

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МИКРОСТРУКТУР

На правах рукописи

ОРЛОВА Екатерина Евгеньевна

**НЕРАВНОВЕСНАЯ НАСЕЛЕННОСТЬ МЕЛКИХ  
ПРИМЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И  
УСИЛЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛИННОВОЛНОВОГО  
ИНФРАКРАСНОГО ДИАПАЗОНА**

05.27.01 - твердотельная электроника,  
радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на  
квантовых эффектах

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико – математических наук

Научный руководитель:  
ведущий научный сотрудник,  
доктор физико–математических наук  
В.Н.Шасти́н

Нижний Новгород — 2002

# Оглавление

<b>Введение</b>	<b>5</b>
<b>1 Населенности состояний мелкого примесного центра</b>	<b>17</b>
1.1 Структура спектра мелких примесных центров . . . . .	17
1.2 Равновесные населенности примесных состояний . . . . .	21
1.3 Процессы, формирующие неравновесные населенности примесных состояний . . . . .	23
1.3.1 Оптические переходы . . . . .	23
1.3.2 Взаимодействие с акустическими фононами . . . . .	24
1.3.3 Взаимодействие с оптическими фононами . . . . .	26
1.3.4 Взаимодействие с свободными носителями заряда . . . . .	26
1.4 Расчет неравновесных населенностей примесных состояний . . . . .	29
1.4.1 Вероятностный метод описания населенностей примесных состояний . . . . .	30
1.4.2 Квазиклассическое описание населенностей возбужденных примесных состояний . . . . .	34
<b>2 Примесные эффекты в p-Ge лазере на горячих дырках</b>	<b>38</b>
2.1 Модель и предположения . . . . .	41
2.2 Расчет населенностей примесных состояний в Ge:Ga лазере . . . . .	42
2.3 Рекомбинация при спонтанном излучении оптических фононов . . . . .	44
2.3.1 Квазиклассическое приближение. . . . .	44
2.3.2 Приближение плоских волн . . . . .	46
2.3.3 Учет рассеяния свободных носителей на примесном потенциале . . . . .	48
2.3.4 Влияние рекомбинации с излучением оптических фононов на распределение свободных носителей . . . . .	51

2.4	Каскадная ударная ионизация . . . . .	52
2.4.1	Скорость каскадной Оже-рекомбинации . . . . .	54
2.4.2	Квазиклассическое описание ударной ионизации . . . . .	54
2.5	Оптическая ионизация . . . . .	56
2.6	Населенность примесных состояний в Ge:Ga лазере . . . . .	58
2.7	Обсуждение экспериментальных результатов . . . . .	59
2.8	Влияние типа легирующей примеси на характеристики p-Ge лазера . . . . .	61
<b>3</b>	<b>Инверсия населенностей и усиление излучения на примесных переходах в Si:P</b>	<b>65</b>
3.1	Время жизни долгоживущего состояния в Si:P . . . . .	66
3.1.1	Внутридолинные переходы . . . . .	71
3.1.2	Междолинные переходы . . . . .	76
3.1.3	Роль междолинных переходов во внутрицентровой релаксации . . . . .	79
3.2	Распределение носителей и усиление излучения в условиях оптической накачки при низких температурах . . . . .	80
3.2.1	Населенности нижних возбужденных состояний при оптической накачке. . . . .	80
3.2.2	Квазиклассическое описание распределения по верхним возбужденным состояниям . . . . .	83
3.2.3	Концентрация $D^-$ -центров и свободных носителей . . . . .	84
3.2.4	Распределение носителей заряда и усиление излучения . . . . .	85
3.2.5	Роль поглощения излучения на переходах $D^-$ -центров . . . . .	89
3.3	Обсуждение экспериментальных результатов и перспективы . . . . .	92
<b>4</b>	<b>Инверсия населенностей и усиление излучения на примесных переходах в Si:Bi</b>	<b>95</b>
4.1	Населенности верхних возбужденных состояний . . . . .	96
4.1.1	Квазиклассическое описание распределения по верхним возбужденным состояниям . . . . .	96
4.1.2	Граничное условие для функции распределения . . . . .	98
4.1.3	Инверсия населенности верхних возбужденных состояний . . . . .	100
4.1.4	Возможность усиления излучения на переходах в состоянии $2p_0$ и $2s$ . . . . .	101

4.2	Населенности нижних возбужденных состояний . . . . .	103
4.3	Обсуждение экспериментальных результатов . . . . .	108
<b>Заключение</b>		<b>109</b>
<b>A</b>	<b>Вероятности переходов между водородоподобными уровнями при взаимодействии с акустическими фонами</b>	<b>112</b>
<b>B</b>	<b>Средняя вероятность перехода с вырожденного уровня</b>	<b>114</b>
<b>Список литературы</b>		<b>115</b>
<b>Список работ автора</b>		<b>124</b>

# Введение

## Актуальность темы

Интерес к неравновесным населенностям состояний мелких примесных центров в полупроводниках связан с возможностью создания новых активных сред в дальнем инфракрасном диапазоне (ДИК) длин волн (30 — 300  $\mu\text{m}$ ).

К этому диапазону относятся характерные частоты вращательных движений молекул, колебаний в кристаллах, оптических переходов в твердых телах. Возможность применения ДИК спектроскопии для исследования свойств твердых тел, атмосферы, медицинских исследований и промышленных приложений обуславливает активный поиск новых источников стимулированного ДИК излучения. До настоящего времени эта проблема не решена. Основными источниками ДИК в настоящее время являются газовые лазеры, которые, однако, не перекрывают весь диапазон. Лазеры на свободных электронах, обладающие возможностью перестройки и значительной мощностью, доступны лишь для узкого круга приложений. Следует отметить успехи в создании лазеров на переходах между уровнями размерного квантования [1, 2] и микроволновых генераторов на осцилляциях Блоха [3], которые продвигаются в ДИК область спектра. Лазеры на горячих дырках германия [4, 5] компактны и обладают возможностью перестройки частоты. Однако, эффективность этих лазеров ограничивается тем, что лишь малая часть разогретых носителей участвует в усилении, что препятствует работе таких лазеров в режиме непрерывной генерации, важном для многих приложений.

Особенности релаксации носителей заряда по примесным состояниям [6, 7, 8, 9] позволяют ожидать от источников излучения на примесных переходах большей эффективности усиления, чем в полупроводниковых лазерах на внутризонных переходах. Кулоновские центры в полупроводниках со-

здают спектр связанных состояний, плотность уровней в котором растет с уменьшением энергии связи [10, 11]. Основные релаксационные процессы в примесном спектре - переходы при взаимодействии с акустическими фононами [6, 8] и при соударениях [12, 13] имеют каскадный характер - это значит, что более вероятны переходы с небольшим изменением энергии и разогретый носитель заряда с большой вероятностью участвует в усилении, особенно если инвертирован один из первых возбужденных уровней, или группа уровней в интервале энергий, соответствующем шагу релаксации.

Относительно большие времена жизни локализованных примесных состояний позволяют ожидать значительного значения коэффициента усиления на примесных переходах.

Теоретические [7, 9] и экспериментальные [14, 15, 16] исследования долгоживущих возбужденных примесных состояний, а также экспериментальные данные о существенной населенности возбужденных примесных состояний при фотоионизации [15, 17] и разогреве электрическим полем [18] стимулировали интерес к поиску возможностей создания активных сред на примесных переходах.

Однако усиление на примесных переходах было получено лишь недавно. Можно упомянуть усиление на переходах между состояниями мелкого акцептора в Ge в нелинейном режиме работы р-Ge лазера на межзонных переходах горячих дырок [19, 20] и генерацию ДИК излучения на примесных переходах в одноосно деформированном Ge при полевоом разогреве [21, 22].

Сложность получения инвертированной населенности примесных уровней связаны с быстрой релаксацией носителей заряда при взаимодействии с акустическими фононами, которая стремится установить равновесное распределение с температурой фононной подсистемы. При больших концентрациях свободных носителей преобладают Оже переходы, которые стремятся привести распределение по примесным уровням в равновесие с подсистемой свободных носителей заряда. Поиск новых активных сред на примесных переходах в полупроводниках направлен на создание условий, когда населенности примесных состояний формируются процессами, более быстрыми, чем релаксация при взаимодействии с акустическими фононами и при соударениях. Такие условия могут определяться особенностями примесных спектров, в частности резонансным взаимодействием отдельных уровней с оптическими фононами [23, 24, 25], и замедлением

релаксационных переходов на акустических фононах из-за ограничений, связанных с законами сохранения [7, 9]. Дополнительные перспективы активных сред на примесных переходах открываются при использовании активно исследуемых в последнее время  $\delta$ -легированных гетероструктур [A9, A11, A13, A17, A19], поскольку они предоставляют возможности изменения ряда параметров примесных состояний, которые в объемном полупроводнике остаются фиксированными при заданном типе примеси. В частности, на время жизни примесных состояний в гетероструктурах с дельта-легированными барьерами может влиять туннелирование в квантовую яму, которое зависит от спектра двумерных подзон [A20].

Настоящая диссертация посвящена расчету неравновесных распределений носителей заряда по примесным состояниям, анализу условий получения инверсии населенностей и усиления излучения на переходах с возбужденных примесных состояний.

Следует отметить, что расчет неравновесных населенностей примесных состояний является относительно новой задачей. Это связано с тем, что исторически интерес исследователей в основном был сосредоточен на эффектах, связанных с свободными носителями заряда, примесные состояния рассматривались в основном с точки зрения их влияния на концентрацию и распределение свободных носителей.

Процессы, формирующие неравновесную населенность возбужденных примесных состояний, впервые рассматривались в связи с анализом скорости каскадного захвата на притягивающие кулоновские центры [6, 7, 8]. Интерес к населенности возбужденных примесных состояний [12, 26, 13] привлекли также эффекты гистерезиса [12], отрицательной фотопроводимости [27], отрицательной дифференциальной проводимости, нелинейных осцилляций [28] и хаоса [29], наблюдаемые в пороговых электрических полях и связанные с особенностями ударной ионизации возбужденных состояний.

Можно выделить два основных подхода, которые использовались для описания влияния возбужденных состояний на рекомбинацию и ионизацию. В первом случае переходы по верхним возбужденным состояниям рассматривались квазиклассически и влияние дискретности спектра на захват не учитывалось [6, 8]. Второй подход состоит в описании населенностей возбужденных примесных состояний с помощью уравнений баланса, причем число рассматриваемых уровней произвольно ограничено и не учитываются верхние возбужденные состояния [12, 26, 13, 30]. Расчет

распределения носителей по примесным уровням, вообще говоря, требует учета переходов между любой парой этих состояний. Для расчета волновых функций примесных состояний в большинстве случаев применяется вариационный метод [31, 32, 33, 34]. Матричные элементы переходов между примесными уровнями, которые использовались для расчета захвата с излучением фононов и ударной ионизации, рассчитывались в модели изотропного параболического закона дисперсии [7, 35, 36]. Реальная структура зон в полупроводниках учитывалась при расчете лишь отдельных матричных элементов переходов [9, 37, 39, 40].

В настоящей работе развит метод, который позволяет рассчитывать населенности примесных состояний с учетом переходов по всей лестнице примесных уровней [A12]. При этом число матричных элементов переходов, необходимых для расчета населенности возбужденных примесных состояний, ограничивается на основе анализа вероятностей различных маршрутов переходов носителей заряда. Этот метод дает самосогласованное описание населенностей состояний дискретного и непрерывного спектра. Для анализа неравновесных распределений по примесным состояниям при оптическом возбуждении и полевым разогреве были проведены расчеты скорости рекомбинации с излучением оптических фононов на возбужденные водородоподобные состояния, времен жизни долгоживущих состояний в кремнии. Проведенные расчеты способствовали пониманию примесных эффектов в лазерах на горячих дырках германия, явились вкладом в создание лазеров на основе примесных переходов в Si:P, Si:Bi.

### **Цель работы**

Исследования направлены на поиск новых активных сред, основанных на примесных переходах. Поиск возможностей усиления на примесных переходах предполагает исследование состояний мелких примесных центров в полупроводниках и полупроводниковых структурах, анализ процессов, формирующих неравновесную заселенность примесных уровней в условиях разогрева носителей заряда электрическим полем и при фотовозбуждении, развитие метода расчета неравновесных населенностей примесных состояний, расчет матричных элементов переходов в примесном спектре и анализ условий получения инверсии населенностей и усиления на внутрицентровых переходах.

### **Научная новизна**

1. Разлит метод расчета стационарных неравновесных населенностей возбужденных примесных состояний, основанный на анализе вероятностей

различных маршрутов носителей заряда по примесным уровням, позволяющий согласованно описывать населенности состояний дискретного и непрерывного спектра, учитывая переходы по всей лестнице примесных состояний.

2. Впервые рассчитана скорость рекомбинации при излучении оптических фононов на возбужденные состояния водородоподобного примесного центра. Теоретически обоснован эффект аномально большой заселенности примесных состояний при разогреве свободных носителей электрическим полем до энергий порядка энергии оптического фонона.

4. Предложен механизм инверсии населенностей и усиления на примесных переходах в нелинейном режиме генерации р-Ge лазера на межподзонных переходах горячих дырок, основанный на рекомбинации с излучением оптических фононов и преимущественной фотоионизации основного состояния лазерным излучением.

5. Впервые получены вероятности переходов при взаимодействии с фононами между состояниями мелких донорных центров с учетом многодолинности зоны проводимости, включающие как внутривалинные, так и междолинные переходы. Показано, что вклады междолинных и внутривалинных переходов не интерферируют в пределах применимости приближения эффективных масс для примесных состояний. Установлено, что междолинные переходы между примесными состояниями преобладают над внутривалинными, если различие волнового вектора фонона и междолинного волнового вектора не превышает локализацию огибающей волновой функции для отдельной долины в пространстве волновых векторов, и приводят к существенному уменьшению времени жизни долгоживущего донорного состояния  $2p_0$  кремния.

6. Впервые проведен расчет населенностей возбужденных примесных состояний при фотоионизации с учетом особенностей релаксации, связанных с наличием долгоживущего состояния  $2p_0$  в Si:P, и с резонансным взаимодействием состояний  $2p_0$  и  $2s$  в Si:Bi с оптическими фононами, и анализ условий инверсии и усиления на примесных переходах в этих материалах.

### **Практическая значимость**

Проведенные в данной работе теоретические исследования способствовали развитию и созданию новых источников излучения дальнего инфракрасного диапазона:

– исследования примесных эффектов в р-Ge лазере позволили обосно-

вать оптимальный выбор типа легирующей примеси, что способствовало улучшению характеристик лазера;

– расчеты населенностей возбужденных донорных состояний в кремнии при фотоионизации явились вкладом в создание новых источников терагерцового излучения, основанных на примесных переходах в Si:Bi и Si:P.

### **Основные положения, выносимые на защиту**

1. Вероятностное описание стационарного распределения носителей заряда по примесным уровням и описания с помощью уравнений баланса эквивалентны. Использование населенностей, рассчитанных вероятностным методом в качестве граничного условия для уравнения Больцмана, позволяет описывать населенности состояний дискретного и непрерывного спектра согласованно.

2. Рекомбинация с излучением оптических фононов на уровни водородоподобного примесного центра в условиях разогрева свободных носителей до энергий порядка энергии оптического фонона может приводить к их аномально большой населенности.

3. Поглощение на примесных переходах может существенно влиять на коэффициент усиления лазера на межподзонных переходах горячих дырок германия. Оптимальные энергии ионизации легирующей примеси для r-Ge лазера лежат в промежутке между максимальной энергией фотона излучения на межподзонных переходах и энергией ионизации, при которой становится существенным рассеяние легких дырок на нейтральных примесных центрах.

4. Рекомбинация с излучением оптических фононов и преимущественная фотоионизация основного состояния лазерным излучением может приводить к инверсии населенностей и усилению излучения на примесных переходах, соответствующих линиям C и E, в нелинейном режиме Ge:Ga лазера.

5. Междолинные переходы при взаимодействии с фононами могут существенно влиять на населенность примесных состояний. Междолинные переходы преобладают над внутридолинными, если различие волнового вектора фонона и междолинного волнового вектора не превышает локализацию огибающей волновой функции для отдельной долины в пространстве волновых векторов, и существенно уменьшают время жизни донорного состояния  $2\tau_0$  в кремнии.

6. Возможно получение инверсии населенностей и усиления в Si:P на

переходах с долгоживущего состояния  $2p_0$  на отщепленные состояния  $1s(E, T)$  при фотоионизации. Увеличение компенсации при сохранении числа активных центров приводит к уменьшению поглощения  $D^-$ -центров и уменьшению порога генерации.

7. Резонансное взаимодействие с оптическими междолинными фононами состояния  $2s$  и  $2p_0$  Si:Bi может приводить к инверсии населенностей на примесных переходах в состояния  $2s$  и  $2p_0$ . Преобладание одноквантовой релаксации с состояний  $2s$  и  $2p_0$  на основное состояние в Si:Bi может приводить к малой вероятности попадания релаксирующего носителя в состояния  $1s(E, T)$ , к инверсии населенностей и усилению на переходах в эти состояния при фотоионизации.

### **Апробация работы**

Основные результаты диссертации представлялись на 1 и 3 Российских конференциях по физике полупроводников, Нижний Новгород, 1993 и Москва, 1997; 18 и 21 Международных конференциях по инфракрасным и миллиметровым волнам (Int. Conf. on Infrared and Millimeter Waves) Колчестер, Великобритания, 1993 и Берлин, Германия, 1996; Международных конференциях аспирантов-физиков (European Conference for PhD students in Physical Sciences PeH'94 и PeH'95), Монпелье, Франция, 1994 и Ницца, Франция, 1995; 10 Международной конференции по горячим носителям в полупроводниках (Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors NCIS-10), Берлин, Германия, 1997; 1,2 и 3 Нижегородских сессиях молодых ученых, Нижний Новгород, 1996, 1997, 1998; 8 и 9 Международных конференциях по мелким примесным центрам в полупроводниках (Shallow-Level Centers in Semiconductors SLCS-8, SLCS-9), Монпелье, Франция, 1998 и Япония, 2000; 6 Международном симпозиуме "Наноструктуры: физика и техника" ("Nanostructures: Physics and Technology") С.-Петербург, 1998; Международной конференции по терагерцовой спектроскопии и ее применениям (Terahertz Spectroscopy and Applications (EUROPTO-99)), Мюнхен, Германия 1999; Всероссийском совещании "Нанофотоника Н.Новгород, 2000; Международной школе по терагерцовым волнам (International Terahertz Workshop), Санберг, Дания, 2000; Встрече по оптоэлектронике на основе кремния (One day meeting on Si-based optoelectronics); Лидс, Великобритания April, 2000, Совещании по физике твердого тела в Вельдховене, Нидерланды, 18-19 декабря, 2001; VI Симпозиуме IEEE/LEOS (Benelux Chapter), Брюссель, Бельгия, 3 декабря, 2001.

### **Публикации**

Основное содержание диссертации опубликовано в 13 печатных работах в периодических журналах и 15 работах в материалах конференций.

### **Личный вклад автора в получение результатов**

Соискатель принимал участие в постановке и решении задач, обработке и обсуждении результатов. Теоретические расчеты, представленные в перечисленных работах, кроме работ [A11] и [A20], выполнены соискателем. В работах [A1] – [A3] вклад автора определяющий с точки зрения предложенного механизма инверсии населенностей и проведенного расчета; вклад соискателя в работы [A4] – [A9], [A11] – [A28] равноценный; в работе [A11] расчеты выполнялись совместно с Н.А. Бекиным; работы [A5], [A10] написаны без соавторов; в работе [A20] вклад соискателя определяющий в постановку задачи и ее решение, расчеты выполнялись совместно с соавтором.

### **Объем и структура диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и двух приложений. Общий объем диссертации составляет 124 страниц, включая 32 рисунка. Список литературы содержит 91 наименование.

### **Содержание работы**

Во введении выполнен краткий обзор существующих источников стимулированного излучения в дальней инфракрасной области и обзор теоретических и экспериментальных результатов, касающихся неравновесных населенностей состояний мелких примесных центров в полупроводниках и получения усиления ДИК излучения на примесных переходах.

В первой главе рассмотрены основные особенности спектра и процессов, формирующих населенности возбужденных состояний мелких примесных центров с точки зрения возможностей получения инверсии населенностей и усиления излучения на примесных переходах. Изложен вероятностный метод расчета неравновесных населенностей возбужденных примесных состояний. В разделе 1.1 представлены уравнения, описывающие спектр состояний мелких примесных центров, дан краткий обзор методов, применяемых для их решения и обсуждаются основные особенности спектров. В разделе 1.2 обсуждается отличие равновесной функции распределения по возбужденным примесным состояниям и состояниям континуума. В разделе 1.3 сделан обзор основных работ по расчетам переходов по состояниям мелких примесных центров при взаимодействии с фотонами (раздел 1.3.1), акустическими (раздел 1.3.2) и оптическими (1.3.3) фононами и свободными носителями заряда (1.3.4), рассматривает-

ся их роль в формировании неравновесной населенности примесных состояний. Отмечено, что основные процессы, формирующие населенность возбужденных примесных состояний, носят каскадный характер.

В разделе 1.4 изложен вероятностный метод расчета населенностей примесных уровней. Продемонстрирована возможность согласованного описания состояний дискретного и непрерывного спектров с использованием вероятностного описания для нижних возбужденных уровней и квазиклассического описания для верхних возбужденных состояний. В разделе 1.4.1 приведены уравнения, описывающие вероятности различных маршрутов носителей заряда по лестнице возбужденных примесных состояний, и показана эквивалентность системы уравнений для вероятностей и системы уравнений баланса для стационарных населенностей уровней. В разделе 1.4.2 приводятся уравнения, описывающие распределение по верхним возбужденным состояниям в квазиклассическом приближении. Показано, что граничные условия для квазиклассической функции распределения, полученные с помощью вероятностного метода, позволяют учесть влияние переходов по нижним примесным состояниям на распределение в квазинепрерывном спектре и континууме.

В главе 2 приведены результаты расчетов примесных эффектов в р-Ge лазере на межподзонных переходах горячих дырок. В разделе 2.1 обсуждаются модель и основные предположения, используемые при расчете примесных эффектов в р-Ge лазере. В разделах 2.2.1-2.2.3 приведены результаты расчетов рекомбинации с излучением оптических фононов на состояния водородоподобного центра в квазиклассическом приближении, в приближении Блоховских волн для состояний свободных носителей и с учетом рассеяния свободных носителей на примесном потенциале. Результаты сравниваются с существующими расчетами рекомбинации с излучением оптических фононов на основное состояние водородоподобного центра. В разделе 2.3 приведены результаты расчета каскадной ударной ионизации. В разделе 2.4 обсуждаются результаты расчета населенностей примесных состояний в Ge:Ga лазере. Рассматривается влияние излучения на межподзонных переходах горячих дырок на населенность примесных состояний. Показано, что при разогреве носителей до энергий порядка оптического фонона населенность примесных состояний аномально велика благодаря рекомбинации при спонтанном излучении оптических фононов. Показано, что при интенсивности лазерного излучения, близкой к насыщению, эффективная фотоионизация основного примесного состояния при-

водит к инверсии населенностей и дополнительному усилению на примесных переходах. В разделе 2.5 на основе расчетов примесных эффектов в Ge:Ga лазере дается интерпретация таких экспериментальных результатов, как увеличение тока при развитии лазерного излучения, наличие дискретных линий E и C в спектре излучения лазера, соотношение областей генерации и динамика развития излучения в линиях и в высокочастотной части спектра. В разделе 2.6 обсуждается влияние типа легирующей примеси на работу p-Ge лазера. Показано, что увеличение энергии ионизации приводит, с одной стороны, к уменьшению примесного поглощения, а с другой стороны, к увеличению населенности основного состояния и, соответственно, увеличению частоты рассеяния на нейтральных центрах. Обсуждается оптимальный выбор легирующей примеси.

В главе 3 приведены результаты исследования инверсии населенностей и усиления на примесных переходах в кремнии, легированном фосфором, при оптической накачке. В разделе 3.1 приведен расчет времени жизни долгоживущих состояний в Si:P при взаимодействии с акустическими фононами с учетом многодолинности зоны проводимости кремния. Показано, что в пределах применимости метода эффективных масс интерференцией внутри и междолинных переходов можно пренебречь. В разделе 3.1.1 рассчитаны скорости внутримолиной релаксации с уровней  $2p_0$  и  $1s(E)$ , которые составляют соответственно  $7 \times 10^7 \text{ с}^{-1}$  и  $2 \times 10^{10} \text{ с}^{-1}$ . Показано, что внутримолиная релаксация с состояния  $1s(T)$  в рамках теории эффективных масс запрещена. В разделе 3.1.2 показано, что междолинные переходы приводят к существенному сокращению времени жизни состояний  $2p_0$ ,  $1s(E)$ ,  $1s(T)$  в Si:P (соответствующие скорости релаксации  $1.8 \div 5 \times 10^9 \text{ с}^{-1}$ ,  $2.8 \div 3.6 \times 10^{10} \text{ с}^{-1}$ ,  $4.1 \div 4.1 \times 10^{10} \text{ с}^{-1}$  для спектров фононов, приведенных в [66, 84, 85]). В разделе 3.1.3 обсуждается роль междолинных фононов во внутрицентральной релаксации. Утверждается, что междолинные переходы преобладают над внутримолиными в случае, когда волновой вектор фонона  $q$  превышает неопределенность волнового вектора  $a_n^{-1}$  в примесном состоянии  $n$ , и, с другой стороны, отличается от разности волновых векторов  $K_{i,j}$  соответствующих долин  $i$  и  $j$  на величину, меньшую неопределенности волнового вектора в локализованном состоянии.

В разделе 3.2 дается расчет населенностей примесных состояний Si:P в условиях оптической накачки  $CO_2$  лазером. В разделе 3.2.1 приводится расчет населенностей нижних примесных состояний вероятностным ме-

тодом. Показано, что при низких температурах решетки, когда тепловое возбуждение несущественно, образуется инверсия населенностей на переходах  $2p_0 \rightarrow 1s(E, T)$ . В разделе 3.2.2 описывается расчет населенностей верхних возбужденных состояний в квазиклассическом приближении. В разделе 3.2.3 обсуждается расчет концентрации  $D^-$ -центров и свободных носителей. В разделе 3.2.4 приводятся результаты расчета распределения носителей заряда и усиления на примесных переходах в зависимости от интенсивности накачки. Сравниваются результаты, полученные в однодолинном приближении и с учетом междолинных переходов. В разделе 3.2.4 исследуется влияние на усиление в Si:P поглощения, связанного с  $D^-$ -центрами при разных уровнях компенсации. В разделе 3.3 экспериментальные результаты по наблюдению стимулированного излучения на переходах с долгоживущего  $2p_0$  состояния в Si:P при накачке  $CO_2$  лазером сравниваются с результатами расчетов. Рассматриваются перспективы развития источников излучения на базе Si:P.

