

## ТУННЕЛЬНЫЕ ЦЕНТРЫ С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ $U$ И ФОТОСТИМУЛИРОВАННЫЕ РЕАКЦИИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Н.Т.Баграев, В.А.Машков

Обнаружены туннельные системы центров в полупроводниках, обладающие отрицательным  $U$  за счет зависимости константы электрон-колебательного взаимодействия от зарядового состояния, наличие которых приводит к наблюдаемым экспериментально, обратимым перестройкам в системе дефектов решетки под действием оптической накачки.

Центры с глубокими уровнями в полупроводниках, как правило, характеризуются низкосимметричными ян-теллеровскими искажениями и межэлектронными корреляциями. Андерсон <sup>1</sup> показал, что эти эффекты могут быть взаимосвязанными, и предложил модель глубокого центра, в которой возникает связанное состояние двух электронов на центре за счет электрон-колебательного взаимодействия (ЭКВ) (модель с эффективным отрицательным  $U$ ). Особенностью модели <sup>1</sup> является независимость константы ЭКВ от числа электронов на центре, что близко к концепции зонной теории. В связи с этим данная модель применима к описанию только так называемых эластичных систем, для которых наблюдается сильная деформация волновых функций при изменении числа электронов на центре. Примером подобных центров является вакансия в кремнии, которая имеет отрицательный порядок уровней в запрещенной зоне вследствие  $U < 0$  <sup>2</sup>, что нашло полное экспериментальное подтверждение в недавних работах Уоткинса и др. <sup>3</sup>. Следует отметить, что в литературе обсуждались и другие механизмы  $U < 0$  <sup>4</sup>.

В настоящей работе рассмотрена альтернативная ситуация возникновения  $U < 0$ , которая характеризуется отсутствием эффекта Яна – Теллера и существенных деформаций волновых функций глубокого центра при изменении его зарядового состояния, благодаря чему такой центр можно назвать жестким. Эквивалентом ян-теллеровских искажений в предлагаемой модели является переход центра в новое положение равновесия при изменении его зарядового состояния. Физической причиной появления двух положений равновесия является немонотонная зависимость константы ЭКВ от числа электронов на центре, в отличие от <sup>2</sup>, что характерно для глубоких центров с малым радиусом локализации <sup>5</sup>. В этом случае возникает туннельная система с различным по знаку и величине взаимодействием  $U$  в разных положениях центра в решетке, например, система узел – междоузлие. Рассмотрим модель туннельной системы с тремя зарядовыми состояниями: двухэлектронным  $A_-$  ( $n = 2$ ), одноэлектронным  $A_0$  ( $n = 1$ ) и пустым  $A_+$  ( $n = 0$ ), адиабатические потенциалы которых изображены на рис.1 в зависимости от конфигурационной координаты  $Q$ .  $A_+$  и  $A_-$  состояния системы стабильны в узле, а состояние  $A_0$  существует только в междоузлии и соответствует абсолютному минимуму энергии системы. Соответствующий гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{\kappa}{2} Q^2 + E_0(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} - FQ(n_{\uparrow} + n_{\downarrow} - 2n_{\uparrow} n_{\downarrow}), \quad (1)$$

где  $P$ ,  $Q$  – канонический импульс и координата центра,  $M$  и  $\kappa$  – его масса и соответствующая силовая постоянная,  $E_0$  и  $U$  – одноэлектронная энергия и межэлектронное взаимодействие на центре,  $F$  – константа ЭКВ,  $n_{\sigma}$  – числа заполнения центра электронами со спином  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . В результате диагонализации (1) по зарядовым состояниям туннельной системы находим явный вид адиабатических потенциалов для разных значений  $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$  (см. рис.1, где начало отсчета энергии совпадает с дном зоны проводимости):

$$E_n(Q) = \left\{ \frac{\kappa}{2} Q^2, n = 0; -I_1 + \frac{\kappa}{2} (Q - Q_0)^2, n = 1; -I_2 + \frac{\kappa}{2} Q^2, n = 2 \right\}, \quad (2)$$

где

$$Q_0 = F/\kappa; I_1 = -E_0 + \frac{F^2}{2\kappa} > 0; I_2 = -(2E_0 + U) > 0. \quad (3)$$

