ , которые соответствуют двум состояниям: электрон локализован на дефекте; электрон свободен, а дефект пуст. Конфигурационная координата  $x$  описывает деформацию решетки при колебании. Энергия связи электрона на центре  $\epsilon_b(x) = U_2(x) - U_1(x)$  обращается в нуль в точке встречи термов  $x_c$ . Таким образом, выходу электронного уровня в зону соответствуют энергии деформации  $\epsilon_2 = U_2(x_c)$  для пустого центра и  $\epsilon_1 + \epsilon_\tau = U_1(x_c)$  для дефекта с локализованным электроном. Классически разрешенные многофононные переходы имеют место при энергиях колебаний  $E$ , превышающих эти критические значения. Вероятности многофононных переходов в классически разрешенной области велики, сечения захвата  $\sigma(E)$  могут достигать величин  $10^{-14}$ – $10^{-12}$  см<sup>2</sup>.

Пусть имеются сильно возбужденные дефекты с энергией колебаний в этой области. Соответственно двум состояниям дефекта введем две функции распределения по энергиям колебаний  $f_1$  и  $f_2$ . Их изменения во времени за счет многофононных переходов определяются уравнениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1(E)}{\partial t} &= -e(E) f_1(E) + n \int W_i(E; \epsilon) F(\epsilon) f_2(E - \epsilon_T - \epsilon) d\epsilon, \\ \frac{\partial f_2(E)}{\partial t} &= \int W_i(E + \epsilon; \epsilon) f_1(E + \epsilon) \frac{\rho_1(E + \epsilon)}{\rho_2(E - \epsilon_T)} d\epsilon - nc(E - \epsilon_T) f_2(E - \epsilon_T), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $W_i(E; \epsilon)$  — вероятность выброса электрона с кинетической энергией  $\epsilon$  центром с колебательной энергией  $E$ ;  $\rho_1(E)$ ,  $\rho_2(E)$  — плотности состояний (в одномодовом приближении  $\rho_{1,2} = 1/\hbar\omega_{1,2}$ ;  $\omega_{1,2}$  — частоты колебаний центра в состояниях 1, 2);  $n$  — концентрация свободных носителей,  $F(\epsilon)$  — их функция распределения, нормированная на единицу:  $\int F(\epsilon) \rho_e(\epsilon) d\epsilon = 1$ ,  $\rho_e(\epsilon)$  — электронная плотность состояний. Вероятность термического выброса  $e(E)$  и коэффициент захвата  $c(E)$  при фиксированной энергии колебаний  $E$  определяются равенствами

$$\begin{aligned} e(E) &= \int W_i(E; \epsilon) d\epsilon, \\ c(E - \epsilon_T) &= \int W_i(E; \epsilon) \frac{\rho_1(E)}{\rho_2(E - \epsilon_T)} F(\epsilon) d\epsilon. \end{aligned} \quad (2)$$

Средняя энергия носителей считается малой по сравнению с другими энергиями. Максимальная кинетическая энергия выброшенного с центра электрона  $\epsilon_m$  значительно меньше энергии колебаний  $E$  (см. рисунок). Используя это, получаем, что суммарная заселенность  $P(E)$  колебательного уровня с энергией  $E$  определяется соотношениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(E)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial E} \frac{E}{\tau^*(E)} P(E), \\ P(E) &= \rho_1(E) f_1(E) + \rho_2(E - \epsilon_T) f_2(E - \epsilon_T), \\ 1/\tau^*(E) &= E^{-1} \int \epsilon W_i(E; \epsilon) d\epsilon \{nc(E - \epsilon_T) / [nc(E - \epsilon_T) + e(E)]\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Введенное время  $\tau^*(E)$  играет роль времени энергетической релаксации. В случае невырожденных носителей (с учетом неравенства  $\epsilon_m \gg kT$ ) имеем  $e(E) \gg nc(E - \epsilon_T)$  и соответственно

$$\frac{1}{\tau^*(E)} \approx \gamma \frac{\epsilon_m(E)}{E} nc(E - \epsilon_T), \quad (4)$$

где  $\gamma$  — численный коэффициент порядка единицы.

При выходе уровня в сплошной спектр могут реализоваться две возможности: 1) существует потенциальный барьер, отделяющий область локализации электрона на центре от области свободного движения; 2) потенциальный барьер отсутствует. В первом случае возникают квазистационарные состояния, ширина которых  $\Gamma$  и определяет вероятность выброса электрона с центра. Этот случай реализуется, например, в прямозонных полупроводниках  $A^{III}B^V$  при выходе уровня  $A_1$ -симметрии в сплошной спектр, при этом роль барьера играет центробежный барьер [4]. Вычисление коэффициентов захвата с энергетического уровня  $E$  электрона из зоны проводимости на центр  $c_n(E)$ , а дырки из валентной зоны на центр  $c_p(E)$  и соответствующих численных констант  $\gamma_n$  и  $\gamma_p$  дает

$$\begin{aligned} c_n(E) &= \frac{\pi \hbar R_0}{2m_c} \frac{E_g}{\sqrt{\Delta\epsilon(E - \epsilon_2)}}, & \gamma_n &= \frac{3}{4}, \\ c_p(E) &= \frac{3\pi}{4} \frac{\hbar R_0}{m_l} \left(\frac{m_l}{m_h}\right)^{3/2} \frac{kT}{\sqrt{\Delta\epsilon(E - \epsilon_2)}}, & \gamma_p &= \frac{3}{5}, \\ \epsilon_2 &= (\epsilon_T - \Delta\epsilon)^2 / 4\Delta\epsilon. \end{aligned} \quad (5)$$