В главе 4 приводятся основные результаты исследования инверсии населенностей и усиления на переходах по донорным состояниям кремния, легированного висмутом, при оптической накачке. Раздел 4.1 посвящен исследованию инверсии на переходах в состояния  $2p_0$  и  $2s$  с верхних возбужденных состояний и из зоны проводимости. В разделе 4.1.1 рассматривается расчет распределения по верхним возбужденным состояниям в рамках квазиклассического описания. В разделе 4.1.2 ставится граничное условие для функции распределения, которое позволяет учесть влияние быстрой релаксации с состоянием  $2s$  при резонансном взаимодействии с оптическими междолинными фононами на распределение носителей заряда по верхним возбужденным состояниям. Приводится решение уравнения Фоккера-Планка, описывающего квазиклассическую функцию распределения, удовлетворяющее этому граничному условию. В разделе 4.1.3 приводятся результаты расчета распределения по верхним примесным состояниям при накачке  $CO_2$  лазером. Показано, что резонансное взаимодействие состояний  $2p_0$  и  $2s$  с междолинными оптическими фононами может приводить к инверсной населенности на переходах в эти состояния с верхних возбужденных уровней при температуре решетки вплоть до азотной. В разделе 4.1.4 обсуждается возможность усиления на переходах в состояния  $2p_0$  и  $2s$  и влияние поглощения  $D^-$ -центров. В разделе 4.2 рассматривается инверсия населенностей на переходах в состояния  $1s$ . Населенности нижних примесных уровней рассчитываются вероятностным методом. Показано,

что резонансное взаимодействие состояния  $2p_0$  с оптическими фононами может приводить к инверсии населенностей на переходах в отщепленные состояния  $1s(E, T)$ , в которые попадает лишь малая часть релаксирующих носителей из-за большой вероятности прямого перехода  $2p_0 \rightarrow 1s(A)$ . В разделе 4.3 Обсуждаются результаты экспериментов по получению усиления на примесных переходах в Si:Bi. Сравниваются результаты расчетов и экспериментально наблюдаемого усиления на переходах  $2p_{\pm} \rightarrow 1s(E)$ .

В Приложении 1 приводится вывод выражений для вероятностей переходов между водородоподобными уровнями при взаимодействии с акустическими фононами в дифференциальной форме.

В Приложении 2 приводится вывод средней вероятности перехода с вырожденного уровня в обоснование однодолинной модели для описания населенностей вырожденных донорных состояний.

В заключении приведены основные результаты диссертации.

# Глава 1

## Населенности состояний мелкого примесного центра

### 1.1 Структура спектра мелких примесных центров

Мелкий примесный центр — это примесный атом, у которого число валентных электронов отличается от атома, который он замещает в кристаллической решетке, на единицу. На расстояниях больших по сравнению с постоянной решетки и малых по сравнению с Дебаевским радиусом такой центр создает притягивающий Кулоновский потенциал

$$V(\mathbf{r}) = -e^2/\epsilon r \quad (1.1)$$

где  $e$  — заряд электрона,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость среды. Поскольку обычно радиус локализации состояний мелких примесных центров существенно превышает постоянные решетки, а частота, соответствующая энергии ионизации, меньше частот, характерных для частотной зависимости диэлектрической проницаемости, обычно для расчета состояний мелких примесных центров используется статическое значение ди-

электрической проницаемости, и применим метод эффективных масс (см., например, [11, 10]).

Уравнения метода эффективных масс для состояний, создаваемых Кулоновским центром вблизи экстремума вырожденной зоны [41]:

$$\{\mathbf{T}(-i\nabla) + V(\mathbf{r})I\}\Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

Где  $\mathbf{T}(\mathbf{k})$  – матрица, содержащая члены квадратичные по  $\mathbf{k}$ , порядок которой равен кратности вырождения ближайшей зоны,  $I$  – единичная матрица того же порядка,  $\Phi$  – вектор-столбец огибающих функций метода эффективных масс. Диагонализированная матрица  $\mathbf{T}(\mathbf{k})$  определяется законом дисперсии (зависимость энергии от волнового вектора) вблизи дна зоны. Волновая функция примесного состояния в этом приближении является суммой произведений Блоховских функций  $\psi_n$  вырожденных зон вблизи экстремума и соответствующих им огибающих  $\Phi_n$ :

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n \Phi_n(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}), \quad (1.3)$$

В случае зоны с эквивалентными экстремумами в различных точках  $\mathbf{k}_j$  зоны Бриллюэна система уравнений эффективных масс для мелких примесных состояний [42]:

$$\{T_j(-i\nabla) + V(\mathbf{r})\}\Phi_j(\mathbf{r}) = E\Phi_j(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

где  $T_j(\mathbf{k})$  – зависимость энергии от волнового вектора вблизи экстремума  $j$  долины, волновая функция примесного состояния:

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_j C_j \Phi_j(\mathbf{r})\psi_{n,j}(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

где  $\psi_{n,j}(\mathbf{r})$  – Блоховская функция дна  $j$  долины  $n$  зоны. Если симметрия кристаллической решетки с примесным ионом ниже симметрии уравнений эффективных масс, коэффициенты  $C_j$  в (1.4) не произвольны, а соответствуют неприводимым представлениям группы симметрии кристалла.

В случае простой зоны с квадратичным изотропным законом дисперсии огибающие метода эффективных масс подобны волновым функциям состояний атома водорода с Боровским радиусом  $a_B = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2$ , где  $m^*$  – эффективная масса. Спектр состояний мелкого примесного центра в этом случае:

$$E_n = E_B n^{-2} \quad E_B = \frac{e^4 m^*}{2\epsilon^2 \hbar^2} \quad (1.6)$$

Плотность локализованных состояний водородоподобного центра с учетом вырождения уровней  $g(n) = n^2$  растет с уменьшением энергии ионизации  $\propto |E_n|^{-5/2}$ :

$$\rho_{loc} = \frac{g(n)}{\left|\frac{dE}{dn}\right|} = \frac{E_B^{3/2}}{2|E_n|^{5/2}} \quad (1.7)$$

В случае более сложных законов дисперсии уравнения метода эффективных масс обычно не удается решить точно и для решения применяется вариационный метод. Волновые функции и энергии состояний кулоновских центров в случае вырожденной зоны рассчитывались вариационным методом [31, 32, 33, 34]. Численные невариационные решения удалось получить для валентной зоны германия в сферически симметричном приближении методом прямого численного решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальных функций путем переноса условия ограниченности из особых точек [39, 40], и методом решения интегрального уравнения для волновой функции в импульсном представлении [43]. Состояния в случае эквивалентных эллипсоидальных долин рассчитывались вариационными методами в работах [42, 44]. Квазистационарные примесные состояния в разрешенной зоне или резонансные состояния описываются с помощью методов теории рассеяния [45, 46], которые применительно к физике полупроводников были развиты в работах [47, 48, 49].

На расстояниях порядка постоянной решетки от примесного иона потенциал отличается от Кулоновского и зависит от химической природы примеси. Это приводит к *химическому сдвигу* энергии ионизации  $E_I$  наиболее локализованного основного состояния мелких примесных центров. Существует ряд попыток расчета эффекта центральной ячейки [10]. Метод дельта-потенциала (см., например, [50]), основанный на малости постоянной решетки по сравнению с радиусом локализации, позволяет учесть влияние потенциала центральной ячейки на волновую функцию на расстояниях больших по сравнению с постоянной решетки в рамках метода эффективных масс. Величина дельта-потенциала определяется в соответствии с экспериментально наблюдаемой энергией ионизации. Расчет волновых функций на меньших расстояниях от центра выходит за рамки метода эффективных масс и требует знания деталей потенциала центральной ячейки. До настоящего времени эта задача не решена.

Асимптотическое поведение огибающей волновой функции  $\Phi(\mathbf{r})$  при больших  $r$ , где потенциал центра мал по сравнению с энергией ионизации

$E_i$  в соответствии с [51], получается решением уравнения эффективных масс для отрицательных энергий при нулевом потенциале и, таким образом, не зависит от вида примесного потенциала и определяется энергией ионизации состояния и законом дисперсии в зоне. Радиальная зависимость:

$$\Phi(r) \propto \exp(-r/a), \quad a = \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*|E_i|}} \quad (1.8)$$

Основные особенности плотности состояний спектра возбужденных состояний мелких примесных центров можно проследить, используя квазиклассическое приближение, которое в соответствии с принципом соответствия Бора-Зоммерфельда хорошо описывает возбужденные состояния кулоновского центра. Условие применимости квазиклассического описания заключается в малости изменения потенциала на масштабах длины волны частицы. В случае кулоновского потенциала условия применимости квазиклассического приближения [52, стр. 218-219]:  $E_i \ll E_B$  и  $a_B \ll r$ . В рамках этого приближения плотность  $\tilde{\rho}(E)$  возбужденных состояний и состояний континуума можно описывать непрерывной функцией полной энергии  $E = \mathcal{E} + V(r)$  ( $\mathcal{E}$  – кинетическая энергия носителя заряда,  $V(r)$  – потенциальная энергия в поле притягивающих центров (рис. 1), и получается при усреднении плотности состояний свободных носителей заряда  $\rho(\mathcal{E})$  в слое фазового пространства с постоянной полной энергией:

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{1}{V} \int_V \rho(\mathcal{E}) \delta(E - \mathcal{E} - V(\mathbf{r})) d\mathcal{E} d\mathbf{r} \quad (1.9)$$

На рис. 2 представлена квазиклассическая плотность состояний в поле притягивающих центров в приближении равномерного распределения заряженных центров в объеме кристалла с концентрацией  $N^+$  и квадратичного изотропного закона дисперсии. В области энергий, где орбиты состояний не перекрываются  $E < E_N = -e^2(4N^+/3\pi)^{1/3}/\epsilon$ , квазиклассическая плотность состояний пропорциональна плотности локализованных состояний кулоновского центра (1.7) вблизи невырожденной изотропной зоны с эффективной массой равной массе плотности состояний:  $\tilde{\rho}(E) = \rho_{loc} N^+$ .

## 1.2 Равновесные населенности примесных состояний

Равновесная вероятность заполнения примесных состояний определяется распределением Гиббса для состояний термодинамической системы, которая может обмениваться с резервуаром частицами и энергией.

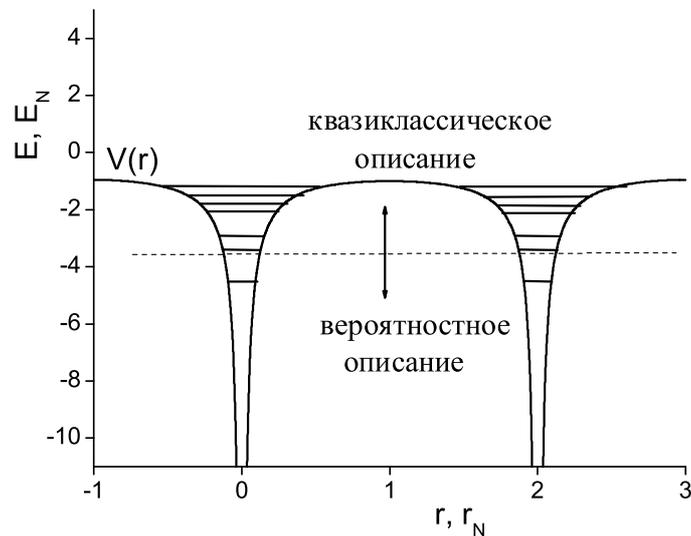
Вероятность найти систему в состоянии с числом частиц  $n$  и энергией  $E$  пропорциональна Фактору Гиббса  $\exp\left(\frac{n\mu - E}{T}\right)$ , где  $\mu$  – химический потенциал  $T$  – температура. Если выбрать в качестве системы совокупность локализованных состояний примесного центра, то вероятность заполнения состояния  $i$  с энергией  $E_i$ ,  $F_i = \exp\left(\frac{\mu - E_i}{T}\right)/Z$ . Поскольку лишь один носитель заряда может находиться в одном из состояний центра, то статистическая сумма  $Z = \sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T}\right) + 1$ , где суммирование охватывает состояния центра [53].

$$F_i = \frac{\exp\left(\frac{\mu - E_i}{T}\right)}{\sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T}\right) + 1} \quad (1.10)$$

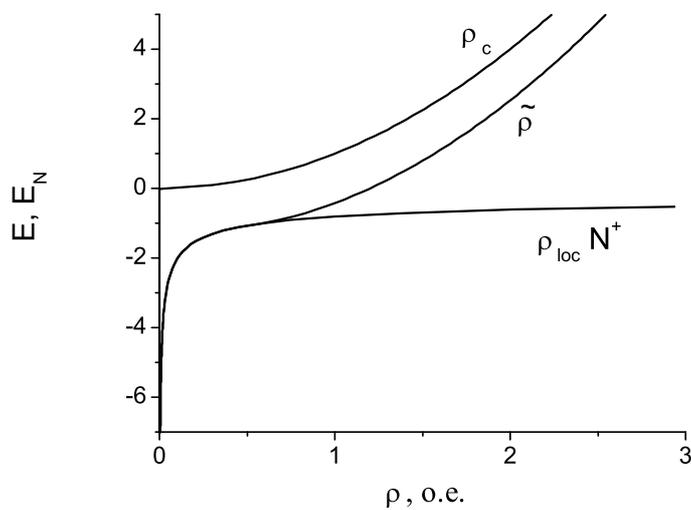
Таким образом, равновесное распределение по примесным состояниям отличается от распределения Ферми  $F(E)$  свободных носителей заряда. Различие связано с тем, что заполнения различных локализованных состояний одного примесного центра не являются независимыми событиями. Вероятность заполнения при переходе от локализованных состояний к континууму ( $E_i \rightarrow 0$ ) увеличивается скачком:

$$\frac{F(E=0)}{F_i} = \frac{\sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T}\right) + 1}{\exp\left(\frac{\mu}{T}\right) + 1} \quad (1.11)$$

При этом отношение вероятности заполнения состояния к вероятности найти его свободным не испытывает скачка. Поэтому скачок вероятности заполнения не приводит к усилению на оптических переходах между локализованными и свободными состояниями, так как компенсируется соответствующим соотношением числа конечных состояний переходов. Действительно, коэффициент усиления на переходах между локализованными



**Рис. 1** Схема уровней и потенциал кулоновских центров.  $E_N = (4 N^+ / 3\pi)^{1/3} e^2 / \epsilon$   
 $N^+$  - концентрация центров,  $r_N$  - среднее расстояние между центрами.



**Рис. 2** Плотность состояний:  $\rho_c$  - континуума с параболическим законом дисперсии,  
 $\rho_{loc}$  - локализованных состояний изолированного кулоновского центра,  
 $\tilde{\rho}$  - средняя плотность состояний кулоновских центров с концентрацией  $N^+$ .

состоянием  $i$  и состоянием континуума  $\mathbf{k}$ , с энергией  $E$ :

$$\alpha_{\mathbf{k} \rightarrow i} = \sigma_{i \rightarrow \mathbf{k}} \left\{ F(E)N^+ - F_i N_I (1 - F(E)) \right\}, \quad (1.12)$$

где  $\sigma_{i \rightarrow \mathbf{k}}$  – сечение перехода,  $N_I$  – концентрация основной примеси. Действительно, используя (1.10), получаем для числа свободных примесных состояний, которое равно концентрации заряженных центров:

$$N^+ = N_I \left( 1 - \sum_j F_j \right) = \frac{N_I}{1 + \sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T}\right)}, \quad (1.13)$$

Поскольку  $1 - F(E) = 1 / \left( 1 + \exp\left(\frac{\mu - E}{T}\right) \right)$ , получаем, что в равновесии для состояний вблизи  $E = 0$   $F(E)/(1 - F(E)) = F_i N_I / N^+$  и  $\alpha_{\mathbf{k} \rightarrow i} = 0$ , как и следовало ожидать.

## 1.3 Процессы, формирующие неравновесные населенности примесных состояний

Неравновесные населенности примесных состояний формируются процессами взаимодействия с акустическими и оптическими фононами, свободными носителями заряда и фотонами.

### 1.3.1 Оптические переходы

Оптические переходы по примесным состояниям рассчитывались в работах [40, 34] Рассчитанные спектры возбужденных состояний хорошо соответствуют наблюдаемым положениям примесных линий в спектрах поглощения [11]. Однако волновые функции, полученные вариационным методом, не позволяют достигнуть большой точности в определении матричных элементов оптических переходов [10].

Поскольку вероятности переходов по примесным состояниям при спонтанном излучении фотонов на несколько порядков меньше, чем вероятности переходов из-за взаимодействия с акустическими фононами [7, 54], только оптические переходы, индуцированные мощным потоком фотонов, могут существенно влиять на населенность примесных состояний.

### 1.3.2 Взаимодействие с акустическими фононами

Переходы по состояниям мелких примесных центров при взаимодействии носителей заряда с акустическими фононами рассматривались до сих пор, в основном, в связи с теорией каскадного захвата с излучением акустических фононов. Впервые модель каскадного захвата была предложена Лэксом [6], и развита затем в работах [7, 8]. Скорость каскадного захвата при взаимодействии с акустическими фононами существенно превышает скорость захвата при одноквантовых переходах [55] и хорошо объясняет экспериментально наблюдаемые времена жизни неравновесных носителей в большом диапазоне температур и концентраций [53]. Существенная населенность возбужденных примесных состояний в рамках каскадного захвата также подтверждена экспериментально [15, 56]. В каскадном захвате при взаимодействии с акустическими фононами основную роль играют высоковозбужденные уровни с энергией  $E_i < T$ . При условии  $T \ll E_B$  и если расстояние между уровнями не превышает характерный шаг фоннной релаксации, переходы между ними можно рассматривать квазиклассически, предполагая, что в любой точке орбиты, соответствующей связанному состоянию, вероятность излучения фонона такая же, как и у свободного носителя с энергией, равной кинетической энергии связанного носителя. Квазиклассическое выражение для вероятности испускания (поглощения) фонона с энергией в единичном интервале энергий вблизи  $v$  ( $-v$ ) для носителя с примесного уровня  $E$  [8]:

$$w(E, v) = \frac{2^9 \sqrt{2} S}{3\pi l_0} \frac{\sqrt{m^* S^2} E^{5/2} v^2}{((v + 2m^* S^2)^2 + 8EmS^2)^3 (1 - \exp(-v/kT))}, \quad (1.14)$$

где  $\rho_c$  – плотность кристалла  $S$  – скорость звука,  $l_0 = \pi \hbar^4 \rho_c / 2m^{*3} \Xi^2$ ,  $\Xi$  – константа акустического деформационного потенциала. При  $E \gg m^* S^2$  характерная энергия излучаемого фонона  $v = \sqrt{8EmS^2}$ . Уменьшение вероятности перехода с меньшим изменением энергии связано с уменьшением числа соответствующих фоннных мод. Уменьшение вероятности переходов с излучением более энергичных фононов связано с законом сохранения импульса: действительно, волновой вектор таких фононов  $q$  превышает неопределенность волнового вектора  $a^{-1}$  соответствующих состояний. Плотность состояний кулоновских центров неограниченно растет с уменьшением энергии ионизации в соответствии с (1.7), поэтому релаксация по верхним возбужденным состояниям идет с шагом, превышающим

расстояние между соседними уровнями  $dE$  пока  $dE < \sqrt{8EmS^2}$ . Нижние возбужденные состояния разделены большим энергетическим интервалом  $dE > \sqrt{8EmS^2}$ , что соответствует  $qa/2 > 1$ . Квазиклассическое приближение не годится для расчета переходов по таким состояниям.

Вероятности переходов между водородоподобными уровнями в случае сферически симметричного закона дисперсии в приближении  $qa \gg 1$  были рассчитаны в работе [7] и затем уточнены в работе [9]. Для уровней s-типа было получено выражение:

$$W_{n,n'} = \frac{64\Xi^2}{\pi\hbar\rho_c S^2 a_B^2} \frac{1}{(nn')^3 (qa_B)^5}, \quad qa_B = \frac{E_I a_B}{\hbar S} (n^{-2} - n'^{-2}), \quad (1.15)$$

Где  $n$  и  $n'$  – номера водородоподобных уровней. В настоящей работе получено выражение в дифференциальной форме для вероятностей переходов между водородоподобными уровнями  $(n, l, m)$  для произвольных  $qa$  (см. Приложение 1). Вероятность переходов быстро спадает с ростом  $qa$ , при этом преобладают переходы между соседними уровнями. В работе [9] показано, что при  $qa \gg 1$  вероятности переходов сильно зависят от мелко-масштабных деталей волновых функций. В работе [7] показано, при больших  $qa_B$  вероятность перехода с ростом орбитальных квантовых чисел  $l, l'$  уменьшается как  $(qa_B)^{2(l+l')}$ . Сильная зависимость вероятности переходов с излучением акустических фононов от вида волновой функции при  $qa_B \gg 1$  приводит к тому, что оценки в рамках водородоподобной модели плохо описывают релаксацию по нижним возбужденным состояниям в случае более сложных законов дисперсии. Расчеты вероятностей переходов при взаимодействии с акустическими фононами для состояний мелких примесных центров с учетом более сложного закона дисперсии свободных носителей заряда очень немногочисленны. А именно, были рассчитаны лишь времена жизни возбужденных состояний мелких акцепторов [9] и доноров [37] в германии с учетом вырожденного закона дисперсии валентной зоны и многодолинности зоны проводимости. В данной работе проведен расчет времени жизни долгоживущего состояния  $2p_0$  в кремнии (глава 3), в связи с исследованием инверсии на примесных состояниях Si:P при оптическом возбуждении. Влияние междолинных переходов (см. раздел 3.1.2) на распределение носителей заряда по примесным уровням до сих пор не учитывалось.

### 1.3.3 Взаимодействие с оптическими фононами

Энергия оптических фононов часто превышает энергию ионизации мелко-го примесного центра. В этом случае оптические фононы могут приводить к прямой рекомбинации на примесные уровни. Этот канал рекомбинации становится существенным при наличии примесных уровней с энергией связи  $E_i = \hbar\omega_0 - kT_{eff}$ , где  $T_{eff}$  – эффективная электронная температура. Если это условие не выполняется, скорость рекомбинации с излучением оптических фононов все же может превысить скорость каскадной рекомбинации при взаимодействии с акустическими фононами при больших концентрациях центров, поскольку в захвате с излучением оптических фононов могут участвовать более локализованные состояния [35]. Это связано с тем, что орбиты соседних центров, существенные для каскадного захвата, имеют больший радиус и перекрываются при меньших концентрациях, чем орбиты, на которые идет захват с излучением оптических фононов. Рекомбинация при спонтанном излучении оптических фононов и связанные с ней примесные эффекты в р-Ge лазере на межподзонных переходах горячих дырках рассматривается в главе 2. Если энергия ионизации больше энергии оптического фонона, возможно резонансное взаимодействие с оптическими фононами в случае близости энергии оптического фонона к энергии примесного перехода. Такое явление было экспериментально обнаружено в Si:Bi, Si:Ga [24] и теоретически исследовано в работе [25]. Инверсная заселенность примесных состояний при оптическом возбуждении, связанная с опустошением состояния, резонансно взаимодействующего с оптическими фононами, рассматривается в главе 4.

### 1.3.4 Взаимодействие с свободными носителями заряда

При больших концентрациях свободных носителей заряда возрастает роль ударных процессов в формировании населенностей примесных состояний.

В работах [57, 58, 59] расчет скорости прямой ударной ионизации и рекомбинации для водородоподобных состояний проводился с использованием Блоховских функций для состояний свободных носителей. В [57] расчет проводился в приближении  $T_{eff} \ll E_I$ , а в [58, 59] – в приближении  $T_{eff} \gg E_I$ . Сечения ударной ионизации, рассчитанные в [57, 58, 59] моно-

точно возрастают с ростом энергии, в то время как сечения, рассчитанные в работах [36, 60] имеют максимум вблизи порога ионизации. В работе [36] это различие объясняется ролью рассеяния ионизованных носителей на потенциале примеси, которое не учитывалось в работах [57, 58, 59] и утверждается, что приближение Блоховских волн дает правильную оценку скорости ионизации основного и возбужденных состояний при  $T_{eff} \ll E_I$ , в противном случае оценка оказывается завышенной. Причиной завышенной оценки является, по-видимому, так же и приближенное интегрирование, примененное в работах [57, 58, 59], без учета спадания волновой функции примесного состояния на масштабе изменения волновых векторов, соответствующих переходу.

Вследствие трудоемкости расчета сечений ударных процессов часто используется феноменологическое описание для ионизации с основного состояния кулоновских центров в полупроводниках [62, 28, 13]. Экспериментально измеренное сечение ударной ионизации атома водорода [63] описывается формулой:

$$\sigma^{Auger}(E) = 2.25 \sigma_0 (E/E_I - 1)(E/E_I)^{-5/4}, \quad (1.16)$$

где  $\sigma_0$  является феноменологическим параметром, приблизительно равным  $\pi a_B^2$ . Однако, это выражение не дает зависимости скорости ударной ионизации от энергии связи уровня.

В работе [12] при исследовании явления гистерезиса вольт-амперной характеристики в пороговом режиме, связанного с ударной ионизацией возбужденных примесных состояний, для анализа последней используются сечения ионизации и возбуждения для атома водорода [60]. В последней работе используется Борновское приближение, которое предполагает, что состояния ионизирующего электрона описываются плоскими волнами, связанного — состояниями атома водорода, а ионизованного — Кулоновской волновой функцией. Влияние обменных процессов и экранирования кулоновского потенциала в [60] не рассматривалось. При этом сечения ударных переходов между состояниями  $i$  и  $j$  выражаются через Форм-факторы переходов  $\mathcal{F}_{i,j}(k)$ :

$$\sigma_{i,j}^{Auger} = \frac{8\pi}{a_B^2 k_0^2} \int_{k_0-k_1}^{k_0+k_1} |\mathcal{F}_{i,j}(k)|^2 k^{-3} dk, \quad \mathcal{F}_{i,j}(k) = \int \Phi_i^*(\mathbf{r}) e^{ikz} \Phi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.17)$$

где  $k_0$  и  $k_1$  - начальный и конечный волновые вектора свободного носителя заряда, удовлетворяющие закону сохранения энергии.

В соответствии с [57], для Оже переходов по примесным состояниям при неупругом рассеянии основных носителей вклады прямых и обменных процессов в скорости переходов для столкновения частиц с одинаковыми спинами близки по величине и существенно превышают интерференционное слагаемое в матричном элементе и вклад столкновений частиц с различными спинами. Это означает, что вероятности таких переходов близки к рассчитанным в пренебрежении обменными эффектами. Экранирование кулоновского потенциала свободными носителями заряда, в соответствии с [57], может быть существенно лишь для переходов между с изменением энергии порядка  $\Delta E = \hbar^2/2m^*R_d^2$ , где  $R_d$  - Дебаевский радиус. При эффективной температуре носителей порядка энергии ионизации основного состояния эта энергия составляет обычно меньше 0.1 мэВ.