Условие устойчивости положения равновесия в междуузлии есть  $I_1 > I_2$ , т.е.  $E_0 + U + \frac{F^2}{2\kappa} > 0$ . Неустойчивость состояния  $A_0$  в узле описывается неравенством  $E_0 > 0$ , а условие стабильности  $A_-$  в узле эквивалентно последнему соотношению в (3), т.е. справедливо  $U < -2E_0 < 0$ . Таким образом, при переходе центра из нестабильного состояния в узле ( $Q=0, U < 0$ ) в междуузлии ( $Q=Q_0$ ) одноэлектронная энергия понижается, а межэлектронное взаимодействие увеличивается и меняет знак. Следовательно, в узле решетки имеется система Андерсона с  $U < 0$  ( $A_-$  – основное состояние,  $A_+$  и  $A_0$  – возбужденные), а в междуузлии – система с обычным порядком уровней ( $A_0$  – основное состояние,  $A_-$  и  $A_+$  – возбужденные). Предложенная схема с учетом факта жесткости электронных волновых функций предсказывает туннельную малость вероятностей переходов с изменением зарядового состояния системы  $\Delta n = \pm 1$ . Поэтому времена  $\tau$  фотостимулированных и спонтанных переходов центров между стабильными конфигурациями  $A_-$  в узле и  $A_0$  в междуузлии отличаются от соответствующих значений, характеризующих процессы возбуждения и захвата носителей без учета структурных изменений, множителем  $K$ :  $\tau^{-1} = \tau_0^{-1}K$ . Аналогичным образом изменяются сечения захвата и фотоионизации носителей ( $\sigma = \sigma_0 K$ ).

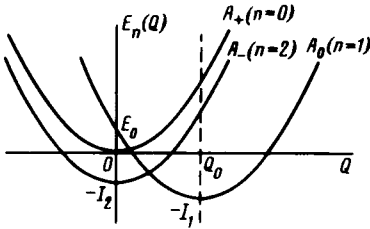


Рис.1. Адиабатические потенциалы различных зарядовых состояний туннельной системы центров с различным по знаку и величине взаимодействием  $U$  в зависимости от конфигурационной координаты

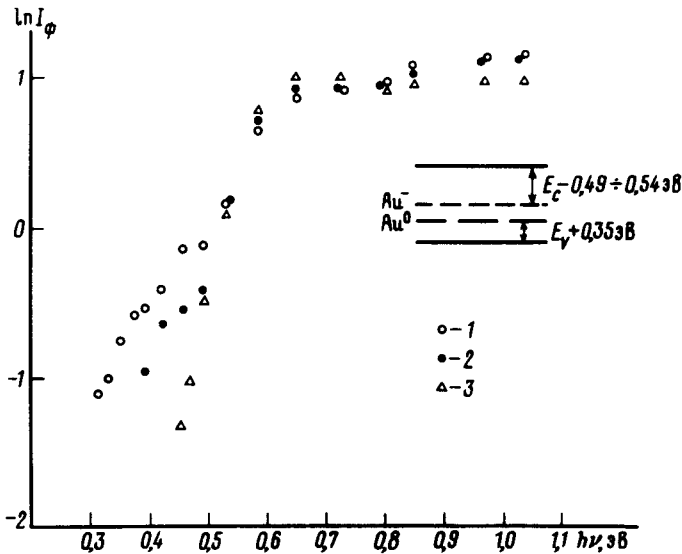


Рис.2. Спектральная зависимость приращенной фотопроводимости кремния  $n$ -типа, легированного золотом: 1 – исходное состояние; 2 – после оптической накачки светом лампы накаливания в течение 3,5 час; 3 – после оптической накачки светом лампы накаливания (1 кВт) в течение 5,5 часов

Квантовомеханический расчет вероятностей туннельных переходов между положениями равновесия системы, сопровождающих фотостимулированные и спонтанные переходы "уровень – зона" электрона или дырки на центре, дает следующую верхнюю оценку для туннельного фактора  $K$ :

$$K_{max} = (2\pi N_m)^{-1/2} (\bar{N}/N_m)^{N_m} e^{-(\bar{N} - N_m)}; \bar{N} = (Q_0/2 \langle \delta Q \rangle)^2; \quad (4)$$

$$N_m = \left\{ \frac{\Delta\Omega}{\omega_0}; \frac{\Delta E}{\hbar\omega_0} \right\} \ll \bar{N}; \quad \omega_0^2 = \kappa/M; \quad \langle \delta Q \rangle = (\hbar/2M\omega_0)^{1/2}, \quad (4)$$