В этих формулах  $R_0$  — характерный радиус потенциальной ямы для электрона,  $m_c$ ,  $m_l$ ,  $m_h$  — эффективные массы электрона, легкой и тяжелой дырок соответственно,  $\epsilon_T$  — энергия термической ионизации центра при выбросе электрона в зону проводимости или дырки в валентную зону,  $\Delta\epsilon$  — разности оптического

и термического порогов ионизации, характеризующие силу электрон-фононной связи. Максимальная энергия вылетающих в зону носителей  $\epsilon_m$  определяется формулой

$$\epsilon_m(E) = 2\sqrt{\Delta\epsilon} (\sqrt{E} - \sqrt{\epsilon_2 + \epsilon_T}). \quad (6)$$

Во втором случае, когда потенциальный барьер отсутствует, электронное состояние при выходе в зону делокализуется. В этом случае для описания электронных состояний на центре применима модель потенциала нулевого радиуса (модель Луковского), распределение вылетевших электронов по энергии в рамках этой модели было получено в работе [5]. Используя его, находим

$$c(E) = \frac{\pi}{2m^{3/2}} \frac{\hbar^2}{\sqrt{\beta} (E - \epsilon_2)}, \quad \gamma \simeq 0.9, \quad (7)$$

$$\epsilon_m(\epsilon) = [3\hbar\omega_1/4 \sqrt{\beta} (E - \epsilon_2 - \epsilon_T)]^{2/3}, \quad \beta = \frac{\Delta\epsilon}{\epsilon_T + \Delta\epsilon},$$

где  $\beta$  имеет смысл безразмерной константы электрон-фононного взаимодействия, а частоты колебаний  $\omega_1$  и  $\omega_2$  и энергии  $\epsilon_2$  и  $\epsilon_T$  связаны между собой соотношениями  $\omega_1^2 = \omega_2^2 (1 - \beta)$ ,  $\epsilon_2 = \epsilon_T (1 - \beta)/\beta$ . Энергия  $\epsilon_m(E)$  в этом случае характеризует среднюю энергию вылетевших частиц.

Используя полученные соотношения, легко вычислить время энергетической релаксации, обусловленное «электронным» механизмом. Оценки показывают, что в случае электронного захвата с коэффициентом  $c(E)$ , определяемым формулой (5), время  $\tau^*(E)$  может уменьшиться до  $\omega^{-1}$  при концентрациях  $n \geq 10^{19} \text{ см}^{-3}$ . Коэффициент захвата дырок по сравнению с электронным коэффициентом захвата [см. (5)] содержит дополнительный малый множитель  $(m_i/m_n)^{3/2} (kT/E_g)$ . Соответственно время энергетической релаксации в результате выброса и захвата дырок центром существенно длиннее. Если коэффициент захвата носителей определяется формулой (7), то по порядку величины  $\tau^*(E)^{-1} \sim \omega (\hbar\omega/E) [n/N_c (\hbar\omega)]$ , где  $N_c (\hbar\omega)$  — плотность состояний в зоне при энергии  $\hbar\omega$ . Видно, что «электронный» механизм может здесь конкурировать с «ангармоническим» лишь при высоких концентрациях, соответствующих вырождению носителей.

#### Список литературы

- [1] Lang D. V., Kimerling L. C. // Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. N 8. P. 489—492.
- [2] Шейнкман М. К. // Письма ЖЭТФ. 1983. Т. 38. В. 6. С. 278—280.
- [3] Абакумов В. Н., Меркулов И. А., Перель В. И., Яснеевич И. Н. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. В. 4 (10). С. 1472—1486.
- [4] Абакумов В. Н., Курносова О. В., Пахомов А. А., Яснеевич И. Н. // ФТТ. 1988. Т. 30. В. 6. С. 1793—1802.
- [5] Демков Ю. Н., Островский В. И. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975. 240 с.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Получено 9.07.1989  
Принято к печати 14.07.1989

ФТП, том 23, вып. 12, 1989

## АСИММЕТРИЯ ТЕПЛОТЫДЕЛЕНИЯ И ТЕРМОЭДС В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МИКРОКОНТАКТАХ

Богачек Э. Н., Шкорбатов А. Г.

1. В последнее время в полупроводниковых микроконтактах обнаружены новые термоэлектрические эффекты, заключающиеся в асимметричном выделении тепла [1, 2] и подавлении термоэдс увлечения [2]. Теория таких эффектов была первоначально развита для микроконтактов между металлическими