Расчеты для атома водорода [60] показывают, что максимум сечения возбуждения растет с уменьшением разности энергий уровней  $\Delta E$  приблизительно как  $\Delta E^{-2}$ . Увеличение сечений возбуждения с уменьшением разности энергий уровней связано с большей вероятностью кулоновского рассеяния с малым изменением импульса. Это приводит к тому, что Оже переходы между соседними уровнями более вероятны. В работе [12, 13] показано, что во всех случаях, когда существенна ударная ионизация, она носит каскадный характер.

Каскадную ионизацию возбужденных состояний и каскадный захват при соударениях удобно описывать квазиклассически [53]. Строго квазиклассический подход применим при описания ударных процессов лишь для многозарядных центров. Квазиклассический расчет ударной рекомбинации впервые был проведен для захвата электрона на ион в газоразрядной плазме [64, 65]. В работе [53] показано, что при концентрациях свободных носителей  $n > 1/L_0(\varepsilon T/e^2)^2$  ( $L_0$  - длина свободного пробега при рассеянии на акустических фононах,  $\varepsilon$  - диэлектрическая проницаемость,  $e$  - заряд электрона) скорость каскадного Оже захвата превышает скорость каскадной рекомбинации при взаимодействии с акустическими фононами.

При температуре свободных носителей  $T_{eff} \geq E_i$  возрастает роль ударной ионизации уровней с энергией  $E_i$ . В случае, когда эффективная температура носителей выше температуры решетки  $T_l$ , ударная ионизация может преобладать, в то время как захват определяется фононами. В этом

случае, как показано в главе 1, каскадный захват может оказаться неэффективным из-за быстрой ударной ионизации возбужденных состояний с энергиями  $kT_l \leq E_i \leq kT_f$ , роль одноквантовых процессов при этом возрастает.

## 1.4 Расчет неравновесных населенностей примесных состояний

При расчете примесных населенностей основную трудность представляет расчет матричных элементов переходов между различными уровнями при взаимодействии с различными возмущениями. Основные процессы, формирующие населенность примесных состояний — переходы при взаимодействии с акустическими фононами и при соударениях, рассмотренные выше, носят каскадный характер. Это приводит к тому, что при расчете населенностей примесных уровней нельзя ограничиваться рассмотрением уравнений баланса для нескольких нижних примесных уровней, как это делается в работах [12, 13]. Состояния, близкие к свободной зоне, где спектр особенно густой, даже когда слабо заселены, играют, однако, из-за быстрых переходов по этим состояниям, существенную роль в формировании населенностей нижележащих уровней. С другой стороны, квазиклассическое описание, применяемое при расчете каскадного захвата [53], не учитывает переходы по нижним примесным состояниям, которые не могут быть рассчитаны квазиклассически.

В настоящей работе для расчета стационарных населенностей предложен вероятностный метод, который позволяет описывать населенности нижних возбужденных примесных состояний и состояний квазинепрерывного спектра и континуума согласованно, учитывая переходы по всей лестнице примесных состояний. Этот метод удобен для описания каскадных процессов, поскольку позволяет выделить ограниченное число матричных элементов переходов между примесными состояниями, которые существенны для расчета населенностей отдельных уровней, на основе анализа вероятности различных маршрутов носителей по примесным состояниям.

### 1.4.1 Вероятностный метод описания населенностей примесных состояний

В рамках данного метода примесные уровни описываются вероятностями  $P_{i,j,k}$ , что носитель заряда с уровня  $i$  попадет на уровень  $j$  до того, как он достигнет уровня  $k$ . Эти вероятности являются решением системы уравнений:

$$P_{i,j,k} = \frac{\mathbf{W}_{i,j} + \sum_{l \neq i,j,k} \mathbf{W}_{i,l} P_{l,j,k}}{\sum_l \mathbf{W}_{i,l}}, \quad (1.18)$$

где  $\mathbf{W}_{j,k}$  – скорость перехода с  $j$  на  $k$  уровень. Заметим, что  $P_{l,k,j} = 1 - P_{l,j,k}$ . Действительно, соответствующие события являются дополнительными. Эти уравнения можно вывести, основываясь на том, что последовательные переходы между уровнями – независимые процессы и вероятность нескольких независимых событий равна произведению их вероятностей. Отношение населенностей уровней выражается в терминах вероятностей следующим образом:

$$\frac{n_k}{n_j} = \frac{\widetilde{W}_{j,k}}{\widetilde{W}_{k,j}}, \quad (1.19)$$

$$\widetilde{W}_{j,k} = \mathbf{W}_{j,k} + \sum_{i \neq k,j} \mathbf{W}_{j,i} P_{i,k,j}, \quad (1.20)$$

$\widetilde{W}_{j,k}$  – полная скорость перехода с  $j$  на  $k$  уровень, учитывающая различные возможные пути по лестнице возбужденных примесных состояний.

Следует отметить, что в этом описании можно рассматривать группу состояний, в том числе и зону свободных состояний в целом, как один из уровней  $j$ . При этом  $\mathbf{W}_{k,j}$  – представляют собой сумму скоростей переходов на состояния уровня  $j$ , а  $\mathbf{W}_{j,k}$  – скорость переходов, усредненная по состояниям  $j$  уровня с учетом распределения носителей, которое в случае зоны свободных состояний описывается кинетическим уравнением Больцмана.

Для получения абсолютных значений населенностей следует дополнить описание уравнением электронейтральности:

$$N_i - N_c = \sum n_i, \quad (1.21)$$

где  $N_i$  и  $N_c$  – концентрации основной и компенсирующей примеси.

Как удастся показать, вероятностное описание эквивалентно описанию с помощью уравнений баланса. Для доказательства рассмотрим систему из  $K$  уровней. Стационарная населенность уровней описывается системой из  $K$  алгебраических уравнений баланса, из которых  $K - 1$  являются линейно независимыми:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \sum_{l \neq i} n_l \mathbf{W}_{l,i} - n_i \sum_{l \neq i} \mathbf{W}_{i,l} = 0, \quad (1.22)$$

Эта система будет однозначно определять населенности, если дополнить ее уравнением электронейтральности, однако для установления связи с вероятностным описанием оно не потребуется. Будем рассматривать отдельно уравнения баланса для уровней  $k$  и  $j$ . В остальных уравнениях перенесем слагаемые, содержащие  $n_k$  и  $n_j$  в правую часть, получив  $K - 2$  неоднородных уравнений для  $K - 2$  неизвестных. Вообще говоря, эти уравнения нелинейные, так как скорости переходов  $\mathbf{W}_{i,l}$  могут зависеть от населенностей. Однако, если рассматривать скорости переходов как параметры, можно выразить населенности всех уровней через  $n_k$ ,  $n_j$  и  $\mathbf{W}_{i,l}$ , решая систему  $K - 2$  уравнений как линейную. По правилу Крамера:

$$n_i = \Delta_i / \Delta, \quad (1.23)$$

где  $\Delta$  – определитель матрицы  $A = [a_{li}]$ ;  $l, i \neq j, k$  :

$$a_{li} = \begin{cases} \mathbf{W}_{i,l} & \text{если } i \neq l \\ \sum_{m \neq l} \mathbf{W}_{l,m} & \text{если } i = l \end{cases}, \quad (1.24)$$

$\Delta_i$  – определитель, получающийся из  $\Delta$  при замене элементов  $i$  столбца соответствующими свободными членами системы:

$$\Delta_i = \sum_{l \neq j, k} (\mathbf{W}_{j,l} n_j + \mathbf{W}_{k,l} n_k) M_{li}, \quad (1.25)$$

$M_{li}$  – алгебраическое дополнение соответствующего элемента в матрице (1.24). Подставляя в уравнение баланса для  $j$  уровня

$$0 = \frac{\partial n_j}{\partial t} = -n_j \sum_{l \neq j} \mathbf{W}_{j,l} + \sum_{i \neq j, k} \mathbf{W}_{i,j} n_i + \mathbf{W}_{k,j} n_k \quad (1.26)$$

выражения для  $n_i$  через  $n_k$  и  $n_j$  (1.23) и обозначая  $\sum_{i \neq j,k} \mathbf{W}_{i,j} M_{il} / \Delta = p_{l,j,k}$ , получаем для соотношения населенностей уровней выражение вида (1.19):

$$\frac{n_k}{n_j} = \frac{\mathbf{W}_{j,k} + \sum_{l \neq j,k} \mathbf{W}_{j,l} (1 - p_{l,j,k})}{\mathbf{W}_{k,j} + \sum_{l \neq j,k} \mathbf{W}_{k,l} p_{l,j,k}}. \quad (1.27)$$

Остается показать, что  $p_{l,j,k}$  описываются уравнениями (1.18). Действительно, уравнения (1.18) представляют собой систему неоднородных уравнений, матрица которой представляет собой транспонированную матрицу (1.24), а правая часть – столбец  $\mathbf{W}_{i,j}$ ,  $i \neq j, k$ . Решение такой системы единственно, если ее определитель отличен от 0, и по правилу Крамера:

$$P_{l,j,k} = \sum_{i \neq j,k} \mathbf{W}_{i,j} M'_{il} / \Delta', \quad (1.28)$$

где  $\Delta'$  – определитель матрицы системы (1.18),  $M'_{il}$  – алгебраическое дополнение соответствующего элемента. Поскольку определители транспонированных матриц совпадают, а  $M'_{il} = M_{li}$ , решение системы уравнений для вероятностей (1.28) совпадает с выражением для  $p_{l,j,k}$ , полученным из уравнений баланса. Таким образом, выражения для населенности уровней, полученные из вероятностного описания и стационарных уравнений баланса, совпадают, следовательно эти подходы эквивалентны.

Впервые вероятности такого рода были введены [6] в квазиклассической теории каскадного захвата при взаимодействии с акустическими фононами как *вероятности прилипания*  $P(U)$  – вероятности, что электрон с некоторого уровня энергии  $U$  достигнет основного примесного состояния до ионизации. Эти вероятности вычислялись исходя из предположения, что они не зависят от того, каким образом электрон попал на рассматриваемый уровень:

$$P(U) = \int_{U + \hbar\omega \leq 0} K(U, \hbar\omega) P(U + \hbar\omega) d\hbar\omega, \quad (1.29)$$

где  $K(U, \hbar\omega)$  – относительная вероятность перехода в единицу времени с уровня  $U$  с излучением фонона с энергией  $\hbar\omega$  в интервале  $d\hbar\omega$ . В дальнейшем для анализа влияния ударных процессов на неравновесную концентрацию свободных носителей заряда непосредственно из стационарных уравнений баланса для примесных состояний и уравнения электрической

нейтральности были выведены *модифицированные вероятности прилипания* [12, 13], которые отличались от предложенных Лэксом. Было выдвинуто предположение [12], что уравнения Лэкса для вероятностей прилипания, выведенные им из предположения о том, что последовательность переходов по примесным состояниям является Марковским процессом, не являются точными. Из настоящего рассмотрения следует, что расхождение было вызвано неточностью выражения населенностей через вероятности прилипания, примененное в работе [12]. А именно, как видно из (1.23), соотношение полных скоростей ионизации и рекомбинации должно соответствовать отношению концентрации свободных носителей заряда к населенности основного примесного состояния, а не отношению концентрации свободных носителей заряда к полной концентрации связанных носителей, как предполагается в [12].

В настоящей работе метод вероятностей Лэкса обобщен для расчета неравновесной заселенности возбужденных примесных состояний [A12]. Установлено, что система уравнений для вероятностей, частным случаем которых являются уравнения Лэкса, эквивалентна системе уравнений баланса. В то же время такой подход обладает преимуществами, так как позволяет обоснованно ограничивать число необходимых для расчета стационарной населенности отдельных примесных уровней матричных элементов переходов на основе анализа вероятностей различных маршрутов носителей по примесным уровням. При этом возможно оценивать точность приближений, поскольку вероятность некоторого пути носителя заряда по лестнице возбужденных примесных состояний представляет собой произведение вероятностей последовательных переходов, и, следовательно, не может превышать вероятности наименее вероятного из них. Кроме того, вероятностный подход более наглядно описывает формирование населенностей в системах с большим числом возможных состояний.

Следует также отметить, что эквивалентность вероятностного описания и описания с помощью уравнений баланса доказана для произвольных систем линейных алгебраических уравнений и вероятностный метод может оказаться полезным для решения систем линейных алгебраических уравнений с неопределенностью в задании коэффициентов.

Результаты этого раздела опубликованы в работе [A12]

## 1.4.2 Квазиклассическое описание населенностей возбужденных примесных состояний

В случае, когда времена процессов, формирующих распределение свободных носителей заряда быстрее времен рекомбинационно-ионизационных процессов, а верхние возбужденные состояния слабо заселены, распределение носителей по нижним примесным состояниям может быть рассчитано вероятностным методом в приближении заданного распределения свободных носителей заряда. Если рекомбинация и ионизация не только определяют концентрацию свободных носителей, но и существенно влияют на их распределение, и в случае, когда верхние возбужденные состояния существенно заселены, распределение по примесным состояниям и в непрерывном спектре следует описывать согласованно. В работах [64, 8] впервые применено квазиклассическое описание верхних возбужденных состояний уравнением Больцмана. В работе [13] предложена процедура Монте-Карло для расчета распределения по примесным состояниям, которые описывались как продолжение непрерывного спектра в область отрицательных энергий с вероятностями переходов, усредненными в слое фазового пространства с постоянной полной энергией в поле примесных центров. Однако переходы по нижним примесным состояниям при этом не учитывались.

Вероятностный подход для описания распределения по нижним примесным состояниям может быть использован совместно с квазиклассическим описанием для населенностей верхних возбужденных примесных состояний. При этом функция распределения по верхним возбужденным состояниям и состояниям континуума является решением уравнения Больцмана, а вероятностное описание позволяет получить граничное условие для уравнения Больцмана при энергии, соответствующей энергии ионизации одного из примесных уровней квазинепрерывного спектра. Таким образом удастся учесть влияние особенностей дискретного спектра примесных состояний на время жизни свободных носителей заряда и распределение носителей по верхним возбужденным примесным состояниям (см. главу 4).

Квазиклассическое описание [64, 8], применимо, когда на масштабе длины волны потенциал центра можно считать неизменным (см. раздел 1.1) и за время столкновения длина волны носителя меняется незначительно [6]. Распределение носителей заряда в потенциале примесных ионов  $V(\mathbf{r})$  описывается уравнением Больцмана, причем вероятность рассеяния

носителя с полной энергией  $E$  в точке  $\mathbf{r}$  считается такой же, как для свободной частицы с той же кинетической энергией  $\mathcal{E} = E - V(\mathbf{r})$ .

Если длина свободного пробега больше размеров орбиты, можно считать, что функция распределения носителей  $f$  зависит только от полной энергии. Если рассеяние квазиупругое (характерное изменение энергии при рассеянии мало по сравнению с энергией носителя и масштабом изменения функции распределения), что часто справедливо для рассеяния на акустических фононах и при соударениях, интеграл столкновений может быть приведен к виду Фоккера-Планка [8]. Уравнение может быть получено усреднением уравнения Фоккера-Планка для свободных носителей в слое фазового пространства с постоянной полной энергией в поле кулоновских центров:

$$\tilde{\rho} \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial E}, \quad (1.30)$$

где  $\tilde{\rho}$  – плотность состояний в пространстве полной энергии, или квазиклассическая плотность состояний примесного центра (1.9),  $J$  – поток носителей заряда в пространстве полной энергии:

$$J = -B(E)f - D(E)\frac{\partial f}{\partial E}, \quad (1.31)$$

$B(E)$  – коэффициент энергетического динамического трения,  $D(E)$  – коэффициент энергетической диффузии. В случае рассеяния на равновесных акустических фононах при  $\sqrt{8ms^2E} \ll kT$ , а также при соударениях с свободными носителями заряда с Максвелловским распределением

$$D(E) = kTB(E). \quad (1.32)$$

Коэффициент энергетического динамического трения:

$$B(E) = \frac{1}{V} \int \int_V \mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) \tau_{\mathcal{E}}^{-1}(\mathcal{E}) \delta(E - \mathcal{E} + V(\mathbf{r})) d\mathcal{E} d\mathbf{r}, \quad (1.33)$$

где в случае взаимодействия с акустическими фононами [53]  $\tau_{\mathcal{E}}$  – время энергетической релаксации при спонтанном излучении акустических фононов:

$$\tau_{\mathcal{E}}^{ac}(\mathcal{E}) = \frac{\pi \hbar^4 \rho_c}{2m^{*3} E_D^2 s} \sqrt{\frac{m^* s^2}{2\mathcal{E}}}. \quad (1.34)$$

Для ударных процессов [66]

$$1/\tau_{\mathcal{E}}^{Auger}(\mathcal{E}) = \frac{2\sqrt{2}\pi n e^4 \Lambda}{\varepsilon^2 m^{*1/2} \mathcal{E}^{3/2}} \varphi(\mathcal{E}/T), \quad (1.35)$$

где  $\Lambda$  – кулоновский логарифм,  $\varphi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dy \sqrt{y} \exp(-y)$ . Следует отметить, что в работах по теории каскадного захвата усреднение проводилось в поле изолированного центра. В данной работе используется потенциал  $V(\mathbf{r})$  кулоновских центров, равномерно распределенных в пространстве (рис. 1). Это позволяет учесть влияние перекрытия орбит соседних центров на скорость рекомбинации. Необходимо различать скорость рекомбинации, которая определяет отношение населенностей основного примесного состояния и континуума и скорость, которая определяет время жизни носителей, участвующих в токе. Последняя при перекрытии орбит, существенных для каскадного захвата [8] представляет собой скорость энергетической релаксации свободных носителей до уровня флуктуаций потенциала примесных ионов, препятствующих свободному перемещению носителей заряда. Поскольку время рекомбинации на примесные уровни определяется релаксацией до уровня с энергией связи порядка температуры, оно может превышать времена жизни носителей, участвующих в токе, и не определяется уровнем флуктуаций.

Стационарное решение уравнения Фоккера-Планка (1.30) соответствующее постоянству потока частиц в пространстве полных энергий и граничному условию  $f = f(E_i)$  при  $E = E_i$ :

$$f = \frac{J \exp(-E/T)}{T} \int_{E_i}^E \frac{\exp(\mathcal{E}/T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E} + f(E_i) \exp\left(\frac{E_i - E}{T}\right). \quad (1.36)$$

При вычислении скорости каскадного захвата на изолированные центры использовались граничное условие  $f \rightarrow 0$  при  $E \rightarrow -\infty$ , которое означает, что частицы, попавшие на достаточно глубокий уровень, не возвращаются. Это условие позволяет отделить рекомбинационный поток от ионизационного. При этом величина рекомбинационного потока определялась с помощью граничного условия при  $E = 0$ , определяемого заданным распределением свободных носителей. При использовании равновесного значения  $f(E = 0)$  было получено равновесное сечение захвата [8]; использование распределения с эффективной температурой позволило учесть влияние разогрева носителей на каскадный захват [67].

В настоящей работе (Глава 4) для расчета распределения при оптической ионизации уравнение (1.30) решается в области энергий  $E_i < E < \infty$ . При этом  $f$  описывает непрерывным образом распределение носителей как в зоне свободных состояний, так и по верхним возбужденным состояниям. Объединение вероятностного описания нижних возбужденных состояний и квазиклассического описания верхних возбужденных состояний достигается постановкой граничных условий для квазиклассической функции распределения при некоторой отрицательной энергии  $E_i$  ( $|E_i| \ll E_I$ ) исходя из того, что квазиклассическое описание и вероятностное должны давать одинаковое число носителей на примесных состояниях в единице объема в малом интервале энергий:  $\tilde{\rho}(E)f(E)dE = \rho_{loc}n_idE$  Для состояний, орбиты которых не перекрываются:

$$f(E_i)N^+ = n_i, \quad (1.37)$$

Таким образом, квазиклассическая функция распределения  $f(E_i)$  представляет собой отношение числа заполненных к числу свободных примесных состояний в отличие от вероятности заполнения состояния  $f_i = n_i/N_I$  (1.10), которая при переходе к континууму терпит скачок.

Вероятностное описание позволяет выразить населенности нижних возбужденных состояний через населенность одного из них (1.19). С помощью граничных условий (1.37) через него же выражается и функция распределения квазинепрерывного спектра. Решение уравнения электронейтральности (1.21) относительно населенности этого состояния дает абсолютные значения населенностей.

## Глава 2

# Примесные эффекты в p-Ge лазере на горячих дырках

Впервые инверсия и усиление на примесных переходах наблюдалась в Ge:Ga лазере на межподзонных переходах горячих дырок в скрещенных электрическом и магнитном полях. Межподзонная инверсия населенностей в p-Ge лазере формируется при баллистическом разогреве тяжелых дырок до энергии оптического фонона с последующим рассеянием на оптических фононах и накоплении легких дырок на замкнутых траекториях в импульсном пространстве [68, 5]. Ряд экспериментальных результатов не поддаются объяснению в рамках межподзонных переходов свободных дырок. Это: дискретные линии в спектре лазерной генерации с частотами, близкими к примесным переходам [20, 19] (рис. 3), уменьшение сопротивления образца Ge:Ga в течение импульса стимулированного излучения [4, 69], эффект смены знака временной задержки импульса излучения p-Ge лазера при его фотовозбуждении длинноволновым инфракрасным (ДИК) излучением [70].

Расчеты, проведенные в настоящей работе, показывают, что перечисленные результаты объясняются переходами в спектре связанных состояний мелких акцепторов. Ранее они не учитывались по причине предполагавшейся их малой заселенности, что справедливо для равновесного распределения носителей заряда с температурой  $T_{eff}$  порядка энергии

оптического фонона  $\hbar\omega_0 > E_I$ . Действительно, равновесная вероятность заполнения примесных состояний (1.2):

$$F_i = \frac{\exp\left(\frac{\mu - E_i}{T_{eff}}\right)}{\sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T_{eff}}\right) + 1}. \quad (2.1)$$

При условии  $\hbar\omega_0 > E_I$  вероятности заполнения для всех примесных состояний одного порядка или меньше, чем вероятность заполнения состояний вблизи дна зоны  $F(E=0) = \exp(\mu/T_{eff})$ . Химический потенциал  $\mu$  определяется из условия электронейтральности:

$$N_A - N_D = n + N_A \sum F_i, \quad (2.2)$$

где  $N_A$  и  $N_D$  – концентрации акцепторов и доноров. Концентрация свободных носителей

$$n = \exp(\mu/T_{eff}) N_v, \quad N_v(T_{eff}) = \int \exp(-E/T_{eff}) \rho(E) dE, \quad (2.3)$$

$N_v(T_{eff})$  – эффективная концентрация состояний валентной зоны. Концентрация связанных носителей

$$N_A \sum F_i = N_A / (1 + 1/N_l \exp(\mu/T_{eff})), \quad N_l = \sum_{E_i < E_N} \exp(E_i/T_{eff}), \quad (2.4)$$

$N_l$  – эффективное число возбужденных состояний кулоновского центра ( $E_N$  – энергия, ниже которой нет перекрытия орбит соседних центров). При условии

$$N_A N_l / N_v(T_{eff}) \ll 1, \quad (2.5)$$

которое всегда выполняется в р-Ge лазере, число локализованных носителей мало по сравнению с числом носителей заряда в состояниях валентной зоны и  $\exp(\mu/T_{eff}) \approx (N_A - N_D)/N_v$ . При эффективной температуре  $T_{eff}$  порядка энергии оптического фонона ( $\hbar\omega_0 = 37$  мэВ)  $N_v(T_{eff}) > 10^{18}$  см<sup>-3</sup>, и используемом в Ge:Ga лазере уровне легирования  $N_A \simeq 10^{14}$  см<sup>-3</sup> вероятности заполнения локализованных и свободных состояний не превышают  $10^{-4}$ . При такой населенности примесных состояний они не могли бы давать существенного вклада в поглощение, усиление и увеличение тока при ионизации.

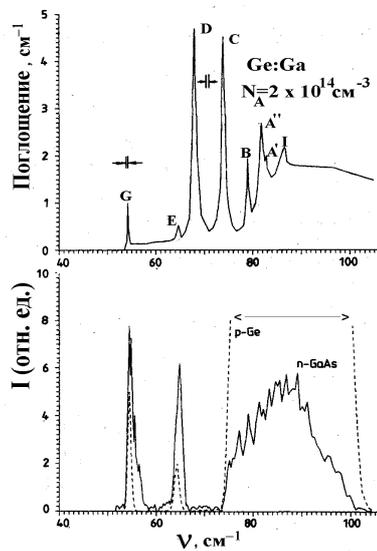
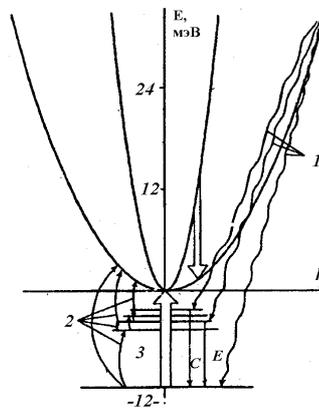


Рис. 3. Спектры излучения Ge:Ga лазера ( $H=7$  кЭ,  $E=800$  В/см), полученные с Ge:Ga и n-GaAs детекторами (внизу), и спектр поглощения Ge:Ga при  $T=9$  К (R. Jones, P. Fisher, J. Phys. Chem. Solids, 26, 1125 (1965)). Рис.



4. Схема переходов в Ge:Ga лазере: 1) рекомбинация с излучением оптических фононов. 2) ударная ионизация, 3) фотоионизация излучением на  $l-h$  переходах с  $> 90$   $\text{см}^{-1}$ , C и E - возможные линии примесного усиления.

Расчеты, приведенные в данной главе показывают, что разогрев носителей заряда до энергий порядка оптического фонона при температуре решетки 10–20 K (рабочие температуры р-Ge лазера) приводит к увеличению скорости рекомбинации за счет переходов при спонтанном излучении оптических фононов (Рис. 4). В результате населенность наиболее глубоких акцепторных уровней, которые не успевают оголяться в результате ударных процессов, оказывается аномально высокой (порядка нескольких процентов).