где  $\Delta\Omega$  — ширина спектра света накачки,  $\Delta E$  — разность энергий электронной подсистемы при спонтанном переходе,  $\omega_0$  — частота локальных колебаний. Неравенство на максимальную квантовость процесса  $N_m \ll \bar{N}$  является следствием жесткости туннельной системы  $\Delta E > \omega_0 > \omega_D$ , где  $\omega_D$  — дебаевская частота. Примером рассмотренных туннельных систем со знакопеременным  $U$  являются примесные центры золота в кремнии, создающие в запрещенной зоне два уровня (см. рис.2): акцепторный ( $E_c - 0,49 \div 0,54$  эВ) <sup>6</sup>, соответствующий центру  $Au^-$  в узле решетки, и донорный ( $E_v + 0,35$  эВ), который принадлежит нецентральному междоузельному нейтральному атому золота <sup>7</sup>. Невзаимосвязанность донорного и акцепторного уровней золота доказана с помощью различных методик <sup>6-9</sup>. Кроме того, показано, что в  $Si \langle Au \rangle$  не наблюдаются нейтральные центры золота в узлах решетки <sup>9</sup>.

Общеизвестно <sup>6-9</sup>, что  $Si \langle Au \rangle$  характеризуется быстропротекающими рекомбинационными процессами. Однако, в <sup>10</sup> было обнаружено существование крайне медленного процесса  $Au^0 + e \rightarrow Au^-$ , что связано с туннельной малостью вероятности данного перехода. Данные <sup>10</sup> хорошо согласуются с расчетными значениями  $K_{max}$ , полученными с помощью (4):  $1,4 \cdot 10^{-11} < K_{max} < 2 \cdot 10^{-5}$  в зависимости от  $N_m$ . Таким образом, при длительной оптической накачке в туннельной системе золота в кремнии должно происходить постепенное исчезновение центров  $Au^0$  с соответственным увеличением концентрации  $Au^-$ , что было нами обнаружено при исследовании спектров примесной фотопроводимости  $Si \langle Au \rangle n$ -типа (см. рис.2). Исходному состоянию соответствует наличие центров  $Au^0$  (см. рост  $I_\phi$  при  $h\nu \cong 0,31$  эВ) и  $Au^-$  (см. рост  $I_\phi$  при  $h\nu \cong 0,49 \div 0,54$  эВ на кривой  $I$ , рис.2), которые возникают за счет компенсации донорных центров фосфора. Для того чтобы регистрировать переходы  $v$ -зона — ( $E_v + 0,35$  эВ), спектры фотопроводимости регистрировались при дневном свете. В результате длительной оптической накачки светом лампы накаливания мощностью 1 кВт наблюдалось постепенное исчезновение центров  $Au^0$  и синхронное возрастание концентрации центров  $Au^-$  (см. рис.2). Причем времена переходов центра  $Au^0$  из состояния с  $U > 0$  в состояние с  $U < 0$  находятся в количественном согласии с изложенной выше моделью (см. рис.2). Релаксация туннельной системы золота в кремнии к исходному состоянию после выключения света накачки происходила за времена того же порядка, что также согласуется с предложенной моделью.

Авторы благодарят Е.В.Астрову за помощь в проведении экспериментов.

#### Литература

1. Anderson P.W. Phys. Rev. Lett., 1975, 34, 953.
2. Baraff G.A., Kane E.O., Schlüter M. Phys. Rev. B, 1980, 21, 5662.
3. Newton J.L., Chatterjee A.P., Harris R.D., Watkins G.D. Physica, 1983, 116B, 219.
4. Карпов В.Г., Клиггер М.И. ФТП, 1978, 12, 1887; Дробкин И.А., Мойжес Б.Я. ФТП, 1983, 17, 969.
5. Вихнин В.С., Зарицкий И.М., Кончиц А.А., Круликовский Б.К. ФТТ, 1975, 17, 3609.
6. Lang D.V., Grimmeis H.G., Meijer E., Jaros M. Phys. Rev. B, 1980, 22, 3917.
7. Постников В.С., Капустин В.И., Кириллов В.И., Аммер С.А., Козлов Ю.И. ФТТ, 1978, 20, 3509.
8. Pearton S.J., Tavendale A.J. Phys. Rev. B, 1982, 26, 7105.
9. Bagraev N.T. Physica, 1983, 116B, 236.
10. Bickley W.D., Eddolls D.V. Solid State Electronics, 1978, 21, 1616.