## 2.1 Модель и предположения

Вследствие большого различия масс легких  $m_l = 0.042m_0$  и тяжелых  $m_h = 0.38m_0$  дырок ( $m_0$  – масса свободного электрона), эффективная концентрация свободных состояний в тяжелой подзоне существенно больше, чем в легкой ( $N_h/N_l = (m_h/m_l)^{3/2}$ ). Это приводит к тому, что тяжелые дырки составляют основную массу свободных носителей заряда. Населенность примесных состояний определяется в основном рекомбинацией тяжелых дырок и ионизацией в тяжелую подзону. С другой стороны, состояния мелких акцепторных центров формируются в основном из состояний тяжелой подзоны, их локализация близка к локализации состояний кулоновского центра под невырожденной зоной с массой тяжелых дырок [31]. Поэтому для расчета населенностей примесных состояний была принята модель простой параболической зоны с массой тяжелых дырок  $m_h$ . Взаимодействие с оптическими и акустическими фононами рассматривалось в модели простой изотропной зоны [66] с использованием соответствующих констант акустического деформационного потенциала  $\Xi = 4.75$  эВ [53] и оптического деформационного потенциала  $D_0^2 = 3d_0/2a_0$ , где  $d_0 = 32$  эВ [66]

Распределение дырок в сильных скрещенных  $\vec{E} \perp \vec{H}$  полях при криогенных температурах рассчитывалось в ряде работ [68, 71] в связи с анализом усиления на межподзонных переходах. Было показано, что быстрые процессы баллистического разогрева в электрическом поле ( $\tau^E < 10^{-11}$  с) и рассеяния на оптических фононах ( $\tau^{opt.ph.} \simeq 10^{-12}$  с) формируют распределение тяжелых дырок с эффективной температурой порядка энергии оптического фонона. Так как характерные времена этих процессов значительно меньше времен рекомбинации (см. раздел 2.3.4), можно

считать, что рекомбинационно-ионизационные процессы влияют лишь на число свободных носителей, но не на их распределение, и рассчитывать населенность примесных уровней в приближении заданного распределения свободных носителей. В настоящих расчетах использовалось Максвелловское распределение свободных носителей заряда с температурой  $T_{eff} = \hbar\omega_0/2$ .

Расчет влияния сильных  $\vec{E} \perp \vec{H}$  полей на состояния акцепторов ранее не проводился и в настоящей работе влияние полей на локализованные примесные состояния не учитывалось. Следует отметить, что делокализации связанных состояний, которая может быть вызвана сильными электрическими полями, препятствует магнитное поле. Это подтверждается результатами экспериментов по наблюдению фотопроводимости в сильных скрещенных  $\vec{E} \perp \vec{H}$  полях в GaAs [72], которые показали примесные линии, положение и ширина которых не менялись в электрическом поле до 1 кВ/см при значении магнитного поля  $B = 4 \div 6$  Тл.

## 2.2 Расчет населенностей примесных состояний в Ge:Ga лазере

Схема переходов, формирующих населенности примесных состояний представлена на Рис. 4. Для расчета населенностей акцепторных уровней применялся вероятностный метод ( см. раздел 1.4.1). В рамках этого метода отношение населенностей примесных состояний к концентрации свободных носителей:

$$\frac{n_i}{n} = \frac{\widetilde{W}_{v,i}}{\widetilde{W}_{i,v}}, \quad (2.6)$$

где  $\widetilde{W}_{i,v}$  и  $\widetilde{W}_{v,i}$  полные скорости ионизации и рекомбинации для состояния  $i$ , включающие все возможные маршруты носителей по примесным состояниям:

$$\widetilde{W}_{i,v} = \mathbf{W}_{i,v} + \sum_{j \neq i} \mathbf{W}_{i,j} P_{j,v,i}, \quad \widetilde{W}_{v,i} = \mathbf{W}_{v,i} + \sum_{j \neq i} \mathbf{W}_{v,j} (1 - P_{j,v,i}). \quad (2.7)$$

При концентрации дырок  $n = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , типичной для p-Ge лазера, и их средней энергии  $T_{eff} = \hbar\omega_0/2$ , превышающей энергию ионизации основ-

ного состояния  $E_I = 11,4$  мэВ, скорости переходов между акцепторными уровнями при соударениях с дырками (Оже-переходы)  $\mathbf{W}_{i,j}^{Auger}$  не менее чем на порядок превышают скорости соответствующих переходов при взаимодействии с акустическими фононами  $\mathbf{W}_{i,j}^{ac}$  при низких температурах решетки. На Рис. 5 представлена скорость ударной ионизации, расчет которой обсуждается ниже (раздел 2.4) и скорость релаксации с излучением акустических фононов. Для верхних возбужденных состояний используется вероятность перехода с излучением акустических фононов, полученная в квазиклассическом приближении в [8], для нижних состояний, разность энергий которых превышает характерный шаг релаксации в квазиклассическом приближении, используются вероятности переходов, полученные для акцепторных уровней Ge в работе [9].

В то же время сечения Оже-переходов между состояниями кулоновских центров быстро растут с уменьшением изменения энергии [60]. Поэтому ударные процессы носят каскадный характер. В соответствии с принципом детального баланса вероятности переходов между любыми состояниями  $i$  и  $j$  при взаимодействии с свободными носителями с температурой  $T_{eff}$  связаны следующим образом:

$$\frac{\mathbf{W}_{i,j}^{Auger}}{\mathbf{W}_{j,i}^{Auger}} = \exp\left(\frac{E_i - E_j}{T_{eff}}\right). \quad (2.8)$$

Таким образом при  $T_{eff} > E_I$  вероятности  $\mathbf{W}_{i,j}^{Auger}$  и  $\mathbf{W}_{j,i}^{Auger}$  отличаются мало. Поскольку плотность состояний кулоновского центра растет с уменьшением энергии ионизации как  $E_i^{-5/2}$ , а сечения возбуждения не медленнее, чем  $E_i^{-1}$  Оже-переходы при  $T_{eff} > E_I$  значительно более вероятны в направлении верхних возбужденных уровней. Вероятность  $P_{j,i,v}$  того, что носитель с уровня  $j$  попадет на возбужденное состояние  $i$  с  $E_i < E_j$  до ионизации не превышает половины процента, соответственно,  $P_{j,v,i} \approx 1$ .

Таким образом, в условиях р-Ge лазера каскадный захват с излучением акустических фононов не является эффективным механизмом рекомбинации, поскольку носители быстро выбиваются с высоковозбужденных примесных уровней, играющих основную роль в каскадном захвате и времена жизни на примесных состояниях определяются каскадной ударной ионизацией:

$$\widetilde{W}_{iv}^{Auger} = \mathbf{W}_{i,v}^{Auger} + \sum_{E_j > E_i} \mathbf{W}_{i,j}^{Auger}. \quad (2.9)$$

С другой стороны, при  $kT_{eff}$  порядка  $\hbar\omega_0$  становится существенным число свободных носителей, имеющих энергию, достаточную для того, чтобы при излучении оптического фонона оказаться на примесном уровне, и этот процесс становится основным каналом рекомбинации. Поскольку вероятность того, что носитель с некоторого состояния попадет на возбужденное состояние  $i$  до ионизации мала, основную роль играет прямая рекомбинация. Скорость прямой рекомбинации с излучением оптических фононов  $\mathbf{W}_{v,i}^{o.p.}$  рассчитывается в следующем разделе.

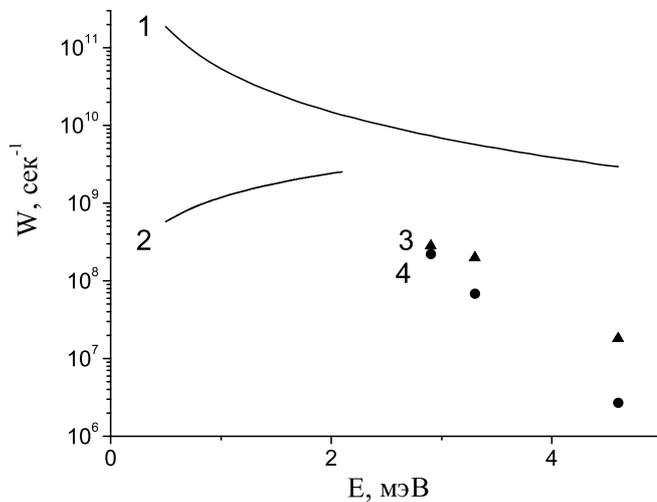
## 2.3 Рекомбинация при спонтанном излучении оптических фононов

### 2.3.1 Квазиклассическое приближение.

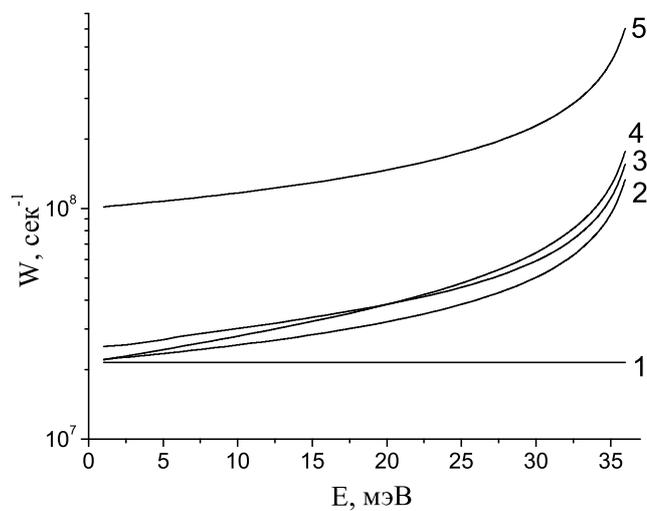
Первоначально расчет рекомбинации при излучении оптических фононов проводился в рамках квазиклассического приближения [6]. В этом приближении рассчитывается движение носителя заряда с некоторой эффективной массой в поле притягивающего центра. Вероятность испускания оптических фононов в каждой точке орбиты считается такой же как у свободного электрона с энергией равной кинетической энергии в данной точке орбиты. Сечение рекомбинации в единицу времени для носителя заряда с энергией  $E$  при спонтанном излучении оптического фонона:

$$\sigma^{o.p.}(E) = \frac{\pi^2}{4} \left( \frac{e^2}{\varepsilon\hbar\omega_0} \right)^2 \frac{e^2}{\varepsilon E} \nu_0 \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar\omega_0}} \frac{(1 + 0.85(1 - E/\hbar\omega_0))^{1/2}}{(1 - E/\hbar\omega_0)^{5/2}}, \quad (2.10)$$

где  $\nu_0$  – характерная частота испускания оптического фонона (скорость рассеяния свободных носителей при спонтанном излучении оптических фононов  $W^{o.p.}(E) = \nu_0 \sqrt{E/\hbar\omega_0 - 1}$ ). В этом приближении получено сечение рекомбинации на все примесные состояния в целом в приближении квазинепрерывного спектра состояний. Однако, для расчета населенностей примесных состояний необходимо знать скорость рекомбинации на отдельные примесные состояния. Оценить среднюю скорость рекомбинации свободных носителей на один примесный уровень  $\mathbf{W}_{v,i}^{o.p.}$  можно и в рамках квазиклассического приближения, учитывая, что число частиц,



**Рис. 5** Скорости переходов с примесных уровней в Ge:Ga лазере: 1 - ударная ионизация; 2 - релаксация с излучением акустических фононов, квазиклассическое приближение; 3,4 - переходы при спонтанном излучении акустических фононов с нижних примесных состояний [9].



**Рис. 6** Скорость рекомбинации с излучением оптических фононов в водородо-подобные состояния: 1 - приближение плоских волн; 2 - с учетом рассеяния,  $E \ll E_B$ , в состоянии  $1s$  [53]; 3 - с учетом рассеяния, в состоянии  $1s$ ; 4 - квазиклассическое приближение; 5 - с учетом рассеяния  $E_1 \gg E_B$ ,  $1s$  [35].

рекомбинирующих в единицу времени в единице объема на примесные состояния в интервале энергий между  $(E - \hbar\omega_0)$  и  $(E - \hbar\omega_0) + dE$ :

$$dN = N^+ \sigma^{o.p.}(E) v(E) \rho(E) f(E) dE = n \mathbf{W}_{v,i}^{o.p.,q} \rho_{loc}(E_i = E - \hbar\omega_0) dE, \quad (2.11)$$

где  $v(E)$  – скорость свободного носителя,  $n$  – концентрация свободных носителей,  $\rho_{loc}(E_i) = E_B^{3/2}/2|E_i|^{5/2}$  согласно (1.7). Для средней скорости рекомбинации с излучением оптических фононов на одно примесное состояние с энергией  $E_i$  в квазиклассическом приближении получаем:

$$\mathbf{W}_{v,i}^{o.p.,q} = N^+ \nu_0 \left(1 + 0.85 \frac{E_i}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2} \frac{f(E_i + \hbar\omega_0)}{n}, \quad (2.12)$$

С другой стороны,  $\mathbf{W}_{v,i}^{o.p.} = \frac{N^+ L^3}{n} \int W_{\mathbf{k} \rightarrow i} \rho(E) f(E) dE$ , и в приближении постоянной энергии оптического фонона для вероятности перехода между состояниями  $\mathbf{k}$  с энергией  $E$  и  $i$  из выражения (2.12) можно получить:

$$W_{\mathbf{k} \rightarrow i}^{o.p.,q} = \frac{\nu_0}{\rho(E) L^3} \left(1 + 0.85 \frac{E_i}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2} \delta(E - E_i - \hbar\omega_0). \quad (2.13)$$

Квазиклассическое описание справедливо для возбужденных состояний с  $|E_i| \ll E_B$ .

### 2.3.2 Приближение плоских волн

Электрон-фононное взаимодействие описывается в рамках теории возмущений вероятностью перехода между состояниями электрон-фононной системы.

$$W_{\mathbf{k},c \rightarrow i,c'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i, c' | H_{eph} | \mathbf{k}, c \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k},c} - E_{i,c'}), \quad (2.14)$$

где  $\mathbf{k}$  и  $i$  – электронные состояния,  $c$  и  $c'$  – состояния фононной подсистемы. В изотропной модели рассеяния на оптических фононах дырок валентной зоны германия [66] оператор электрон-фононного взаимодействия, объединяющий три возможных поляризации деформационных оптических фононов:

$$H_{eph} = D_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho_c w_q L^3}} \sum_{\mathbf{q}} (e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathbf{a}_{\mathbf{q}} + e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathbf{a}_{\mathbf{q}}^+), \quad (2.15)$$

$L^3$  и  $\rho_c$  – объем и плотность кристалла,  $D_0$  – константа оптического потенциала деформации, усредненная по направлениям волнового вектора и поляризациям оптических фононов  $D_0 = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{d_0}{a_0}$  ( $a_0$  – постоянная решетки,  $d_0 = 32$  эВ – константа, определяющая расщепление дна валентной зоны германия при оптической деформации).  $\mathbf{a}_\mathbf{q}^+$ ,  $\mathbf{a}_\mathbf{q}$  – операторы рождения и уничтожения оптических фононов с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и частотой  $w_\mathbf{q}$ . Матричные элементы этих операторов отличны от нуля только для фононных состояний, в которых число фононов соответствующей моды отличается на 1, а в других модах неизменно:

$$\langle n_\mathbf{q} + 1 | \mathbf{a}_\mathbf{q}^+ | n_\mathbf{q} \rangle = \sqrt{(n_\mathbf{q} + 1)}, \quad \langle n_\mathbf{q} - 1 | \mathbf{a}_\mathbf{q}^+ | n_\mathbf{q} \rangle = \sqrt{n_\mathbf{q}}, \quad (2.16)$$

Вероятность перехода при излучении оптического фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$  между состояниями  $\mathbf{k}$  и  $i$  в единицу времени:

$$W_{1 \rightarrow 2}^\mathbf{q} = \frac{\pi D_0^2 (n_\mathbf{q} + 1)}{\rho_c w_\mathbf{q} L^3} |\langle i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E(\mathbf{k}) - E_i - \hbar w_\mathbf{q}), \quad (2.17)$$

$n_\mathbf{q}^c$  – число фононов с волновым вектором  $\mathbf{q}$  в состоянии  $s$ . Чтобы получить полную вероятность перехода в единицу времени между электронными состояниями, нужно суммировать по конечным и усреднить по начальным состояниям фононной подсистемы. При низких температурах решетки  $n_\mathbf{q} \ll 1$ . Суммирование по конечным состояниям сводится к суммированию по волновым векторам испускаемых фононов. Пренебрегая дисперсией оптических фононов в пределах локализации примесного состояния в пространстве волновых векторов.  $w_\mathbf{q} = \omega_0$ , получаем

$$W_{\mathbf{k} \rightarrow i} = \frac{\pi D_0^2}{\rho_c \omega_0 L^3} \delta(E(\mathbf{k}) - E_i - \hbar \omega_0) \sum_{\mathbf{q}} |\langle i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \mathbf{k} \rangle|^2, \quad (2.18)$$

Для огибающих волновых функций электронов с  $E(\mathbf{k}) \gg E_B$  можно использовать приближение плоских волн [73]. Для невырожденного закона дисперсии:

$$\phi_\mathbf{k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_n(\mathbf{r}), \quad (2.19)$$

где  $u_n(\mathbf{r})$  – волновая функция дна зоны. Для состояний кулоновского центра в приближении эффективных масс:

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}), \quad (2.20)$$

где  $\Phi(\mathbf{r})$  огибающая функция метода эффективных масс. Выделяя интегралы по быстро осциллирующим функциям, получаем, что матричные элементы  $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$  по электронным волновым функциям представляют собой огибающую связанного состояния в представлении волнового вектора:  $|\langle i|e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}|\mathbf{k}\rangle| = c(\mathbf{k} - \mathbf{q})$ . Учитывая условие нормировки  $\sum_{\mathbf{q}} |c(\mathbf{k} - \mathbf{q})|^2 = 1$ :

$$W_{\mathbf{k}\rightarrow i} = \frac{\pi D_0^2}{\rho_c L^3 \omega_0} \delta(E(\mathbf{k}) - E_i - \hbar\omega_0), \quad (2.21)$$

Таким образом получаем вероятность перехода, не зависящую от энергии и вида примесного состояния. Следует отметить, что и вероятность перехода между состояниями континуума имеет ту же величину, так как  $\sum_{\mathbf{q}} |\langle \mathbf{k}'|e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}|\mathbf{k}\rangle|^2 = \sum_{\mathbf{q}} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}} = 1$ . Среднюю скорость рекомбинации свободных носителей на примесный уровень получаем, учитывая его вырождение и используя  $\nu_0 = \pi D_0^2 \rho(\hbar\omega_0) / \rho_c \omega_0$ :

$$\mathbf{W}_{v,i}^{o.p.,f} = \frac{N^+ L^3}{n} \int W_{\mathbf{k}\rightarrow i} \rho(E) f(E) dE = N^+ \nu_0 \frac{\rho(E_i + \hbar\omega_0)}{\rho(\hbar\omega_0)} \frac{f(E_i + \hbar\omega_0)}{n}, \quad (2.22)$$

Вероятность рекомбинации с излучением оптического фотона в этом приближении совпадает с результатом расчетов в квазиклассическом приближении лишь при  $E = \hbar\omega_0$  (рис. 6). Однако, квазиклассическое выражение должно давать правильную энергетическую зависимость при  $E_i \ll E_B$ . Расхождение связано с тем, что выражение (2.22) для скорости рекомбинации применимо, когда  $E_B$  много меньше энергии рекомбинирующего свободного носителя. В противном случае приближение плоских волн для свободных носителей некорректно [52, 73] и следует учитывать рассеяние свободного носителя на кулоновском потенциале.

### 2.3.3 Учет рассеяния свободных носителей на примесном потенциале

Скорость рекомбинации на основное состояние водородоподобного примесного центра с учетом рассеяния свободных носителей заряда на кулоновском потенциале была получена в работе [35] с использованием для непрерывного спектра волновых функций, угловая зависимость которых

определяется сферическими гармониками  $Y_{l,m}$ . В этом расчете было принято, что в пределах локализации примесного состояния можно считать абсолютное значение волновой функции свободного носителя неизменной и равной его значению в центре координат. Вклад переходов между основным состоянием и состояниями с  $l, m \neq 0$  не учитывался, поскольку соответствующие волновые функции заулаются при  $r = 0$ . В этом приближении:

$$\mathbf{W}_{v.g.s.}^{o.p.} = \frac{\pi D_0^2 N^+}{\rho_c \omega_0} \frac{2\pi \sqrt{E_B/E}}{1 - \exp(-2\pi \sqrt{E_B/E})} \frac{\rho(E) f(E)}{n}. \quad (2.23)$$

Это выражение отличается от скорости рекомбинации, полученной без учета рассеяния (2.22) множителем Зоммерфельда:  $\frac{2\pi \sqrt{E_B/E}}{1 - \exp(-2\pi \sqrt{E_B/E})}$ , где  $E$  – энергия рекомбинирующего носителя. В дальнейшем для  $E \ll E_B$  было получено выражение, учитывающее изменение волновой функции свободного носителя в пределах локализации примесного состояния и переходы в состояния с  $l \neq 0$  [53]:

$$\mathbf{W}_{v.g.s.}^{o.p.} = \frac{\pi D_0^2 N^+}{\rho_c \omega_0} 0.44\pi \sqrt{E_B/E} \frac{\rho(E) f(E)}{n}. \quad (2.24)$$

В настоящей работе получена скорость рекомбинации с излучением оптических фононов на основное и возбужденные водородоподобные состояния с использованием асимптотически плоских волн в качестве огибающих волновых функций непрерывного спектра [73]:

$$\Phi_{\mathbf{k}} = N e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})} L_{\eta}(\xi), \quad (2.25)$$

$$\xi = i(kr - \mathbf{k}\mathbf{r}), \quad \eta = \frac{1}{ika_B}, \quad |N|^2 = \frac{2\pi|\eta|}{L^3(1 - \exp(-2\pi|\eta|))},$$

$L_{\eta}(\xi)$  – полином Лагерра, а множитель  $N$  соответствует нормировке состояний на единицу. Используем интегральное представление полиномов Лагерра:

$$L_{\eta}(\xi) = \frac{1}{2\pi i} e^{\xi} \oint dx x^{\eta} (x-1)^{-\eta-1} e^{-\xi x}, \quad (2.26)$$

интеграл в (2.26) берется по замкнутому контуру вокруг точек ветвления  $x = 1$  и  $x = 0$ . Волновая функция основного состояния:

$$\Phi_0 = N_0 e^{-\alpha r}, \quad N_0 = \sqrt{\alpha^3/\pi}, \quad (2.27)$$

( $\alpha = 1/a$  определяется энергией ионизации в соответствии с (1.8)) Для электронной части матричного элемента получаем, меняя порядок интегрирования:

$$M_{0,\mathbf{k}}^{\mathbf{q}} = |\langle i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \mathbf{k} \rangle| = N N_0 \oint dx x^{-\eta} (x-1)^{\eta-1} \frac{-4iK_0}{(K_0^2 + K^2)^2}, \quad (2.28)$$

$$K_0 = \alpha + ik(1-x), \quad K = \sqrt{q^2 + k^2 x^2 - 2\mathbf{q}\mathbf{k}x}.$$

Добавляем к контуру интегрирования окружность бесконечного радиуса и соединяем ее с контуром шнуром вдоль произвольной линии, на которой нет особых точек. Интеграл по окружности зануляется, так как при  $x \rightarrow \infty$  подынтегральная функция ведет себя как  $x^{-3}$ , а интегралы вдоль линии, соединяющей два контура в обратных направлениях, компенсируют друг друга, поскольку разрез расположен вдоль линии, соединяющие две точки ветвления. Интеграл по новому контуру равен искомому и, с другой стороны, равен вычету подынтегральной функции в полюсе  $K_0^2 + K^2 = 0$ , умноженному на  $2\pi i$ :

$$M_{0,\mathbf{k}}^{\mathbf{q}} = 8\pi N N_0 \frac{C^{-\eta}}{(C-B)^{-\eta+2}} \left\{ \frac{B}{C} \eta(\alpha + ik) - \alpha - \frac{1}{a_B} \right\}, \quad (2.29)$$

$$C = (\alpha + ik)^2 + q^2, \quad B = 2(\mathbf{q}\mathbf{k} + ik(\alpha + ik)).$$

Подставляя электронную часть матричного элемента в (2.18) и переходя от суммирования к интегрированию по  $\mathbf{q}$ , получаем вероятность рекомбинации, которая совпадает с результатом расчета в приближении плоских волн при  $k \gg a_B^{-1}$ . Отличие настоящего выражения от результата, полученного в [35] связано с тем, что приближение неизменного абсолютного значения волновой функции рассеянного носителя в пределах локализации связанного состояния справедливо лишь при  $a \ll a_B$ , что для мелких примесных центров не выполняется, и в случае, когда рассеяние несущественно,  $k \gg a_B^{-1}$ . В последнем случае все рассмотренные подходы дают одинаковый результат. Зависимость вероятности рекомбинации от энергии

примесного уровня, рассчитанная в рассмотренных приближениях в предположении равномерного распределения свободных носителей в интервале энергий до энергии оптического фонона представлена на рис. 6. Следует отметить хорошее согласие результатов настоящего расчета, расчетов, выполненных в работе [53] и расчетов в квазиклассическом приближении.

Матричные элементы для рекомбинации на возбужденные водородо-подобные состояния  $\Phi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  могут быть получены из матричного элемента перехода основное состояние (2.29) с помощью дифференцирования. Чтобы показать это, заметим, что функции  $\Phi_{n,l,m}$  представляют собой суммы слагаемых вида:  $e^{-r/a_n} r^k x^j y^{m-j} z^i$ . С другой стороны,

$$\frac{\partial^n \Phi_0}{\partial \alpha^n} = (-r)^n \Phi_0, \quad \frac{\partial^n \exp(\mathbf{iqr})}{\partial q_x^l \partial q_y^{n-l}} = (ix)^j (iy)^{n-j} \exp(\mathbf{iqr}). \quad (2.30)$$

Поскольку при дифференцировании подынтегрального выражения в 2.28 сходимость интеграла не нарушается, можно получить выражения для матричных элементов  $\Phi_{n,l,m}$ , дифференцируя интеграл по параметрам:

$$M_{(n,l,m),\mathbf{k}}^{\mathbf{q}} = \frac{N_{nlm}}{N_0} \sum_{p=0}^{n-l-1} \sum_{i=i_0}^l \sum_{j=0}^{|m|} C_p \frac{\partial^{l+p} M_{0,\mathbf{k}}^{\mathbf{q}}}{\partial \alpha^{2l-2i+p} \partial q_x^j \partial q_y^{|m|-j} \partial q_z^{2i-l-|m|}} \Big|_{\alpha=1/a_n},$$

$$C_p = C_{p-1} \frac{2(n-l-p)}{pa_n(2l+p+1)}, \quad C_0 = \binom{l}{i} \binom{2i}{l+|m|} \binom{|m|}{j} \frac{i^{-j}}{a_n^l},$$

$$|N_{nlm}| = \frac{1}{(2l)! l!} \sqrt{\frac{(n+l)!(l-|m|)!(l+|m|)!}{n(n-l-1)!(2l+1)\pi a_n^3}}, \quad (2.31)$$

где  $i_0 = \frac{l+|m|}{2}$  для четных  $l+|m|$ , а для нечетных  $i_0 = \frac{l+|m|+1}{2}$ .

### 2.3.4 Влияние рекомбинации с излучением оптических фононов на распределение свободных носителей

Зависимость вероятности рекомбинации при излучении оптических фононов от энергии, выражаемая приближенно дельта-функцией, представляет

собой функцию, быстро спадающую вне интервала энергий вблизи резонанса, соответствующего неопределенности энергии уровня  $\Delta E$ . Время рекомбинации для носителей в этом интервале энергий порядка  $\tau_{rec}(E = E_i + \hbar\omega_0) \simeq \rho(\hbar\omega_0)\Delta E/\nu_0 N^+$ . Время, за которое носитель заряда приобретает эту энергию при движении в электрическом поле,  $\tau_{\Delta E} = \tau^E \Delta E/\hbar\omega_0$ . Соотношение этих времен  $\tau_{\Delta E}/\tau_{rec}(E = E_i + \hbar\omega_0) \simeq \tau^E \nu_0 N^+ / N_v (T_{eff} = \hbar\omega_0) \simeq 10^{-4}$  для параметров р-Ge лазера. Это означает, что лишь малая часть носителей, ускоряющихся в поле, рекомбинирует на примесный уровень, проходя через интервал энергий, соответствующий резонансному излучению оптического фонона. Однако с уменьшением энергии ионизации плотность примесных состояний растет, достигая максимума при энергии связи, соответствующей перекрытию орбит соседних центров  $E_N$  (см. Рис. 2). Время рекомбинации для свободных носителей с соответствующими энергиями:  $\tau_{rec}(E = E_N + \hbar\omega_0) \simeq \rho(\hbar\omega_0)/\nu_0 \rho_{loc}(E_N)$ . Время пролета интервала энергий, соответствующего максимуму скорости рекомбинации:  $\tau_{E_N} = \tau^E E_N/\hbar\omega_0$ ,  $\tau_{E_N}/\tau_{rec}(E = E_N + \hbar\omega_0) \simeq \tau^E \nu_0 \rho_{loc}(E_N) E_N / N_v (T_{eff} = \hbar\omega_0) \simeq 10^{-2}$ . Таким образом предположение о том, что в р-Ge лазере рекомбинация мало влияет на распределение свободных носителей, оправдано в случае баллистического разогрева дырок до энергии оптического фонона.

## 2.4 Каскадная ударная ионизация

В соответствии с (2.9) сечение каскадной ударной ионизации представляет собой сумму сечений прямой ионизации и возбуждения в верхние примесные состояния. Зависимость сечения ионизации основного состояния атома водорода от энергии приближенно выражается формулой [63]:

$$\sigma_0^{Auger}(E) = 2.25 \sigma_0 (E/E_I - 1)(E/E_I)^{-5/4}. \quad (2.32)$$

В работе [60] были рассчитаны полные сечения неупругих соударений, включающие ионизацию и возбуждение во все локализованные состояния электронов с  $n$ -го энергетического уровня атома водорода, усредненные по состояниям, соответствующим уровню. При энергиях  $E \geq E_B$  ( $E_B$  - энергия связи основного состояния атома водорода) полные сечения удовлетворительно описываются формулой, подобной (2.32):

$$\sigma_n^{Auger}(E) = \sigma_n (E/E_n - 1)(E/E_n)^{-5/4}, \quad (2.33)$$

где

$$\sigma_n \simeq 3\pi a_B^2 \left( \frac{E_B}{E_n} \right)^2, \quad (2.34)$$

где  $a_B$  - радиус локализации основного состояния атома водорода. При  $T_{eff} > E_B$  основной вклад в ионизацию вносят носители с энергией порядка эффективной температуры, поскольку зависимость сечения ионизации от энергии более плавная, чем зависимость распределения носителей. Для оценки скорости ударной ионизации водородоподобных примесных состояний в настоящей работе использовались сечения вида (2.33), (2.34) с соответствующими параметрами водородоподобного состояния акцептора в Ge, рассчитанными в [31] в качестве  $a_B$  и  $E_B$ . Зависимость скорости ударной ионизации от энергии состояния для Максвелловского распределения свободных носителей заряда с  $T_{eff} = \hbar\omega_0/2$  приведена на Рис. 7.

Для оценки скорости ионизации глубоких примесных состояний использовались следующие предположения. Поскольку отношение сечения возбуждения к сечению прямой ионизации падает с увеличением энергии связи уровня [60], учитывается только прямая ионизация глубоких примесных уровней. Матричные элементы Оже переходов, дающих основной вклад в сечение ионизации определяются поведением волновой функции основного примесного состояния при больших  $\mathbf{r}$ . Это поведение не зависит от вида потенциала и определяется энергией ионизации и законом дисперсии в зоне [51]. Таким образом, независимо от особенностей потенциала вблизи центральной ячейки, которые приводит к сдвигу энергии ионизации основного состояния, можно пользоваться для оценки скорости ударной ионизации основного состояния волновой функцией основного состояния атома водорода с радиусом, соответствующим энергии ионизации (1.8).

В работе [36] показано, что расчеты с учетом рассеяния ионизованного носителя и в приближении Блоховских волн для состояний ионизованных носителей дают близкие результаты для сечения ионизации носителями с энергией вблизи порога ионизации. В случае, когда температура носителей близка или меньше энергии ионизации основного состояния, что справедливо для глубоких примесных центров, именно такие носители дают основной вклад в ионизацию. В этом приближении матричный элемент для Оже-перехода [58]:

$$M = \frac{4\pi e^2}{L^{9/2}} \frac{F}{(k'_2 - k_2)^2} C_{k_2+k'_2-k_1}, \quad (2.35)$$

где  $k_1$  – импульс ионизованного носителя,  $k_2$  и  $k_2'$  – импульсы ионизирующего носителя до и после столкновения,  $C_k$  – коэффициент в разложении огибающей примесного состояния по Блоховским функциям дна зоны,  $F$  – множитель порядка единицы, представляющий собой произведение интегралов перекрытия по быстроосциллирующим частям блоховских функций соответствующих состояний. Суммируя вероятности ионизации по всем возможным переходам аналогично [58], предполагая, что  $C_k$  слабо зависит от волновых векторов, и используя значение  $C_k$  при  $k \simeq k_2 \simeq \sqrt{2m^*E_I}/\hbar$ , соответствующем порогу ионизации  $E_I$ , для сечения ионизации получаем:

$$\sigma_0^{Auger}(E) = 8\pi a_B^2 \left(\frac{E_B}{E_I}\right)^2 (1 - \sqrt{E_I/E})^2, \quad (2.36)$$

### 2.4.1 Скорость каскадной Оже-рекомбинации

В случае равновесного распределения свободных носителей с температурой  $T_{eff}$  отношение скоростей Оже-рекомбинации и ионизации соответствуют принципу детального баланса и при  $T_{eff} \gg |E_i|$

$$\frac{W_{v,i}^{Auger}}{W_{i,v}^{Auger}} = \frac{N^+}{N_v(T_{eff})}. \quad (2.37)$$

Для верхних возбужденных состояний с энергией связи меньше 0.5 мэВ скорость ударной рекомбинации превышает скорость рекомбинации с излучением оптического фонона. Поскольку скорость ударной ионизации и рекомбинации для равновесного распределения свободных носителей с  $T_{eff}$  связаны принципом детального баланса, населенности состояний, для которых ударные процессы преобладают, соответствуют равновесным с  $T_{eff}$  и не превышают  $10^{-4}$ .

### 2.4.2 Квазиклассическое описание ударной ионизации

В рамках квазиклассического приближения распределение носителей по примесным состояниям в предположении квазиупругого рассеяния описывается уравнением Фоккера-Планка (1.30). Стационарная функция распределения является решением уравнения постоянства диффузионного

потока носителей в пространстве полной энергии:

$$J(E) = -B(E)\left(T\frac{\partial f}{\partial E} + f\right). \quad (2.38)$$

Решение, удовлетворяющее граничному условию  $f = f_i$  при  $E = E_i$ :

$$f = \frac{J \exp(-E/T)}{T} \int_{E_i}^E \frac{\exp(\mathcal{E}/T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E} + f_i \exp\left(\frac{E_i - E}{T}\right). \quad (2.39)$$

Величина ионизационного потока с состояния  $i$  с населенностью  $f_i$  может быть получена с использованием граничного условия  $f = 0$  при  $E = 0$ , означающего, что ионизованные носители не возвращаются на центр:

$$J = \frac{f_i T \exp(-|E_i|/T)}{\int_{E_i}^0 \frac{\exp(\mathcal{E}/T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E}}. \quad (2.40)$$

Скорость каскадной ионизации с  $i$  уровня:

$$\mathbf{W}_{i,v}^{Auger} = \frac{J}{f_i N^+} = \frac{T \exp(-|E_i|/T)}{N^+ \int_{E_i}^0 \frac{\exp(\mathcal{E}/T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E}}, \quad (2.41)$$

где  $N^+$  – концентрация заряженных центров, которая при малом уровне компенсации равно концентрации свободных носителей. Время энергетической релаксации при соударениях в предположении равновесного распределения свободных носителей с температурой  $T_{eff} \gg E$  не зависит от энергии:

$$1/\tau_E^{Auger} = \frac{8\sqrt{2}\pi^{3/2} n e^4 \Lambda}{3\varepsilon^2 m^{*1/2} T^{3/2}}, \quad (2.42)$$

Соответствующий коэффициент энергетического динамического трения (1.33):

$$B(E) = \frac{\pi^2 N^+}{4} \left(\frac{e^2}{\varepsilon|E|}\right)^3 \frac{\rho(|E||E|)}{\tau_E^{Auger}}, \quad (2.43)$$

а скорость ионизации:

$$\mathbf{W}_{i,v}^{Auger} = \frac{5\pi^{3/2}}{3} \frac{\exp(-|E_i|/T) m^* n \Lambda \left(\frac{e^2}{\varepsilon}\right)^5}{|E_i|^{5/2} \sqrt{T} \hbar^3} \quad (2.44)$$

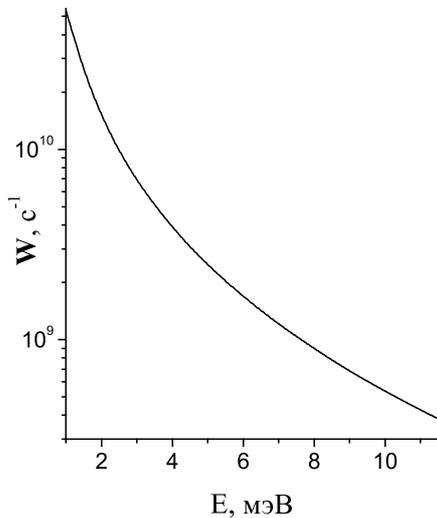
Зависимость квазиклассической скорости ионизации от энергии подобна полученной на основе сечений ионизации атома водорода [60], однако абсолютная величина на порядок больше. По-видимому, это связано с вопросом о применимости квазиклассического подхода к расчету ударных переходов по примесным состояниям. В работе [8] отмечалось, что квазиклассическое описание ударной каскадной рекомбинации справедливо лишь для многозарядных центров. Условия применимости квазиклассического приближения для расчета скорости ионизации нижних примесных состояний более жесткие. Действительно, сечения ударных процессов максимальны при переходах с малым изменением энергии. Изменение энергии при переходах по нижним примесным состояниям не является малым по отношению к энергии ионизации, что и приводит к завышенным значениям скорости ионизации в квазиклассическом приближении.

## 2.5 Оптическая ионизация

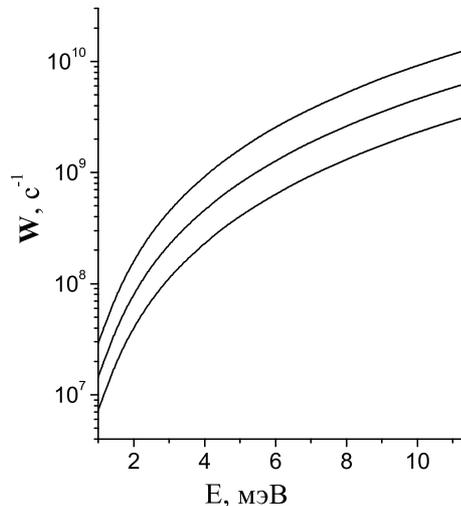
При расчете оптической ионизации примесных состояний лазерным излучением используется зависимость среднего сечения от энергии уровня  $E_i$ , которую можно получить на основе правил сумм для водородоподобных состояний [73]:

$$\sigma(E_i, \omega) = \sigma_0 \left(\frac{E_B}{\hbar\omega}\right)^3 \left(\frac{E_i}{E_B}\right)^{5/2}, \quad (2.45)$$

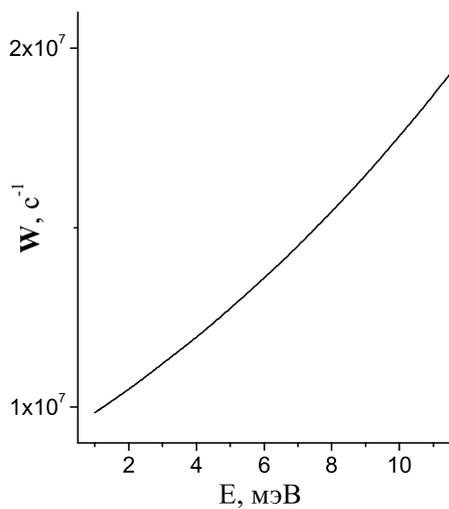
где  $\sigma_0$  сечение ионизации основного состояния. Скорости оптической ионизации примесных состояний для разных интенсивностей лазерного излучения с частотой близкой к порогу ионизации основного состояния представлены на рисунке 8.



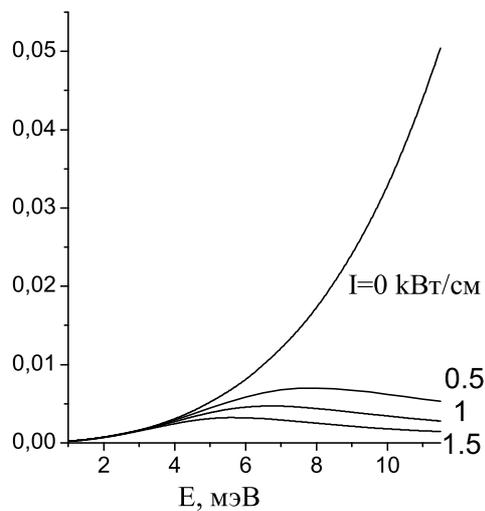
**Рис. 7.** Зависимость скорости каскадной ударной ионизации от энергии уровня.



**Рис. 8.** Зависимость скорости фотоионизации лазерным излучением на l-h переходах от энергии уровня.



**Рис. 9.** Зависимость скорости рекомбинации при спонтанном излучении оптических фононов от энергии уровня.



**Рис.10.** отношение населенности уровня  $N_1$  к числу свободных носителей  $n$  для разной интенсивности лазерного излучения на l-h переходах.

## 2.6 Населенность примесных состояний в Ge:Ga лазере

Зависимость скорости рекомбинации с излучением оптических фононов от энергии связи уровня в расчете на одну свободную дырку при максвелловском распределении с  $T_{eff} = \hbar\omega_0/2$  представлена на рис. 9. Величина скорости рекомбинации слабо зависит от энергии уровня и составляет  $\mathbf{W}_{v,i}^{o.p.} \simeq 1 \div 2 \times 10^7 \text{ c}^{-1}$

Время жизни примесных состояний в отсутствие лазерного излучения определяется ударной ионизацией. Полная скорость ударной ионизации представлена на рис. 7. Она составляет  $\mathbf{W}_{g.s.,v}^{Auger} = 4 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$  для основного состояния  $g.s.$  и увеличивается приблизительно обратно пропорционально квадрату энергии ионизации для возбужденных состояний ( $ex.s.$ ).

Высоковозбужденные уровни, которые быстро обмениваются частицами с тяжелой подзоной в процессе соударений, находятся с ней в состоянии термодинамического равновесия. Более глубокие уровни оказываются перенаселенными в результате рекомбинации с излучением оптических фононов и содержат порядка 6% носителей (рис. 10). Используя значение сечения фотоионизации основного состояния Ga акцептора, энергия ионизации которого близка к частоте генерации p-Ge лазера в так называемой  $V$ -области,  $\sigma \approx 10^{-14} \text{ см}^2$ , получаем, что при  $N = 10^{14} \text{ см}^{-3}$  акцепторы вносят поглощение  $\alpha \leq 5 \times 10^{-2} \text{ см}^{-1}$ .

Лазерное излучение на межподзонных  $l \rightarrow h$  переходах в  $V$ -области может существенно изменить населенности акцепторных уровней Ga. Скорость фотоионизации максимальна для основного состояния Ga примеси, поскольку частоты  $V$ -области ( $90 - 120 \text{ см}^{-1}$ ) близки к порогу фотоионизации, и при интенсивности  $I \geq 1 \text{ кВт/см}^2$  значительно превышает скорость ударной ионизации (рис. 8). При этом основное состояние Ga акцептора оголяется. Для возбужденных состояний определяющим механизмом ионизации остается столкновительный, и их населенности уменьшаются в меньшей степени. В результате формируется инверсия населенностей между возбужденными и основными уровнями акцептора (рис. 10), что может приводить к стимулированному излучению на  $ex.s. \rightarrow g.s.$  оптических переходах в нелинейном режиме Ge:Ga лазера.

## 2.7 Обсуждение экспериментальных результатов

Предложенная модель объясняет отмеченные экспериментальные результаты. Линии  $C$  и  $E$  в спектре излучения Ge:Ga лазера объясняются стимулированным излучением на соответствующих  $ex.s. \rightarrow g.s.$  оптических переходах при фотоионизации основного состояния излучением  $V$ -области. При этом зоны генерации линий  $C$  и  $E$  вписаны в зону генерации  $V$ -область для  $l \rightarrow h$  переходов и соответствующие импульсы излучения всегда появляются с задержкой (рис. 11).

Существенная заселенность и поглощение на примесных переходах в Ge:Ga лазере может вызывать существенное уменьшение усиления в линейном режиме и изрезанность спектра.

Увеличение проводимости образца Ge:Ga (Рис. 11) с развитием лазерного излучения также объясняется фотоионизацией акцепторов  $l \rightarrow h$  излучением. Измерения показывают, что эффект скачка тока [4, 69] более выражен для частот генерации  $\nu > 80 \text{ см}^{-1}$ , чем для  $\nu < 50 \text{ см}^{-1}$ , что соответствует частотной зависимости эффективности фотоионизации Ga акцептора.

При исследовании лазерного эффекта в образцах Ge, легированного Be (рис. 11), наблюдался значительно меньший скачок тока [A24]. Это связано с тем, что частота лазерного излучения не достигает порога ионизации наиболее заселенного основного состояния Be акцептора и в увеличение тока в этом случае дает вклад лишь фотоионизация возбужденных состояний.

Эффект сдвига импульса излучения лазера при его ДИК фотонакачке определяется двумя факторами воздействия излучения на активную среду Ge:Ga лазера: выравниванием населенностей подзон легких и тяжелых дырок, и, как результат, подавлением межподзонной  $l \rightarrow h$  инверсной населенности; уменьшением населенности акцепторных состояний благодаря их фотоионизации. Первое уменьшает коэффициент усиления на  $l \rightarrow h$  переходах. Второе, уменьшая поглощение на оптических переходах с акцепторных состояний, приводит, напротив, к увеличению суммарного коэффициента усиления. Соотношение этих факторов зависит от частот фото-возбуждения: частота  $\nu = 48 \text{ см}^{-1}$  [5] оказывается переходной от эффекта задержки к эффекту стимулирования развития лазерного излучения.

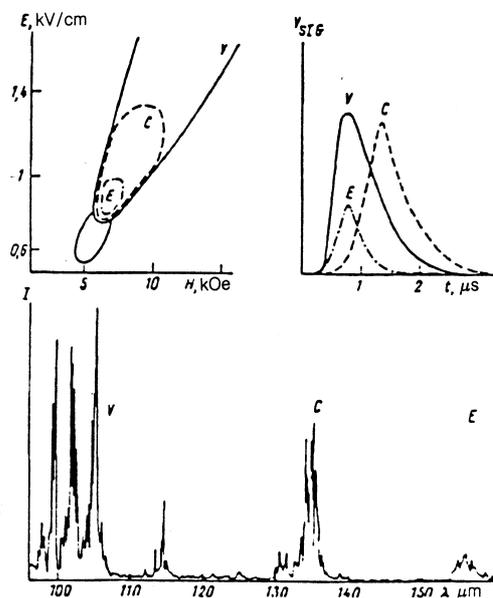


Рис. 11. Зоны генерации и осциллограммы импульсов линий E и C линий и V-области; Спектр Ge:Ga лазера при  $E = 0.8$  кВ/см и  $H = 7$  кЭ.

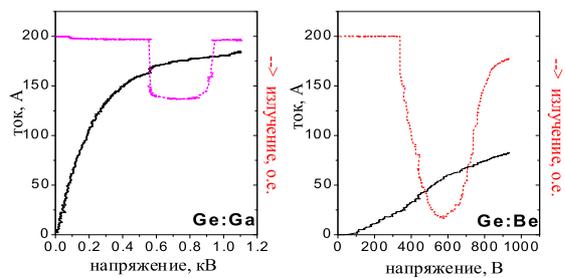


Рис. 12. Вольт-амперные характеристики (нижние кривые) и интенсивность излучения (верхние кривые) Ge:Ga и Ge:Be лазеров.

Таким образом, эффекты, связанные с состояниями мелких акцепторов, оказываются важными для качественного понимания процессов в лазере на горячих дырках германия и показывают новые возможности получения полупроводниковых активных сред ДИК излучения на примесных переходах при оптическом возбуждении.

## 2.8 Влияние типа легирующей примеси на характеристики р-Ge лазера

Вывод о существенной заселенности примесных уровней и роли поглощения на примесных переходах в Ge:Ga лазере позволил существенно улучшить такие характеристики лазера, как малосигнальный коэффициент усиления, порог возбуждения и эффективность с помощью выбора легирующей примеси [74, A24]. Используя более глубокие примеси, порог ионизации которых далек от полосы генерации р-Ge лазера ( $E_I > \hbar\omega_0$ ), можно уменьшить их вклад в поглощение и тем самым увеличить коэффициент усиления лазера. Однако при оценке выигрыша в усилении следует учитывать и то, что с увеличением энергии ионизации примеси увеличивается доля носителей заряда, которые не участвуют в усилении. Увеличение энергии ионизации приводит к снижению скорости ударной ионизации ( $\mathbf{W}_{g.s.,v}^{Auger} \propto E_I^{-2}$ ), в то время, как при ( $E_I < \hbar\omega_0$ ) рекомбинация с излучением оптических фононов меняется не так существенно. При дальнейшем увеличении энергии ионизации ( $E_I > \hbar\omega_0$ ) населенность основного состояния продолжает возрастать, рекомбинация на основное состояние *g.s.* при этом происходит через возбужденные уровни, куда носители попадают, излучив оптический фонон.

Результаты расчета населенностей состояний глубоких акцепторов при разогреве свободных носителей до энергий порядка оптического фонона представлены на Рис. 11. Доля свободных носителей, определяемая по токовым измерениям составляет 80 ÷ 90% в Ge:Ga ( $E_I = 11.32$  мэВ), 40 ÷ 50% в Ge:Be ( $E_I = 24.8$  мэВ) лазере, [A24] 5 ÷ 10% в Ge:Cu ( $E_I = 43.21$  мэВ) лазере [76], что хорошо согласуется с результатами расчетов.

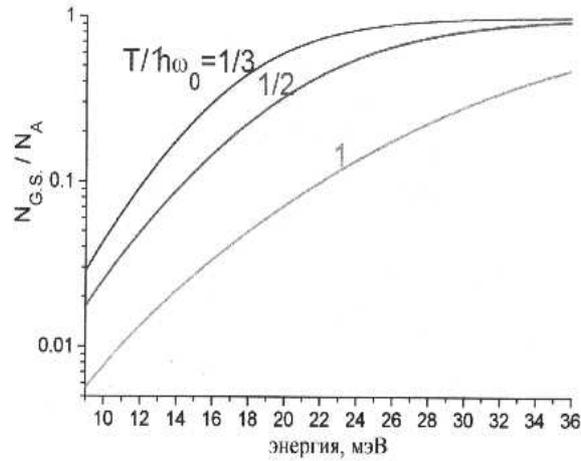


Рис. 13. Зависимость населенности основного состояния акцептора в Ge от энергии ионизации,  $N_A$  - концентрация акцепторов,  $T$  - эффективная температура свободных носителей,  $\hbar\omega_0$  - энергия оптического фонона.

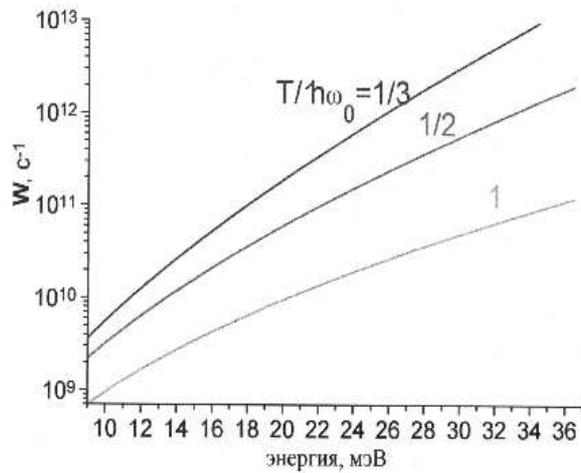


Рис. 14. Зависимость частоты рассеяния легких дырок на нейтральных примесных центрах от энергии ионизации. Концентрация свободных носителей  $n=10^{14}$  см<sup>-3</sup>.

Таким образом увеличение энергии ионизации приводит к увеличению населенности основного примесного состояния и соответственно к уменьшению доли свободных носителей заряда. Для достижения концентрации свободных носителей, оптимальной для генерации, в этом случае необходимо увеличение уровня легирования, компенсирующее уменьшение скорости ионизации. При этом растет концентрация нейтральных центров  $N^0$ .

Сечение рассеяния носителя с квазиимпульсом  $k$  на нейтральных центрах с характерным радиусом  $a_0$  [77]:

$$\sigma_N(k) = \frac{20a_0}{k} N^0, \quad (2.46)$$

Зависимость частоты рассеяния на нейтральных центрах от энергии ионизации основного состояния при легировании, обеспечивающем оптимальную концентрацию свободных носителей, с использованием характерного радиуса локализации  $a_B$  (1.8) состояний глубоких центров в качестве  $a_0$ , представлена на Рис. 11.

При эффективной температуре носителей  $T_{eff} = \hbar\omega_0/2$  энергии ионизации  $E_{g.s.} < 20$  мэВ, концентрация нейтральных центров в р-Ge лазере  $N^0 < 5 \times 10^{13}$ , времена рассеяния на нейтральных центрах больше характерных времен рассеяния легких дырок на акустических фононах  $\tau^{ac} = 0.5 \times 10^{-10}$  с [78], и рассеяние на нейтральных центрах не сказывается на коэффициенте усиления. Дальнейшее увеличение энергии ионизации приводит к уменьшению времен жизни замагниченных легких дырок и уменьшению коэффициента усиления.

Поэтому оптимально использовать легирующие примеси с энергиями ионизации в пределах  $\hbar\omega_V < E_I < 20$  мэВ ( $\omega_V$ - верхняя частотная граница лазерного излучения,  $\hbar\omega_V \simeq 18$  мэВ). Экспериментально наблюдаемая зависимость малосигнального коэффициента усиления в р-Ge лазере от типа легирующей примеси хорошо объясняется представленной моделью. Так уменьшение коэффициента усиления, соответствующее росту вероятности рассеяния на нейтральных примесях в Ge:Be лазере ( $E_I = 24.81$  мэВ) является более слабым эффектом, чем уменьшение примесного поглощения; коэффициент усиления в Ge:Be  $\alpha = 0.021 \div 0.027$  см<sup>-1</sup>, в то время как в Ge:Ga лазере коэффициент усиления  $\alpha = 0.012 \div 0.015$  см<sup>-1</sup> [A24] при оптимальной концентрации акцепторов. Ge:Cu лазер ( $E_I = 43.21$  мэВ) является менее эффективным ( $\alpha \simeq 0.0029$  см<sup>-1</sup> [76]).

Изменение энергии ионизации легирующей примеси также приводит к изменению спектра излучения p-Ge лазера. В Ge:Tl лазере ( $E_I = 13.45$  мэВ) спектр излучения смещается в область более высоких частот [79], по сравнению с спектром излучения Ge:Ga, что соответствует увеличению частот, соответствующих примесному поглощению. При  $E_I > \hbar\omega_V$  примесное поглощение мало. Основное состояние примеси с  $E_I > \hbar\omega_V$  не оголяется лазерным излучением, таким образом механизм инверсии на примесных переходах, который имеет место в нелинейном режиме Ge:Ga лазера не может реализоваться в случае более глубоких акцепторов. Это объясняет более равномерное распределение усиления по спектральной полосе излучения в Ge:Be [75, A24], Ge:Zn [75], Ge:Cu [76].

Результаты этой главы опубликованы в работах [A1-A5, A7, A10, A15, A24]

## Глава 3

# Инверсия населенностей и усиление излучения на примесных переходах в Si:P

Механизм создания инверсии на примесных переходах в Si:P основан на накоплении оптически возбужденных носителей заряда на долгоживущем состоянии  $2p_0$ .

Фотоионизованные носители заряда при низких температурах решетки теряют энергию при взаимодействии с акустическими и оптическими фонами. Каскадный захват на притягивающие донорные центры представляет собой постепенную релаксацию по лестнице примесных возбужденных состояний с характерным шагом  $\delta E = \hbar s a_i^{-1}$  [6], где  $s$  – скорость звука,  $a_i$  радиус локализации состояния  $i$ . Плотность состояний кулоновского центра падает с увеличением энергии ионизации. Энергия перехода между нижними примесными состояниями  $\Delta E > \delta E$ . Скорости переходов при взаимодействии с акустическими фонами между такими состояниями падают не медленнее чем  $(\Delta E / \delta E)^{-5}$  [7] (рис. 11). Поэтому носители заряда релаксируют преимущественно по соседним соседним нижним возбужденным состояниям и накапливаются на долгоживущем состоянии  $2p_0$ . Время жизни отщепленных состояний  $1s(E, T)$  меньше времени

жизни состояния  $2p_0$ . Таким образом при оптической накачке  $Si : P$  может быть получена инверсия населенностей на переходах между состояниями  $2p_0$  и  $1s(E, T)$ .

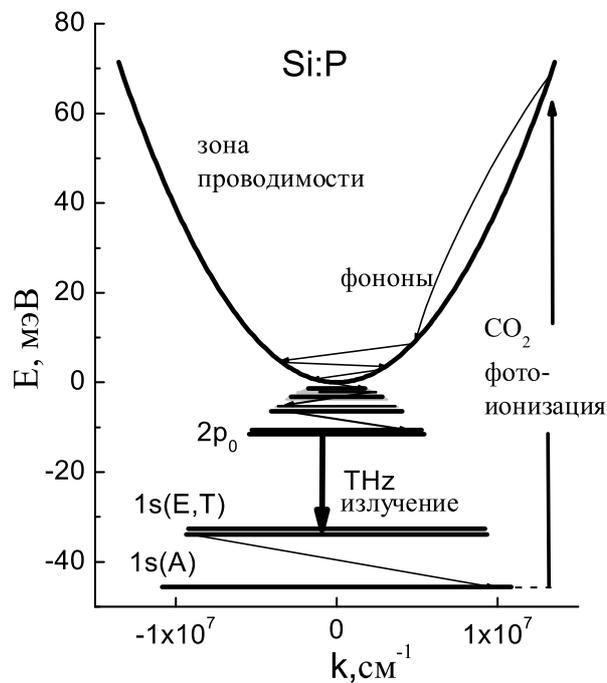
### 3.1 Время жизни долгоживущего состояния в Si:P

Вероятности переходов по примесным состояниям при взаимодействии с деформационными акустическими фононами в рамках модели невырожденной изотропной зоны [7] уменьшаются с ростом  $qa_B \gg 1$  (см. раздел 1.3.2). Таким образом, нижние возбужденные состояния мелких доноров в кремнии  $2p_0$  и отщепленных  $1s$ , для которых выполняется  $qa_B \gg 1$  могут быть долгоживущими. Однако, времена жизни таких состояний сильно зависят от деталей волновой функции [9]. Расчет времен жизни донорных состояний в кремнии с учетом особенностей структуры зоны проводимости кремния ранее не проводился.

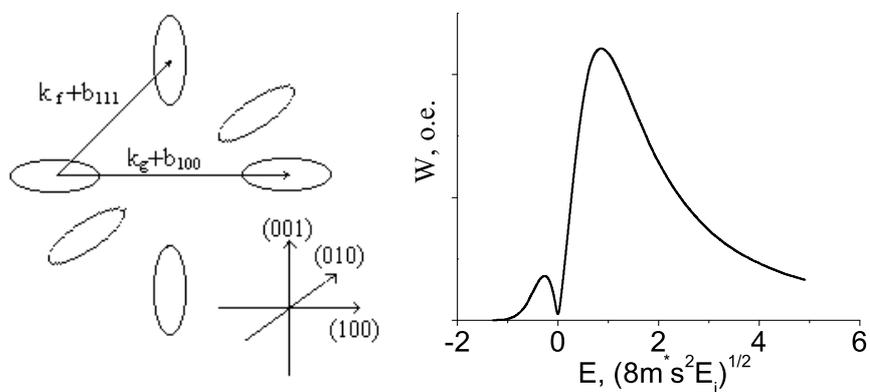
Следует отметить, что данные экспериментальных исследований в этой области расходятся на несколько порядков. Время жизни состояния  $2p_0$ , измеренное методом насыщающей абсорбционной спектроскопии [16] с помощью лазера на свободных электронах составляет  $5 \times 10^{-7}$  с. Измерения методом динамической туннельной спектроскопии [80] не показывают времен жизни возбужденных примесных состояний в Si:P длиннее, чем  $10^{-9}$  с. В то же время исследования релаксации высокочастотной проводимости [14] обнаруживают времена  $10^{-5}$  с в Si:P, которые авторы связывали с долгоживущими примесными отщепленными  $1s$  состояниями [81].

В настоящей работе проведен расчет времени жизни долгоживущего  $2p_0$  состояния доноров в кремнии с учетом многодолинности и анизотропии долин зоны проводимости кремния, а также сделаны оценки времен жизни отщепленных  $1s$  состояний.

Для расчета переходов при взаимодействии с акустическими фононами по нижним возбужденным донорным состояниям необходимо учитывать многодолинный характер зоны проводимости, поскольку междолинное взаимодействие [44] существенно влияет на волновые функции этих состояний и приводит к расщеплению  $1s$  состояния. Волновые функции



**Рис. 15** Схема переходов в Si:P при фотоионизации излучением CO<sub>2</sub>-лазера.



**Рис. 16** Схема междолинных переходов при взаимодействии с  $g$  и  $f$ -фононами ( $b_{100}$  и  $b_{111}$  - вектора обратной решетки в соответствующих направлениях) и зависимость скорости внутримолекулярного перехода между локализованными состояниями кулоновского центра от энергии акустического фонона.

этих состояний представляют собой комбинации из составляющих, локализованных вблизи различных долин зоны проводимости. Поэтому для расчета вероятностей переходов при взаимодействии с фононами, вообще говоря, нельзя пользоваться выражением для потенциала взаимодействия через внутридолинные константы деформационного потенциала, как это сделано в [82], а следует воспользоваться более общим выражением гамильтониана электрон-фононного взаимодействия [66]:

$$H_{eph} = \sum_{b,\mathbf{q}} \left( \mathbf{a}_{b,\mathbf{q}} V_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{w}_{b,\mathbf{q}}t} + \mathbf{a}_{b,\mathbf{q}}^+ V_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r})^* e^{i\mathbf{w}_{b,\mathbf{q}}t} \right), \quad (3.1)$$

$\mathbf{a}_{b,\mathbf{q}}^+$ ,  $\mathbf{a}_{b,\mathbf{q}}$  – операторы рождения и уничтожения фононов ветви колебаний  $b$  с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и частотой  $w_{b,\mathbf{q}}$ . Матричные элементы этих операторов отличны от нуля только для фононных состояний, в которых число фононов соответствующей моды отличается на 1, а в других модах неизменно:

$$\langle n_{b,\mathbf{q}} + 1 | \mathbf{a}_{b,\mathbf{q}}^+ | n_{b,\mathbf{q}} \rangle = \sqrt{(n_{b,\mathbf{q}} + 1)}, \quad \langle n_{b,\mathbf{q}} - 1 | \mathbf{a}_{b,\mathbf{q}}^+ | n_{b,\mathbf{q}} \rangle = \sqrt{n_{b,\mathbf{q}}}, \quad (3.2)$$

Возмущение, созданное одним фононом в объеме  $L^3$ :

$$V_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho_c w_{b,\mathbf{q}} L^3}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} v_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r}), \quad (3.3)$$

Где  $\rho_c$  – плотность кристалла,  $v_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  – потенциал в точке  $\mathbf{r}$  создаваемый фононной волной  $b, \mathbf{q}$ , отнесенный к амплитуде смещений. Для деформационных фононов  $v_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  представляет собой быстроосциллирующую функцию с периодом решетки. Вероятность перехода при излучении фонона  $b, \mathbf{q}$  при переходе между состояниями 1 и 2 в единицу времени в рамках теории возмущений:

$$W_{1 \rightarrow 2}^{b,\mathbf{q}} = \frac{\pi(n_{b,\mathbf{q}} + 1)}{\rho_c w_{b,\mathbf{q}} L^3} |M_{1,2}^{b,\mathbf{q}}|^2 \delta(E_1 - E_2 - \hbar w_{b,\mathbf{q}}), \quad (3.4)$$

Здесь  $M_{1,2}^{b,\mathbf{q}}$  – электронная часть матричного элемента:

$$M_{1,2}^{b,\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} \phi_2^*(\mathbf{r}) v_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \phi_1(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

где  $\phi_f(\mathbf{r})$  – волновые функции электронных состояний. Суммируя (3.4) по волновым векторам фононов, получаем полную вероятность перехода при спонтанном излучении фонона моды  $b$  в единицу времени:

$$W_{1 \rightarrow 2}^b = \frac{1}{8\pi^2 \rho_c |E_1 - E_2|} \int dS_q \frac{|M_{1,2}^{b,\mathbf{q}}|^2}{S_{b,\mathbf{q}}}, \quad (3.6)$$

Интегрирование ведется по поверхности постоянной частоты  $\hbar\omega_{b,\mathbf{q}} = |E_1 - E_2|$  в пространстве волновых векторов фонона,  $S_{b,\mathbf{q}}$  – групповая скорость фонона. Хотя в кубическом кристалле фононы могут быть строго разделены на продольные и поперечные только при распространении вдоль главных осей, для взаимодействия с акустическими фононами обычно используется приближение изотропного упругого континуума [66], которое предполагает изотропный закон дисперсии и разделение на продольные и поперечные фононы независимо от направления. В этом приближении:

$$W_{1 \rightarrow 2}^b = \frac{q^2}{8\pi^2 \rho_c |E_1 - E_2| S_{b,q}} \int d\Omega_q |M_{1,2}^{b,\mathbf{q}}|^2, \quad (3.7)$$

Волновые функции состояний мелкого примесного центра в зоне с эквивалентными экстремумами представляют собой комбинацию функций, локализованных в пространстве квазиимпульсов вблизи каждой из долин [42]:

$$\phi_f(\mathbf{r}) = \sum_{j=1} C_{f,j} u_j(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{r}} \Phi_{f,j}(\mathbf{r}), \quad (3.8)$$

Здесь  $\mathbf{k}_j$ ,  $u_j(\mathbf{r})$ ,  $\Phi_{f,j}(\mathbf{r})$  – соответственно волновой вектор, быстроосциллирующая часть Блоховской функции дна  $j$  долины и огибающая функция для состояния  $f$ .

Средняя вероятность перехода с вырожденного уровня не зависит от выбора ортонормированных комбинаций собственных функций состояний с данной энергией (см. Приложение 2). Поскольку короткодействующий примесный потенциал слабо влияет на возбужденные примесные состояния, кроме состояний  $1s$  и не снимает вырождения, получаемого в рамках однодолинного метода эффективных масс [42], переходы по ним можно рассчитывать, принимая  $C_{f,i} = \delta_{i,k}$ , что соответствует однодолинному приближению.

Наибольший интерес, однако, представляют переходы с участием нижних примесных состояний, для которых междолинное взаимодействие существенно. Именно для таких состояний можно ожидать длинных времен

жизни, поскольку волновой вектор фонона, соответствующего частоте таких переходов превышает характерный размер волновых функций этих состояний в пространстве волновых векторов.

В качестве волновых функций состояний  $1s$ , расщепленных междолинным взаимодействием, будем использовать комбинации (3.8) с огибающими метода эффективных масс, которые преобразуются по неприводимым представлениям группы симметрии  $T_d$  с коэффициентами, полученными методами теории групп [42]:

$$\begin{aligned}
A_1 \quad C_{1,i} &= 1/\sqrt{6}(1, 1, 1, 1, 1, 1) \\
E \quad C_{2,i} &= 1/2(1, 1, -1, -1, 0, 0) \\
&\quad C_{3,i} = 1/2(1, 1, 0, 0, -1, -1) \\
T_1 \quad C_{4,i} &= 1/\sqrt{2}(1, -1, 0, 0, 0, 0) \\
&\quad C_{5,i} = 1/\sqrt{2}(0, 0, 1, -1, 0, 0) \\
&\quad C_{6,i} = 1/\sqrt{2}(0, 0, 0, 0, 1, -1)
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Для электронной части матричного элемента перехода получаем:

$$M_{1,2}^{b,\mathbf{q}} = \sum_{i,j} C_{2,i}^* C_{1,j} \int d\mathbf{r} \Phi_{2,i}^*(\mathbf{r})^* u_i^*(\mathbf{r}) v_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{k}_j-\mathbf{k}_i)\mathbf{r}} \Phi_{1,j}(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}). \tag{3.10}$$

Переходим к сумме интегралов по элементарным ячейкам, предполагая, что огибающие мало меняются на масштабе ячейки:

$$M_{1,2}^{b,\mathbf{q}} = \sum_{i,j} C_{2,i}^* C_{1,j} D_{i,j}^{b,\mathbf{q}} a_0^3 \sum_k \Phi_{2,i}^*(\mathbf{R}_k) \Phi_{1,j}(\mathbf{R}_k) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{k}_j-\mathbf{k}_i)\mathbf{R}_k}, \tag{3.11}$$

где  $a_0^3$  – объем элементарной ячейки,  $\mathbf{R}_k$  – радиус-вектор ячейки  $k$ .

$$D_{i,j}^{b,\mathbf{q}} = \frac{1}{a_0^3} \int_{cell} d\mathbf{r} u_i^*(\mathbf{r}) v_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{k}_j-\mathbf{k}_i)\mathbf{r}} u_j(\mathbf{r}). \tag{3.12}$$

Волновые вектора фононов  $\mathbf{q}$ , существенные для матричного элемента перехода (3.11), определяются локализацией огибающих  $dK$  в пространстве волновых векторов. Поскольку огибающие метода эффективных масс плавно меняются на масштабе ячейки,  $dK \ll \pi/a_0$ , сумма по ячейкам в (3.11) мала, если не выполняется условие  $|\mathbf{q} + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i + \mathbf{G}| \leq dK \ll \pi/a_0$ , где  $\mathbf{G}$  – вектор обратной решетки. Если перекрытие составляющих волновых функций, соответствующих разным долинам, мало,  $dK \ll |k_j - k_i + G|$ ,  $D_{i,j}^{b,\mathbf{q}}$ , как показано в разделах 3.1.1 и 3.1.2, выражается через известные внутримолинные и междолинные константы деформационного потенциала, а междолинные и внутримолинные вклады в вероятность перехода не интерферируют.

### 3.1.1 Внутривалинные переходы

В случае когда  $q \ll |\mathbf{q} + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i + \mathbf{G}|$  при ( $i \neq j$ ) процессы переброса несущественны, и слагаемые в (3.11) с  $i \neq j$  малы по сравнению со слагаемыми с  $i = j$ , которые соответствуют внутривалинным переходам:

$$M_{1,2}^{b,\mathbf{q}} = \sum_i C_{2,i}^* C_{1,i} D_i^{b,\mathbf{q}} \mathcal{F}_{1,2,i}(\mathbf{q}), \quad (3.13)$$

где  $D_i^{b,\mathbf{q}}$  обозначает  $D_{i,i}^{b,\mathbf{q}}$  из (3.12),

$$\mathcal{F}_{1,2,i}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} \Phi_{2,i}^*(\mathbf{r}) \Phi_{1,i}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (3.14)$$

Будем называть  $\mathcal{F}_{1,2,i}(\mathbf{q})$  форм-фактором для  $i$ -той долины (в атомной физике форм-фактором называется матричный элемент оператора  $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$  по электронным состояниям в атоме). Поскольку  $q \ll \pi/a_0$ , можно считать экспоненциальный множитель в выражении для  $D_{i,i}^{b,\mathbf{q}}$  приблизительно равным единице, и  $D_i^{b,\mathbf{q}}$  выражается через известные деформационные константы  $i$  долины, которые используются обычно при расчете рассеяния электронов зоны проводимости на длинноволновых фононах:

$$D_i^{b,\mathbf{q}} = \frac{1}{a_0^3} \int_{cell} d\mathbf{r} u_i^*(\mathbf{r}) v_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}). \quad (3.15)$$

Для эллипсоидальных долин [66]:

$$D_i^{b,\mathbf{q}} = i \left( \Xi_d(\mathbf{q}\mathbf{e}^b) + \Xi_u(\mathbf{q}\mathbf{z}_i)(\mathbf{e}^b \mathbf{z}_i) \right), \quad (3.16)$$

где  $\mathbf{e}^b$  – вектор поляризации фонона,  $\mathbf{z}_i$  – единичный вектор в направлении оси симметрии долины. В приближении изотропного упругого континуума для продольных фононов:

$$D_i^{l,\mathbf{q}} = i q \left( \Xi_d + \Xi_u \frac{q_i^2}{q^2} \right), \quad (3.17)$$

где  $q_i$  – составляющая волнового вектора фонона вдоль оси долины. Деформационный потенциал поперечных фононов, поляризованных перпендикулярно плоскости векторов  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{z}_i$  равен нулю, а для поперечных фононов, поляризованных в плоскости  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{z}_i$ :

$$D_i^{t,\mathbf{q}} = i \Xi_u |q_i| \sqrt{1 - \frac{q_i^2}{q^2}}, \quad (3.18)$$

Константы деформационного потенциала зоны проводимости кремния, используемые в расчетах:  $\Xi_u = 7.8$  эВ,  $\Xi_d = 6$  эВ [84].

### Коротковолновая асимптотика Форм-фактора

Огибающие метода эффективных масс для доноров в кремнии не могут быть найдены точно и обычно рассчитываются вариационным методом [42]. Вариационная процедура не позволяет получить правильное поведение волновых функций при больших волновых векторах  $\mathbf{k}$ , поскольку оно мало влияет на среднюю энергию состояния. С другой стороны, поскольку волновой вектор фононов, соответствующих переходам по нижним донорным состояниям в кремнии ( $2p_0$  и  $1s$ ) превышает характерный радиус локализации этих состояний в пространстве волновых векторов,  $qa \gg 1$ , именно область больших  $\mathbf{k}$  существенна для расчета их времени жизни. В настоящей работе для расчета коротковолновой асимптотики форм-факторов переходов по нижним донорным состояниям в кремнии используется аналитический метод получения правильного асимптотического поведения огибающих волновых функций при больших  $\mathbf{k}$ , который был развит Мешковым [37] и применен для расчета времени жизни состояния  $2p_0$  доноров германия в однодолинном приближении.

В рамках этого метода для огибающих, соответствующих  $i$  долине, в представлении волнового вектора при больших  $k$  для  $s$  и  $p$  состояний получено соответственно:

$$\Psi_{i,s}(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{2\pi^2 \varepsilon k^2} T_i^{-1}(\mathbf{k}) Q^s, \quad \Psi_{i,p}(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{\pi^2 \varepsilon k^4} T_i^{-1}(\mathbf{k}) (\mathbf{p} Q^p). \quad (3.19)$$

где  $T_i(\mathbf{k})$  – зависимость энергии от волнового вектора вблизи экстремума  $i$  долины:

$$T_i(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2 (1 - \beta k_i^2 / k^2)}{2m_t}, \quad \beta = 1 - m_t / m_l, \quad (3.20)$$

$k_i$  – составляющая волнового вектора вдоль оси долины,  $m_t$  и  $m_l$  – поперечная и продольная массы (для  $X$ -долин зоны проводимости кремния  $m_t = 0.19m_0$  и  $m_l = 0.98m_0$ ,  $m_0$  – масса свободного электрона).  $Q^s = \int d\mathbf{k} \Psi_s(\mathbf{k})$  и  $Q^p = \int d\mathbf{k} \Psi_p(\mathbf{k}) \mathbf{k}$  – первые исчезающие моменты волновых функций в импульсном представлении, которые можно выразить через значения

волновых функций в координатном представлении, рассчитанных вариационным методом вблизи  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ :

$$Q^s = (2\pi)^{3/2} \Phi(r=0), \quad \mathbf{Q}^p = -(2\pi)^{3/2} i \nabla \Phi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}}. \quad (3.21)$$

Форм-фактор  $i$ -той долины для переходов по нижним примесным состояниям в представлении волнового вектора:

$$\mathcal{F}_{1,2,i}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{k} \Psi_{2,i}^*(\mathbf{k}) \Psi_{1,i}(\mathbf{k} + \mathbf{q}). \quad (3.22)$$

Поскольку  $q$  много больше локализации волновых функций в пространстве волнового вектора, подынтегральное выражение в (3.22) имеет два максимума, которые определяют значение интеграла. Раскладывая в ряд более плавные функции вблизи каждого из максимумов, для переходов между  $s$ -состояниями можно получить:

$$\mathcal{F}_{1,2,i}(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\pi^2 \varepsilon q^2} T_i^{-1}(\mathbf{q}) Q_1^s Q_2^s. \quad (3.23)$$

Выражение для переходов между состояниями  $s$  и  $p$  получено в [37]. Вариационные функции состояний  $1s$  и  $2p_0$ , используемые в данной работе [42]:

$$\begin{aligned} \Phi_{1s,i}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_{1\perp}^2}} \exp\left(-\sqrt{\frac{r^2 - x_i^2}{a_{1\perp}^2} + \frac{x_i^2}{a_{1\parallel}^2}}\right), \\ \Phi_{2p_0,i}(\mathbf{r}) &= \frac{x_i}{\sqrt{\pi a_{2\perp}^2 a_{2\parallel}^3}} \exp\left(-\sqrt{\frac{r^2 - x_i^2}{a_{2\perp}^2} + \frac{x_i^2}{a_{2\parallel}^2}}\right). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Вариационные параметры:  $a_{1\perp} = 0.74a_0$ ,  $a_{1\parallel} = 0.415a_0$ ,  $a_{2\perp} = 1.11a_0$ ,  $a_{2\parallel} = 0.66a_0$ ,  $a_0 = \hbar^2 \varepsilon / m_t e^2$ .

### Внутридолинные переходы с состояния $2p_0$

Для расчета времени жизни состояния  $2p_0$  будем использовать волновые функции однодолинного метода эффективных масс для состояния  $2p_0$ , считая, что электрон может находиться в любом из вырожденных состояний  $2p_0(k)$  с  $C_i = \delta_{i,k}$  с равной вероятностью. Матричный элемент перехода (3.13) с состояния  $2p_0(k)$  с излучением фонона  $b, \mathbf{q}$ :

$$M_{2p_0(k),1s}^{b,\mathbf{q}} = C_{1s,k} D_k^{b,\mathbf{q}} \mathcal{F}_{2p_0,1s,k}(\mathbf{q}). \quad (3.25)$$

Полная вероятность перехода в единицу времени в соответствии с (3.6):

$$W_{1s,2p_0(k)}^b = |C_{1s,k}|^2 W_{1s,2p_0,k}^b, \quad (3.26)$$

$$W_{1s,2p_0,k}^b = \frac{q^2}{8\pi^2 \rho_c |E_{2p_0} - E_{1s}| S_{b,q}} \int d\Omega_q |D_k^{b,q} \mathcal{F}_{1s,2p_0,k}(\mathbf{q})|^2,$$

Средняя вероятность внутридолинного перехода с уровня  $2p_0$  в одно из состояний  $1s$  при спонтанном излучении фонона:

$$\overline{W}_{2p_0,1s}^{intra} = \frac{1}{6} \sum_{k=1}^6 \sum_b |C_{1s,k}|^2 W_{1s,2p_0,k}^b. \quad (3.27)$$

Учитывая, что  $W_{1s,2p_0,k}^b$  одинакова для каждой из долин  $i$  в силу симметрии, а из условий нормировки  $\sum_{k=1}^6 |C_{1s,k}|^2 = 1$ , для любого  $1s$  состояния:

$$\overline{W}_{2p_0,1s}^{intra} = \frac{1}{6} \sum_b W_{1s,2p_0,k}^b. \quad (3.28)$$

Полная скорость внутридолинной релаксации с уровня  $2p_0$  на основное состояние (см. раздел 1.4.1) при низких температурах, когда вероятность термического возбуждения с отщепленных состояний мала, определяется суммой вероятностей перехода в  $1s$  состояния:

$$\widetilde{W}_{2p_0,g.s.}^{intra} = \overline{W}_{2p_0,1s(A)}^{intra} + 2\overline{W}_{2p_0,1s(E)}^{intra} + 3\overline{W}_{2p_0,1s(T)}^{intra}. \quad (3.29)$$

Используя выражение для форм-фактора, выведенное в [37], для скорости внутридолинной релаксации с состояния  $2p_0$  в Si:P получено значение:

$$\widetilde{W}_{2p_0,g.s.}^{intra} = 6.5 \times 10^7 \text{ 1/c}. \quad (3.30)$$

Это значение времени жизни использовалось в расчете усиления в Si:P при оптической накачке  $CO_2$  лазером, приведенных в разделе 3.2.4. Теоретический порог генерации, полученный с использованием этого значения, значительно ниже наблюдаемого. В разделе 3.1.2 показано, что, хотя энергия переходов  $2p_0 \rightarrow 1s$  отличается от энергии междолинных фононов, междолинные переходы могут давать существенный вклад в скорость релаксации с уровня  $2p_0$ .

### Внутридолинные переходы с состояний $1s$

Время жизни состояния  $1s(E)$  определяется переходами в основное состояние  $1s(A)$ . Электронная часть матричного элемента (3.13) внутридолинного перехода между состояниями  $1s(E)$  и  $1s(A)$  (3.9):

$$M_{1s(E),1s(A)}^{b,\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{6}} (D_z^{b,\mathbf{q}} \mathcal{F}_{1s(E),1s(A),z}(\mathbf{q}) - D_x^{b,\mathbf{q}} \mathcal{F}_{1s(E),1s(A),x}(\mathbf{q})), \quad (3.31)$$

где индексы  $z$  и  $x$  обозначают долины, ориентированные вдоль соответствующих осей. Используя (3.17), (3.18) и (3.23), для продольных и поперечных фононов получаем соответственно:

$$M_{1s(E),1s(A)}^{l,\mathbf{q}} = \frac{ie^2 Q_1^s Q_2^s m_t}{\sqrt{6} \pi^2 \hbar^5 \varepsilon q^3} \left\{ \frac{\Xi_d + \Xi_u q_z^2/q^2}{1 - \beta q_z^2/q^2} - \frac{\Xi_d + \Xi_u q_x^2/q^2}{1 - \beta q_x^2/q^2} \right\}, \quad (3.32)$$

$$M_{1s(E),1s(A)}^{t,\mathbf{q}} = \frac{ie^2 Q_1^s Q_2^s m_t \Xi_u}{\sqrt{6} \pi^2 \hbar^5 \varepsilon q^3} \left\{ \frac{|q_z| \sqrt{1 - q_z^2/q^2}}{1 - \beta q_z^2/q^2} - \frac{|q_x| \sqrt{1 - q_x^2/q^2}}{1 - \beta q_x^2/q^2} \right\}.$$

Суммируя по направлениям волнового вектора в соответствии с (3.7), и по поляризациям, для полной вероятности перехода  $1s(E) \rightarrow 1s(A)$  в Si:P получаем, используя данные спектра фононов из [85]:

$$\mathbf{W}_{1s(E),1s(A)}^{intra} = 2 \times 10^{10} \text{ 1/с}. \quad (3.33)$$

Матричный элемент внутридолинного перехода между донорными состояниями  $1s(E)$  и  $1s(A)$  в кремнии рассчитывался при исследовании фононного уширения примесных линий [86] с использованием водородоподобных волновых функций, что соответствует случаю  $\beta = 0$ , и приводит к занижению вклада продольных фононов. Значения полной скорости релаксации, соответствующие уширению, полученному в [86] близки к (3.33). Вклад междолинных фононов в [86] не учитывался.

Для переходов между  $1s(T)$  и  $1s(A)$  состояниями донора в кремнии получаем, подставляя (3.9) в (3.13):

$$M_{1s(T),1s(A)}^{b,\mathbf{q}} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (D_z^{b,\mathbf{q}} \mathcal{F}_{1s(T),1s(A),z}(\mathbf{q}) - D_{-z}^{b,\mathbf{q}} \mathcal{F}_{1s(T),1s(A),-z}(\mathbf{q})) = 0. \quad (3.34)$$

Форм-факторы  $\mathcal{F}_{1s(T),1s(A),i}(\mathbf{q})$ , а также  $D_i^{b,\mathbf{q}}$  (3.16) одинаковы для противоположных долин в силу симметрии. Поскольку состояние  $1s(T)$  содержит

функции, связанные только с двумя противоположными долинами, взятые с разными знаками, а в состоянии  $1s(A)$  все огибающие входят с одним знаком, матричный элемент перехода между этими состояниями в приближении однодолинных переходов зануляется для фононов с любым волновым вектором и поляризацией. Тот же результат получается и для переходов  $1s(T) \rightarrow 1s(E)$ . Равенство нулю аналогичных матричных элементов отмечалось в работе [83]. Однако, правила отбора, определяемые симметрией задачи, допускают такие переходы. Действительно (см, например, [92]), переход запрещен, если представление, по которому преобразуется оператор возмущения, не содержит представления, по которому преобразуется произведение волновых функций состояний  $\phi_1^*(\mathbf{r})\phi_1(\mathbf{r})$ . Однако, в случае фонона с произвольным волновым вектором  $\mathbf{q}$  количество лучей в звезде вектора  $\mathbf{q}$  совпадает с порядком группы направлений кристалла, и  $V_{b,\mathbf{q}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$  преобразуется по регулярному представлению для любой подгруппы группы направлений, а, значит, и группы  $T_d$  симметрии кристалла с примесью замещения. Поскольку регулярное представление включает в себя все неприводимые представления, переход между любыми примесными состояниями разрешен. И действительно, если учесть междолинное перекрытие волновых функций (слагаемые с  $i \neq j$  в (3.11)), матричные элементы переходов  $1s(T) \rightarrow 1s(A)$  и  $1s(T) \rightarrow 1s(E)$  будут отличны от 0 для произвольных волновых векторов фононов, преобразующихся по регулярному представлению группы направлений. Однако, наибольший вклад в вероятность переходов  $1s(T) \rightarrow 1s(A)$  вносят фононы, волновые вектора которых близки к междолинным. Эти переходы рассматриваются в следующем разделе.

### 3.1.2 Междолинные переходы

В случае, когда волновой вектор фонона близок волновому вектору междолинного фонона  $|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j - \mathbf{G} - \mathbf{q}| \leq dK$ , при малости перекрытия составляющих волновых функций, соответствующих разным долинам и  $q \gg dK$  наибольший вклад в (3.11) дают слагаемые с  $i$  и  $j$ , для которых

$|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j - \mathbf{G} - \mathbf{q}| \leq dK$ :

$$M_{1,2}^{b,\mathbf{q}} = \sum_{i,j, \substack{|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j - \mathbf{G} - \mathbf{q}| \ll dK}} C_{2,i}^* C_{1,j} D_{i,j}^{b,\mathbf{q}} \mathcal{F}_{1(j),2(i)}(\mathbf{q} - \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j + \mathbf{G}), \quad (3.35)$$

где  $\mathcal{F}_{1(j),2(i)}(\mathbf{q})$  – междолинный форм-фактор:

$$\mathcal{F}_{1(j),2(i)}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} \Phi_{2,i}^*(\mathbf{r}) \Phi_{1,j}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (3.36)$$

Поскольку  $|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j - \mathbf{G} - \mathbf{q}| \leq dK \ll G$ ,  $D_{i,j}^{b,\mathbf{q}}$  соответствует известному деформационному потенциалу междолинного рассеяния:

$$D_{i,j}^b = \frac{1}{a_0^3} \int_{cell} d\mathbf{r} u_i^*(\mathbf{r}) v_{b,\mathbf{q}=\mathbf{k}_j-\mathbf{k}_i-\mathbf{G}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} u_j(\mathbf{r}). \quad (3.37)$$

Вообще говоря при любом  $q$  матричный элемент (3.11) является суперпозицией матричных элементов, соответствующих внутримолиновым и междолинным переходам. Однако, поскольку при  $dK \ll \pi/a_0$  внутримолиновые и междолинные переходы преобладают в разных областях пространства волновых векторов, и именно эти области дают основной вклад в вероятность перехода, интерференцией этих процессов можно пренебречь.

Между долинами зоны проводимости кремния, расположенными в точках типа  $\Delta$ :  $\mathbf{k}_x = 0.86 \mathbf{G}_{1,0,0}/2$  ( $\mathbf{G}_{1,0,0} = (1, 0, 0) 2\pi/a_0$ ) возможны  $g$ -переходы (рис. 11) между противоположными долинами с  $\mathbf{q}_{g,x} = 2\mathbf{k}_x - \mathbf{G}_{1,0,0}$ , и  $f$ -переходы между перпендикулярными долинами с  $\mathbf{q}_f = 0.86 \mathbf{G}_{1,0,0}/2 - 0.86 \mathbf{G}_{0,1,0}/2 - \mathbf{G}_{1,1,1}$  ( $\mathbf{G}_{1,1,1} = (1, 1, 1) \pi/a_0$ ). Поскольку волновой вектор  $f$ -фононов лежит на границе зоны Бриллюэна  $\mathbf{q}_f = -0.14 \mathbf{G}_{1,0,0}/2 + 0.14 \mathbf{G}_{0,1,0}/2 - \mathbf{G}_{0,0,1}/2$ , нельзя пользоваться изотропным приближением для поверхности постоянной энергии фонона, и суммирование по волновым векторам фононов производится в соответствии с (3.6). Волновой вектор  $g$ -фононов составляет всего  $q_g = 0.29 \pi/a_0$  и в этом случае применяется изотропное приближение (3.7).

### Междолинные переходы с состояния $2p_0$

Частоты переходов  $2p_0 \rightarrow 1s(E, T)$  близки к частоте междолинных LA( $g$ ) и TA( $f$ ) фононов. Основной вклад в вероятность перехода вносят  $g$ -фононы.

Учитывая, что междолинный форм-фактор для противоположных долин равен внутримолиновому форм-фактору, и условие нормировки состояний, вероятность перехода на уровни  $1s(E, T)$  усредненная по состояниям  $2p_0$ :

$$\overline{W}_{2p_0 \rightarrow 1s(E, T)}^b = \frac{q^2 D_{i, -i}^{LA(g)}}{8\pi^2 \rho_c |E_{2p_0} - E_{1s(E, T)}| S_{b, q}} \frac{g_{1s(E, T)}}{6} \int d\Omega_q |\mathcal{F}_{2p_0, 1s(E, T), i}(\mathbf{q} - \mathbf{q}_{g, i})|^2, \quad (3.38)$$

$g_{1s(E, T)}$  – кратность вырождения соответствующих состояний. Форм-факторы перехода рассчитывались с использованием водородоподобных огибающих волновых функций с радиусами локализации, соответствующими энергии уровня (1.8). Скорости междолинных переходов, полученные с использованием междолинных констант деформационного потенциала  $D_{i, -i}^{LA(g)} = 0.8 \times 10^8$  эВ/см [84] и данных спектра фононов, отличающихся в [66], [84] и [85]:

		[66]	[84]	[85]	
$\hbar\omega_{LAg}$	(мэВ)	22.4	18.5	18.8	
$S^{LAg}$	( $10^6$ см/с)	2.1	1.73	1.76	(3.39)
$\mathbf{W}_{2p_0, 1s(E)}^{LA(g)}$	( $10^9$ 1/с)	1.2	1.4	1.1	
$\mathbf{W}_{2p_0, 1s(T)}^{LA(g)}$	( $10^9$ 1/с)	0.57	3.6	3.1	

### Междолинные переходы с состояний $1s$

Частоты переходов  $1s(T, E) \rightarrow 1s(A)$  близки к частоте междолинных ТА(g) фононов. Минимальная разница соответствующих волновых векторов лежит в пределах локализации огибающих волновых функций. g-переходы между разными долинами не интерферируют, так как им соответствуют различные волновые вектора фононов. Используя (3.9), получим:

$$\overline{W}_{1s(E, T) \rightarrow 1s(A)}^b = \frac{q^2 D_{i, -i}^{TA(g)}}{8\pi^2 \rho_c |E_{1s(E, T)} - E_{1s(A)}| S_{b, q}} \frac{1}{6} \int d\Omega_q \mathcal{F}_{2p_0, 1s(E, T), i}(\mathbf{q} - \mathbf{q}_{g, i})|^2. \quad (3.40)$$

Скорости междолинных переходов, полученная с использованием междолинных констант деформационного потенциала (объединяющих две воз-

можных поляризации)  $D_{i,-i}^{TA(g)} = 0.3 \times 10^8$  эВ/см [84], и данных спектра фононов [66], [84] и [85]:

		[66]	[84]	[85]	
$\hbar\omega_{TAg}$	(мэВ)	13.7	12.1	11.4	
$S^{TAg}$	( $10^6$ см/с)	1.2	1.1	1.0	(3.41)
$\mathbf{W}_{1s(E),1s(A)}^{TA(g)}$	( $10^{10}$ 1/с)	2.8	3.5	3.6	
$\mathbf{W}_{1s(T),1s(A)}^{TA(g)}$	( $10^{10}$ 1/с)	2.6	3.7	4.1	

### 3.1.3 Роль междолинных переходов во внутрицентровой релаксации

Таким образом, междолинные переходы существенно сокращают время жизни состояний  $2p_0$  и  $1s(E, T)$  в Si:P. Скорость междолинных переходов для этих состояний больше скорости внутридолинных переходов, поскольку для междолинных переходов с этих состояний меньше сказываются ограничения, связанные с законом сохранения импульса: разность импульсов соответствующих долин отличается от импульса излучаемого фонона на величину, меньшую неопределенности импульса в локализованном состоянии. Время жизни состояний  $1s(E, T)$  сильно зависит от типа примеси, поскольку частота переходов  $1s(T, E) \rightarrow 1s(A)$  сильно отличается из-за химического сдвига. Время жизни состояния  $2p_0$  меняется мало, так как оно определяется переходом  $2p_0 \rightarrow 1s(T, E)$ , частота которого меняется мало.

Следует отметить, что для верхних возбужденных состояний, для которых выполняется  $qa_i \leq 1$ , внутридолинные переходы более эффективны.

## 3.2 Распределение носителей и усиление излучения в условиях оптической накачки при низких температурах

### 3.2.1 Населенности нижних возбужденных состояний при оптической накачке.

Населенности нижних возбужденных состояний нейтральных донорных центров ( $D^0$ ) описывались в рамках вероятностного метода. Отношение населенностей возбужденных примесных состояний к населенности основного состояния при фотоионизации выражается через вероятности следующим образом [A12]:

$$\frac{n_k}{n_{g.s.}} = \frac{\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt} P_{c,k,g.s.} + \widetilde{W}_{g.s.,k}^{ph,imp}}{\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp} + \mathbf{W}_{k,c}^{opt}(1 - P_{c,k,g.s.})}, \quad (3.42)$$

где  $\widetilde{W}_{g.s.,k}^{ph,imp}$  и  $\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp}$  – полная скорость перехода с  $g.s.$  на  $k$  уровень и обратно при взаимодействии с фононами и соударениях, учитывающая различные возможные пути по лестнице возбужденных примесных состояний;  $\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt}$  – скорость оптической ионизации основного состояния;  $\mathbf{W}_{k,c}^{opt}$  – скорость оптической ионизации состояния  $k$ , которая для используемых мощностей оптической накачки (до  $I = 10^{25}$  квантов/см<sup>2</sup>с) мала по сравнению с  $\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp}$  для всех состояний, кроме долгоживущего состояния  $2p_0$  в однодолинной модели;  $P_{c,k,g.s.}$  – вероятность, что носитель заряда из зоны проводимости ( $c$ ) попадет на уровень  $k$  до того, как он достигнет основного состояния  $g.s.$

Предполагая равновесное распределение фононов и свободных носителей заряда с температурой  $T$ , можно установить связь между термическим возбуждением и релаксацией из правила детального баланса:

$$\frac{\widetilde{W}_{g.s.,k}^{ph,imp}}{\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp}} = \exp\left(\frac{E_{g.s.} - E_k}{T}\right), \quad (3.43)$$

$E_k$  и  $E_{g.s.}$  энергии состояний  $k$  и  $g.s.$ . Таким образом, при

$$\exp\left(\frac{E_{g.s.} - E_k}{T}\right) \ll \frac{W_{g.s.,c}^{opt} P_{c,k,g.s.}}{\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp}} \quad (3.44)$$

термическое возбуждение несущественно.

Прямой захват с излучением междолинных оптических и акустических фононов мало эффективен при температурах  $T \ll \hbar\omega - E_i$  [87]. В этих условиях преобладает каскадный захват при взаимодействии с акустическими фононами и свободными носителями заряда.

При малых концентрациях свободных носителей  $n < 1/L_0(\varepsilon T/e^2)^2 \simeq 10^{12} \text{ см}^{-3}$  [53] ( $L_0$  – длина свободного пробега при рассеянии на акустических фононах,  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость,  $e$  – заряд электрона) время жизни свободных носителей и распределение по верхним возбужденным состояниям определяется взаимодействием с фононами, при больших – ударными процессами.

Скорость Оже переходов между нижними примесными уровнями уменьшается при увеличении разности энергий соседних уровней  $\Delta E$  как  $\Delta E^{-2}$ , в то время как скорости переходов при излучении фононов растут вплоть до  $\Delta E \simeq \delta E = \hbar s a_i^{-1}$ . При  $T \ll \Delta E$ , в соответствии с (1.17), скорости Оже-релаксации между нижними донорными состояниями ( $2p_0$ ,  $2s$ ,  $1s(E, T)$ ,  $1s(A)$ ) не превышают скоростей релаксации при взаимодействии с фононами вплоть до концентраций  $n \simeq 10^{14} \text{ см}^{-3}$ . Исключение составляет скорость Оже перехода между состояниями  $1s(T) \rightarrow 1s(E)$ , которая становится сравнимой с скоростью излучения фонона для этих состояний при более низких концентрациях свободных носителей ( $n \simeq 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ), поскольку их энергии близки.

Скорость перехода с излучением акустического фонона быстро падает при увеличении разности энергий соседних уровней  $\Delta E$  при условии  $\Delta E > \delta E = \hbar s a_i^{-1}$  [7, 9]. В случае, когда разность энергий соседних уровней превышает характерный шаг фононной релаксации (это справедливо для переходов по нижним возбужденным состояниям в кремнии вплоть до состояния  $3s$ ), вероятность попадания возбужденного носителя на каждый из таких уровней до релаксации на основное состояние близка к единице. Поскольку вероятность прямого перехода на уровень  $2p_0$ , минуя  $2s$  мала, получаем:

$$P_{c,2p_0,g.s.} \simeq 1 - \frac{W_{2s,1s}^{ac}}{W_{2s,2p_0}^{ac}}. \quad (3.45)$$

Оценивая скорости прямых переходов с излучением акустических фононов  $\mathbf{W}_{2s,1s}^{ac}$  и  $\mathbf{W}_{2s,2p_0}^{ac}$  в рамках водородоподобной модели примесного центра [7, 9], получаем  $P_{c,2p_0,g.s.} \simeq 0.99$ , т.е. большая часть носителей заряда попадает на уровень  $2p_0$  при релаксации. Таким образом,

$$\frac{n_{2p_0}}{n_{g.s.}} = \mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt} \tau_{2p_0}, \quad (3.46)$$

где  $\tau_{2p_0} = 1/\widetilde{W}_{2p_0,g.s.}^{ph}$  - среднее время релаксации с уровня  $2p_0$  на основное состояние с излучением фононов.

Состояния  $1s(E, T)$  удобно рассматривать как один уровень (см. раздел 1.4.1):

$$\frac{n_{1s(E,T)}}{n_{g.s.}} = \frac{\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt} P_{c,1s(E,T),g.s.}}{\widetilde{W}_{1s(E,T),g.s.}^{ph}}, \quad (3.47)$$

При этом  $\widetilde{W}_{1s(E,T),g.s.}^{ph}$  - средняя скорость релаксации с уровня  $1s(E, T)$ , а скорость прихода на уровень представляет собой сумму скоростей прихода на каждое из состояний. Вероятность

$$P_{c,1s(E,T),g.s.} \simeq \frac{W_{2p_0,1s(E)}^{ph} + W_{2p_0,1s(T)}^{ph}}{\widetilde{W}_{2p_0,g.s.}^{ph}} \simeq 1. \quad (3.48)$$

В случае быстрых ударных переходов между состояниями  $1s(E)$  и  $1s(T)$ , соотношение их населенностей соответствует температуре распределения свободных носителей. В случае, если вероятности ударных переходов между  $1s$  состояниями малы, отношение их населенностей:

$$\frac{n_{1s(E)}}{n_{1s(T)}} = \frac{\mathbf{W}_{2p_0,1s(E)}^{ph}}{\mathbf{W}_{2p_0,1s(T)}^{ph}} \frac{\mathbf{W}_{1s(T),g.s.}^{ph}}{\mathbf{W}_{1s(E),g.s.}^{ph}}. \quad (3.49)$$

Поскольку отличие скоростей релаксации для состояний  $1s(E)$  и  $1s(T)$  невелико (раздел 3.1.2), средняя скорость релаксации с уровня  $1s(E, T)$  мало меняется с изменением отношения их населенностей.

Состояние  $2p_0$ , отделенное наибольшим энергетическим интервалом от отщепленных состояний  $1s(E, T)$ , является наиболее долгоживущим. Время жизни отщепленных состояний  $1s(E, T)$  отделенных меньшим энергетическим зазором от основного состояния, меньше времени жизни состояния  $2p_0$ . Таким образом при низких температурах, когда тепловое возбуждение несущественно, формируется инверсия населенностей состояний  $2p_0$

и  $1s(E, T)$ :

$$\frac{F_{2p0}}{F_{1s(E,T)}} = \frac{\widetilde{W}_{1s(E,T),g.s.}^{ph} g_{1s(E,T)}}{\widetilde{W}_{2p0,g.s.}^{ph} g_{2p0}}, \quad (3.50)$$

где  $F_k$  - вероятность заполнения состояний, усредненная по уровню  $k$ , а  $g_k$  вырождение уровня. Усиление на переходе  $2p_0 \rightarrow 1s(i)$ :

$$\alpha_{2p_0 \rightarrow 1s(i)} = \sigma_{2p_0 \rightarrow 1s(i)} (F_{2p0} - F_{1s(i)}) N_D, \quad (3.51)$$

где  $F_{1s(i)} = F_{1s(E,T)} n_{1s(i)} g_{1s(E,T)} / n_{1s(E,T)} g_{1s(i)}$ ,  $\sigma_{2p_0 \rightarrow 1s(i)}$  - сечение оптических переходов между соответствующими уровнями.

Уравнения (3.47) и (3.46) дают относительную населенность уровней. Для получения абсолютного значения населенностей состояний и усиления необходимо решить уравнение электронейтральности, предварительно найдя относительные концентрации свободных носителей  $n$ , населенности верхних возбужденных состояний  $\sum n_i$  и состояний  $D^-$ -центров  $N_{D^-}$ :

$$N_D - N_A = n_{g.s.} + n_{1s} + n_{2p0} + \sum n_i + n + 2N_{D^-}, \quad (3.52)$$

где  $N_D$  - концентрация доноров,  $N_A$  - концентрация акцепторов.

### 3.2.2 Квазиклассическое описание распределения по верхним возбужденным состояниям

Населенности верхних возбужденных состояний удобно рассчитывать в квазиклассическом приближении [64, 8], которое удовлетворительно описывает примесные состояния, пока расстояние между уровнями не превышает характерной энергии испускаемого фонона. В рамках квазиклассического приближения (см раздел 1.4.2) функция распределения по возбужденным состояниям описывается уравнением Фоккера-Планка:

$$\tilde{\rho} \frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial E}, \quad (3.53)$$

где  $J$  - поток носителей в пространстве полной энергии. Стационарное решение соответствует  $J = \text{const}(E) = n_{g.s.} \mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt}$  - поток оптически ионизованных носителей. При взаимодействии с равновесными акустическими фононами,

$$J = -B(E) \left( f + T \frac{\partial f}{\partial E} \right), \quad (3.54)$$

$$B(E) = \frac{1}{V} \int \int_V \mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) \tau_{\mathcal{E}}^{-1}(\mathcal{E}) \delta(E - \mathcal{E} + V(\mathbf{r})) d\mathcal{E} d\mathbf{r}. \quad (3.55)$$

Влияние населенности долгоживущего состояния на распределение носителей заряда по верхним возбужденным состояниям удастся учесть, используя в качестве граничного условия для квазиклассической функции распределения  $f(E)$  значение относительной заселенности уровня  $2p_0$ , вычисленное в рамках вероятностного описания (3.46).

$$f(E_{2p_0}) = n_{2p_0}/N^+, \quad (3.56)$$

где  $N^+$  – концентрация заряженных доноров,  $E_{2s}$  и  $n_{2p_0}$  – энергия ионизации и населенность состояния  $2p_0$  соответственно. Стационарное решение уравнения (3.53) с граничным условием (4.6):

$$f = \frac{I \exp(-E/T)}{T} \int_{E_{2p_0}}^E \frac{\exp(\mathcal{E}/T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E} + \frac{n_{2p_0}}{N^+} \exp\left(\frac{E_{2p_0} - E}{T}\right). \quad (3.57)$$

Полное число частиц в верхних возбужденных состояниях:

$$\sum n_i = \int_{E_{2p_0}}^{E_N} f(E) \tilde{\rho} dE. \quad (3.58)$$

При используемых уровнях легирования и накачки в Si:P лазере, при  $|E_{2p_0}| \gg T$ , основной вклад в интеграл в (3.58) вносит область энергий вблизи нижнего предела интегрирования, где подынтегральная функция максимальна, вклад первого слагаемого (3.57) мал. При  $T \ll 1/\rho_{loc}(E_{2p_0})$  населенности возбужденных состояний малы, по сравнению с населенностью долгоживущего состояния  $2p_0$ .

### 3.2.3 Концентрация $D^-$ -центров и свободных носителей

$D^-$ -центр представляет собой отрицательно заряженный донор, или донор с дополнительным электроном. Оценка энергии уровня этого дополнительного электрона по аналогии с отрицательно заряженным атомом

водорода:  $E_{D^-} \simeq 0.055E_B$  (см. рис. 11).  $D^-$ -центры формируются из нейтральных донорных центров, захватывающих электроны при взаимодействии с акустическими фононами. Стационарное уравнение баланса для населенности  $D^-$ -центров:

$$n_{D^-} \tau_{D^-}^{-1} = n \alpha^0 N^0, \quad (3.59)$$

где  $\alpha^0$  – коэффициент захвата электронов на нейтральные центры,  $N^0 = N_D - N^+ - 2n_{D^-}$  – концентрация нейтральных центров,  $N^+ = N_A + n + n_{D^-}$  – концентрация заряженных центров. Время жизни  $D^-$ -центров  $\tau_{D^-}$  определяется термическим возбуждением и фотоионизацией:

$$\tau_{D^-}^{-1} = \mathbf{W}_{D^-}^{ph} + \mathbf{W}_{D^-}^{opt}. \quad (3.60)$$

В соответствии с принципом детального баланса,

$$\mathbf{W}_{D^-}^{ph} = \alpha^0 N_c(T) \exp(-E_{D^-}/T), \quad (3.61)$$

где  $N_c(T)$  – число состояний зоны проводимости в интервале энергий  $T$ .

Концентрация свободных носителей в условиях каскадного захвата с излучением акустических фононов:

$$\frac{n}{n_{g.s.}} = \frac{\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt}}{\alpha^+ N^+}, \quad (3.62)$$

где  $\alpha^+$  коэффициент каскадной рекомбинации на притягивающий кулоновский центр, см. [8]. Используемые коэффициенты захвата предполагают Максвелловское распределение свободных носителей заряда с температурой решетки. Существенного разогрева фотоионизованных носителей нет, пока времена релаксации свободных носителей при взаимодействии с оптическими и акустическими фононами быстрее, чем скорость оптического разогрева.

### 3.2.4 Распределение носителей заряда и усиление излучения

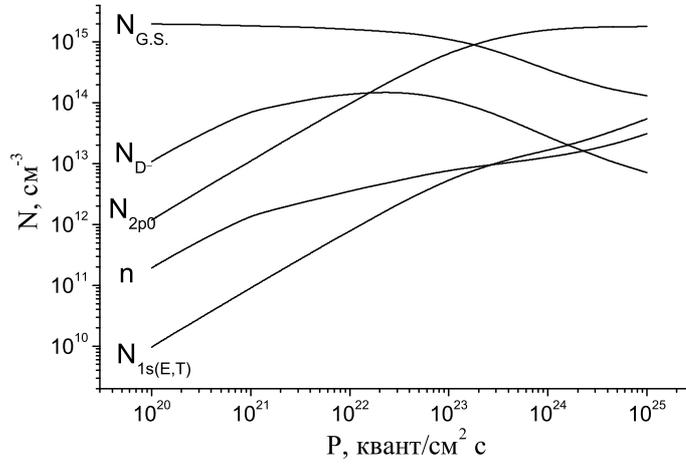
На рис. 11 представлена зависимость населенностей состояний  $D^0$ ,  $D^-$  - центров и концентрации свободных носителей от плотности потока фононов накачки  $CO_2$  лазером (P), рассчитанная в однодолинной модели.

Применимость однодолинного приближения обсуждается в разделе 3.1. В рамках однодолинной модели учитываются только внутривалинные переходы носителей заряда. Для расчета вероятностей всех переходов, кроме переходов с состояния  $2p_0$  и  $1s(E, T)$ , используются волновые функции водородоподобных состояний в приближении сферически симметричной долины с массой равной массе плотности состояний  $\Delta$ -долин зоны проводимости кремния  $m^* = 0.33m_0$ . В изотропном приближении константа акустического деформационного потенциала  $\Xi = 9$  эВ [84] объединяет вклады от LA и TA фононов. Предполагается возбуждение неполяризованным светом, которое приводит к равномерному заселению всех долин. Вероятности внутривалинных переходов с состояния  $2p_0$  и  $1s(E, T)$ , которые сильно зависят от вида волновой функции, рассчитаны с учетом многодолинного характера зоны проводимости и анизотропного закона дисперсии. Точная асимптотика матричного элемента при больших волновых векторах  $q \gg a_B^{-1} \gtrsim$  рассчитывалась по методу Мешкова [37]. Междолинные переходы не учитывались. Вероятности переходов с состояния  $1s(E, T)$  в однодолинной модели оценивались как скорости переходов между состояниями, подобными основному состоянию атома водорода с радиусом, соответствующим энергии ионизации (1.8); предполагалось, что скорость перехода между состояниями  $1s(E)$  и  $1s(T)$  из-за соударений выше скорости релаксации при взаимодействии с фононами.

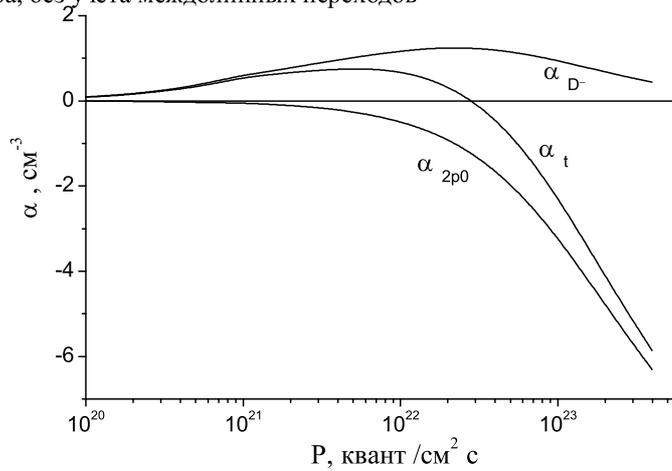
На рисунке 11 представлены результаты расчета усиления на переходах  $2p_0 \rightarrow 1s(E)$  и поглощения  $D^-$  центров на этой частоте. Фотоионизация  $2p_0$  состояния вносит малый вклад в поглощение. Сечение  $\sigma_{2p_0 \rightarrow 1s(E)} \simeq 10^{-14}$  см<sup>2</sup> оценивается в соответствии с данными работы [89] в предположении ширины линии порядка  $2$  см<sup>-1</sup>, сечение фотоионизации состояния  $2p_0$  на той же частоте  $\sigma_{2p_0 \rightarrow \text{continuum}} \simeq 5 \times 10^{-15}$  см<sup>2</sup>. Порог усиления определяется превышением усиления на примесных переходах над уровнем решеточного поглощения ( $\alpha_L < 0.1$  см<sup>-1</sup> [91]) и резонаторных потерь.

Порог усиления, полученный в однодолинной модели, более чем на порядок меньше наблюдаемого в эксперименте. Расхождение удается объяснить уменьшением времени жизни состояния  $2p_0$  из-за быстрых переходов с излучением междолинных LA(g) фононов (раздел 3.1.2).

Результаты расчета населенностей и коэффициента усиления с учетом междолинных переходов представлены на рис. 11, 11. Вывод о том, что высокие пороговые значения накачки связаны с междолинной релаксаци-



**Рис. 17.** Результаты расчета населенностей состояний  $2p_0$  ( $N_{2p_0}$ ),  $1s(E,T)$  ( $N_{1s(E,T)}$ ),  $1s(A)$  ( $N_{G.S.}$ ),  $D^-$  центров ( $N_{D^-}$ ) и концентрации свободных носителей ( $n$ ) в Si:P ( $N_d=2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $K=0.002$ ) при оптической ионизации излучением  $\text{CO}_2$  лазера, без учета междолинных переходов



**Рис. 18.** Коэффициент поглощения в Si:P ( $N_d=2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $K=0.002$ ) на частоте перехода  $2p_0 - 1s(T)$  при оптической ионизации излучением  $\text{CO}_2$  лазера:  $\alpha_{2p_0}$  - на переходах с состояния  $2p_0$  ( $N_{2p_0}$ ), включая переходы в континуум,  $\alpha_{D^-}$  - поглощение  $D^-$  центров,  $\alpha_t$  - полный коэффициент поглощения без учета потерь в резонаторе и решеточного поглощения, без учета междолинных фононов.

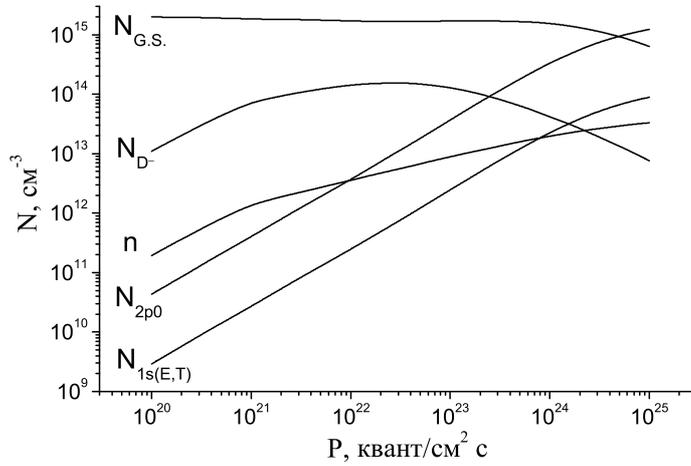


Рис. 19. Результаты расчета населенностей состояний  $2p_0$  ( $N_{2p_0}$ ),  $1s(E,T)$  ( $N_{1s(E,T)}$ ),  $1s(A)$  ( $N_{G.S.}$ ),  $D^-$  центров ( $N_{D^-}$ ) и концентрации свободных носителей ( $n$ ) в Si:P ( $N_d=2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $K=0.002$ ) при оптической ионизации излучением  $\text{CO}_2$  лазера, с учетом междолинных переходов.

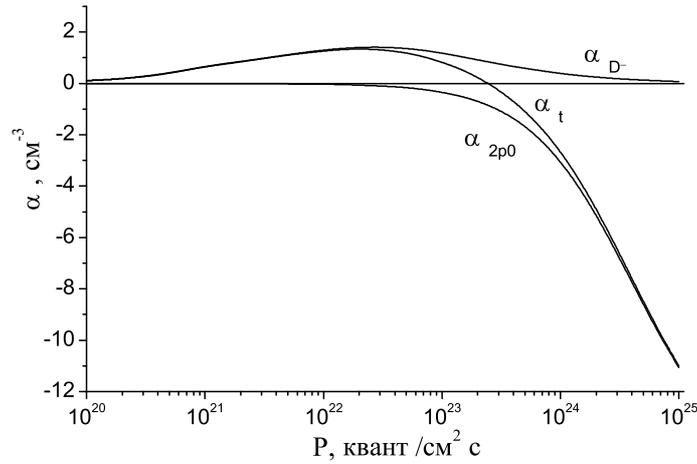


Рис. 20. Коэффициент поглощения в Si:P ( $N_d=2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $K=0.002$ ) на частоте перехода  $2p_0 - 1s(T)$  при оптической ионизации излучением  $\text{CO}_2$  лазера:  $\alpha_{2p_0}$  - на переходах с состояния  $2p_0$  ( $N_{2p_0}$ ), включая переходы в континуум,  $\alpha_{D^-}$  - поглощение  $D^-$  центров,  $\alpha_t$  - полный коэффициент поглощения без учета потерь в резонаторе и решеточного поглощения.

ей, позволяет ожидать существенного уменьшения порога в случае, когда междолинная релаксация подавлена.

### 3.2.5 Роль поглощения излучения на переходах $D^-$ -центров

$D^-$ -центры могут вносить существенный вклад в поглощение излучения на примесных переходах.

Сечение фотопоглощения  $D^-$ -центров [88] имеет максимум при  $\hbar\omega = 2E_{D^-}$ , спадает при больших частотах значительно медленнее, чем сечение фотоионизации состояний кулоновских центров, и составляет  $\sigma_{D^-} \simeq 10^{-14}$  см<sup>2</sup> на частоте переходов  $2p_0 \rightarrow 1s(E, T)$ , что существенно превышает сечение фотоионизации состояния  $2p_0$ . Сечения усиления на переходах  $2p_0 \rightarrow 1s(E, T)$  по оценкам, сделанным на основании температурной зависимости спектров фотопоглощения [89], имеют тот же порядок величины:  $\sigma_{2p_0 \rightarrow 1s(E)} \simeq 10^{-14}$  см<sup>2</sup>,  $\sigma_{2p_0 \rightarrow 1s(T)} \simeq 1.5 \times 10^{-14}$  см<sup>2</sup> при ширине линии порядка 2 см<sup>-1</sup>. Баланс усиления на переходах между примесными состояниями и поглощения  $D^-$ -центров определяется соотношением их населенностей.

В соответствии с (3.59), (3.46) и (3.62), отношение населенностей  $D^-$  и  $2p_0$  состояний равно произведению отношений коэффициентов рекомбинации на нейтральные и заряженные доноры, их концентраций и времен жизни состояний:

$$\frac{n_{D^-}}{n_{2p_0}} = \frac{\alpha^0 N^0 \tau_{D^-}}{\alpha^+ N^+ \tau_{2p_0}}, \quad (3.63)$$

Поскольку  $N^+/N^0$  растет с увеличением компенсации, в то время, как остальные величины в правой части (3.63) меняются мало, относительная концентрация  $D^-$ -центров монотонно уменьшается с ростом компенсации при любом уровне накачки.

Влияние  $D^-$ -центров и компенсации сильнее при низких интенсивностях накачки, поскольку в этом случае их время жизни не сокращается оптической ионизацией, а отношение  $N^+/N^0$  имеет наименьшее значение.

Хотя при низких температурах решетки коэффициент захвата на притягивающие донорные центры значительно больше, чем на нейтральные доноры (при температуре жидкого гелия  $\alpha^+ \geq 10^{-4}$  см<sup>3</sup>с<sup>-1</sup> [8],  $\alpha^0 \simeq 9 \times 10^{-7}$  см<sup>3</sup>с<sup>-1</sup> [88]), концентрация  $D^-$ -центров при низких интенсивностях опти-

ческой накачки и низком уровне компенсации может быть существенной, и даже превышать населенность  $2p_0$  состояния.

Действительно, при уровне накачки

$$\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt} < \mathbf{W}_{D^-,c} \frac{\sigma_{g.s.}(\hbar\omega_p)}{\sigma_{D^-}(\hbar\omega_p)} \quad (3.64)$$

оптическая ионизация  $D^-$ -центров несущественна, и их время жизни определяется термическим возбуждением.

При низких температурах  $\tau_{D^-}$  (см. 3.61) превышает время жизни наиболее долгоживущего состояния  $2p_0$  нейтрального примесного центра ( $\tau_{D^-} \simeq 6 \times 10^{-6}$  с при гелиевой температуре).

Заметим, что поскольку оптимальный уровень легирования для получения излучения на примесных переходах  $N_D - N_A \gg N_c(T) \exp(-E_{D^-}/T)$ , при выполнении условия (3.64) концентрация свободных носителей, в соответствии с (3.59), много меньше концентрации  $D^-$ -центров. Если также выполняется условие:

$$\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt} < \frac{N_A^2}{(N_D - N_A)^2} \alpha^+ N_c(T) \exp\left(\frac{-E_{D^-}}{T}\right), \quad (3.65)$$

$n_{D^-} \ll N_A$ , и концентрация заряженных центров определяется концентрацией компенсирующей примеси:  $N^+ \simeq N_A$  и  $N_0/N_+ \simeq (N_D - N_A)/N_A$ .

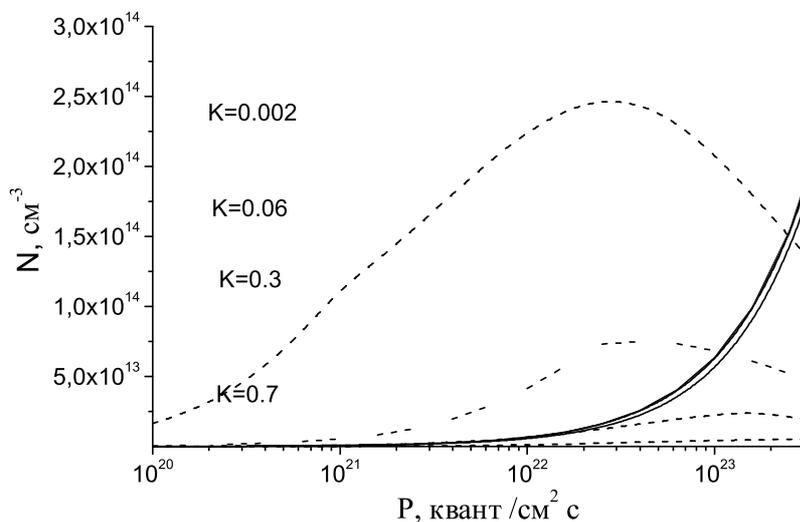
Таким образом, в соответствии с (3.63), при низкой интенсивности накачки (3.64), (3.65) и малой компенсации:

$$\frac{N_D - N_A}{N_A} > \tau_{2p_0} \alpha^+ N_c(T) \exp\left(\frac{-E_{D^-}}{T}\right), \quad (3.66)$$

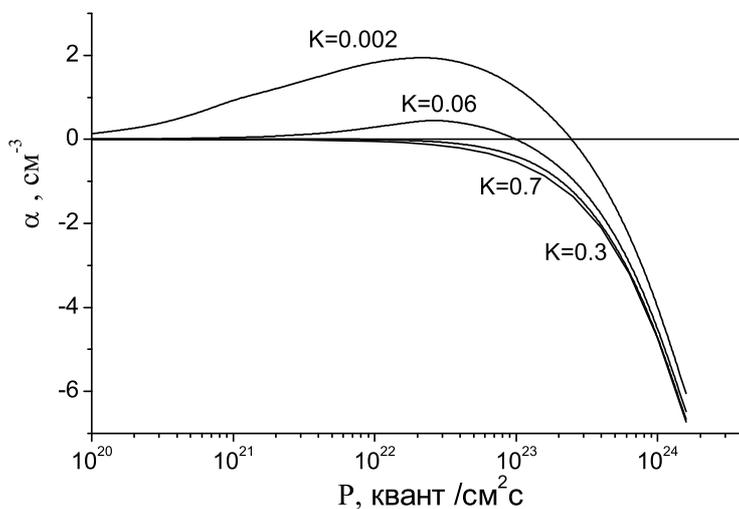
концентрация  $D^-$ -центров больше населенности  $2p_0$  состояний, и усиление невозможно.

При увеличении интенсивности накачки скорость захвата притягивающими центрами увеличивается относительно скорости захвата на нейтральные центры благодаря росту  $N^+/N^0$ , время жизни последних уменьшается из-за оптической ионизации. При этом уменьшается роль поглощения  $D^-$ -центров.

Результаты расчета концентрации  $D^-$ -центров и населенности состояния  $2p_0$  при разных уровнях компенсации и накачки представлены на рис. 11. Зависимость полного коэффициента усиления  $\alpha_t$ , включающего усиление на переходе  $2p_0 \rightarrow 1s(E)$ , поглощение при фотоионизации  $D^-$ -центров



**Рис. 21.** Зависимость концентрации  $D^-$  центров (пунктир) и населенности состояния  $2p_0$  (сплошная линия) в  $Si:P$  ( $N_d - N_a = 3 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ) от плотности потока фотонов  $CO_2$  лазера при различных уровнях компенсации  $K = N_a / N_d$ .



**Рис. 22.** Коэффициент поглощения в  $Si:P$  ( $N_d - N_a = 3 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ) на частоте перехода  $2p_0 - 1s(T)$  при оптической ионизации излучением  $CO_2$  лазера при разных уровнях компенсации.

и фотоионизации состояния  $2p_0$  на той же частоте, от интенсивности накачки для разных уровней компенсации представлена на рис. 22

Генерация возможна, когда усиление  $\alpha_t$  превышает сумму решеточного поглощения ( $\alpha_l \simeq 0.1 \text{ см}^{-1}$ ) и резонаторных потерь. При увеличении компенсации  $\alpha_t$  увеличивается и порог генерации снижается. Влияние компенсации на порог особенно существенно при малых резонаторных потерях, поскольку снижение потерь приводит к снижению порога до низких интенсивностей накачки (см. (3.64), (3.65)), при которых влияние  $D^-$ -центров особенно велико.

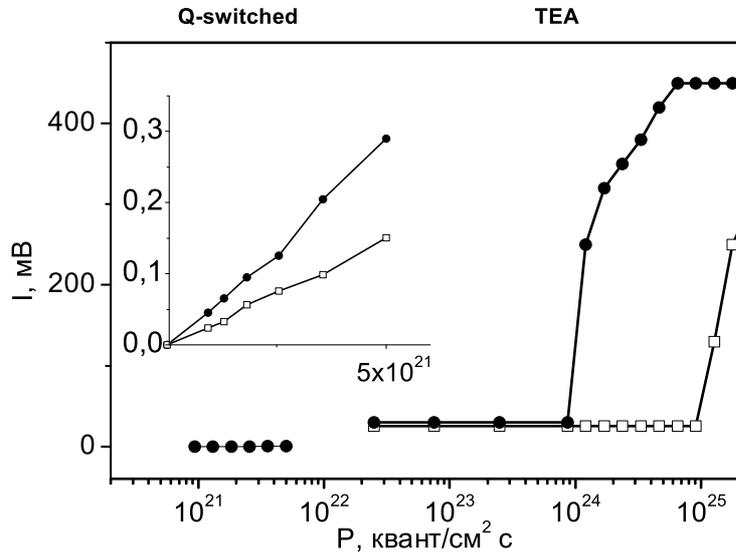
### 3.3 Обсуждение экспериментальных результатов и перспективы

Результаты исследования субмиллиметрового излучения из образцов Si:P при накачке излучением  $\text{CO}_2$  лазера представлены на рис. 23. Пороговое увеличение (на два порядка) интенсивности субмиллиметрового излучения наблюдалось при накачке  $P \simeq 10^{24}$  фотон  $\text{см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ . Зависимость фототока от мощности накачки вплоть до  $P = 10^{25}$  фотон  $\text{см}^{-2} \text{ с}^{-1}$  была плавной. Отсутствие скачков фототока показывает, что пороговое изменение интенсивности излучения не связано с резким изменением распределения носителей заряда. Стимулированный характер излучения подтверждается тем, что импульс излучения при мощности накачки выше пороговой был короче, чем импульс накачки (рис. 24), в то время как при меньших значениях мощности накачки длительности импульсов совпадали.

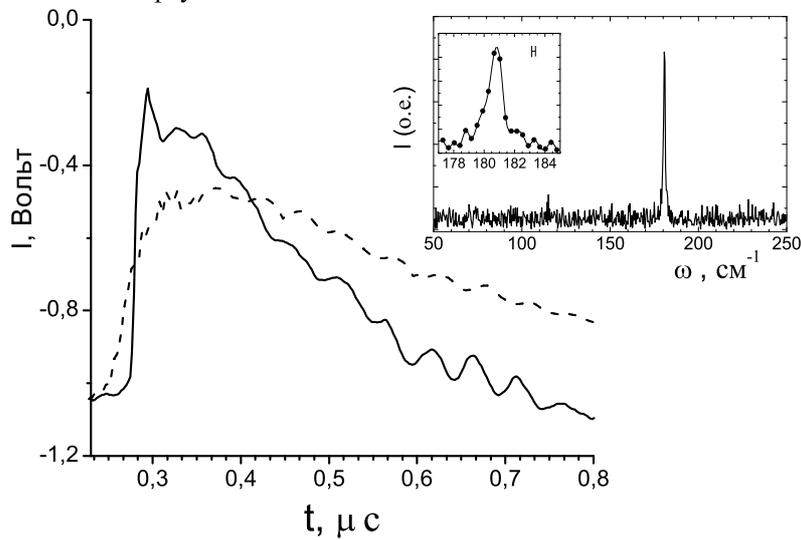
Укорочение импульса излучения в надпороговом режиме связано с экспоненциальным развитием процесса генерации.

Спектральные измерения показали, что длина волны излучения при накачке  $\text{CO}_2$  лазером соответствует переходу  $2p_0 \rightarrow 1s(T)$  ( $\lambda = 55 \text{ мкм}$ ). Отсутствие линии, соответствующей переходу  $2p_0 \rightarrow 1s(E)$  ( $\lambda = 59 \text{ мкм}$ ) в спектре излучения лазера связано с меньшим коэффициентом усиления на этой частоте в случае быстрых Оже переходов между состояниями  $1s(E)$  и  $1s(T)$  и конкуренцией процессов усиления на этих частотах.

Пороговое увеличение интенсивности излучения наблюдалось только в образцах с концентрацией донорных центров  $N_D = 9 \times 10^{14} \div 3 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .



**Рис. 23.** Зависимость интенсивности ДИК излучения из Si:P от плотности потока квантов накачки  $\text{CO}_2$  лазером для образцов с концентрацией активных доноров  $N_d - N_a = 9 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$  - квадраты,  $2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$  - кружки,  $3 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$  - треугольники.



**Рис. 24.** Осциллограммы импульсов накачки (пунктир) и излучения (сплошная линия),  $N_d = 2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ , вставка - спектр излучения.

Отсутствие эффекта при меньших концентрациях связано с меньшим числом носителей заряда, участвующих в усилении, что приводит к превышению потерь над уровнем усиления. При больших концентрациях орбиты, существенные для каскадного захвата, перекрываются, скорость захвата при этом ограничена скоростью энергетической релаксации [8]. При этом растет доля свободных носителей заряда и носителей на  $D^-$  центрах относительно числа носителей на возбужденных примесных состояниях. В то же время уширение примесных линий [90] приводит к уменьшению сечений примесных переходов и, следовательно, усиления.

Экспериментальное значение порога накачки хорошо согласуется с теоретическими расчетами с учетом влияния междолинных фононов на время жизни  $2p_0$  состояния (см. раздел 3.2.4).

Экспериментально было обнаружено уменьшение порога генерации при увеличении компенсации с сохранением концентрации активных центров  $N_D - N_A$ . Порог в образцах с компенсацией  $K = 0.06$  был приблизительно в полтора раза меньше, чем в слабо компенсированных образцах  $K < 0.002$  ( $N_D - N_A = 3 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ), что объясняется уменьшением концентрации и соответственно поглощения  $D^-$  центров (раздел 3.2.5) в компенсированных образцах. Согласно расчетам, влияние  $D^-$  центров на порог становится более существенным при уменьшении потерь в резонаторе.

Наиболее существенное уменьшение порога генерации на примесных переходах может быть связано с поиском условий, когда подавлена междолинная релаксация.

Одноосная деформация может быть использована для перестройки частоты излучения.

Результаты этой главы опубликованы в работах [A6, A10, A12, A14-A15, A18, A21-A23, A25-A29]

## Глава 4

# Инверсия населенностей и усиление излучения на примесных переходах в Si:Bi

Механизм получения инверсии населенностей на примесных состояниях Si:Bi связан с резонансным взаимодействием состояний  $2p_0$  и  $2s$  с оптическими фононами (рис. 25). Частоты переходов с состояний  $2p_0$  и  $2s$  в основное примесное состояние близки к частотам междолинных  $TO$   $f$  фононов ( $\hbar\omega_f = 59$  мэВ) и  $LO$   $g$  фононов ( $\hbar\omega_g = 62$  мэВ) [84] соответственно. Линия в спектре поглощения Si:Bi [23, 24], соответствующая переходу из основного состояния донора в состояние  $2p_0$ , значительно уширена по сравнению с другими линиями (рис. 26). Исследование изменения формы линии при одноосном сжатии кристалла [23, 24] показало, что сдвиг частоты линии от частоты оптического междолинного фонона приводит к сужению линии. Форма линии удовлетворительно соответствует расчетам оптических переходов при резонансном взаимодействии с оптическими фононами [25]. Это означает, что время жизни в состоянии  $2p_0$  контролируется резонансным взаимодействием с оптическими фононами и может быть оценено по ширине линии ( $\tau_{2p_0} \simeq \tau_{2s} \simeq 10^{-12}$  с). Населенности верхних возбужденных состояний при каскадном захвате фотоионизованных

носителей заряда формируются более медленной релаксацией при взаимодействии с акустическими фононами.

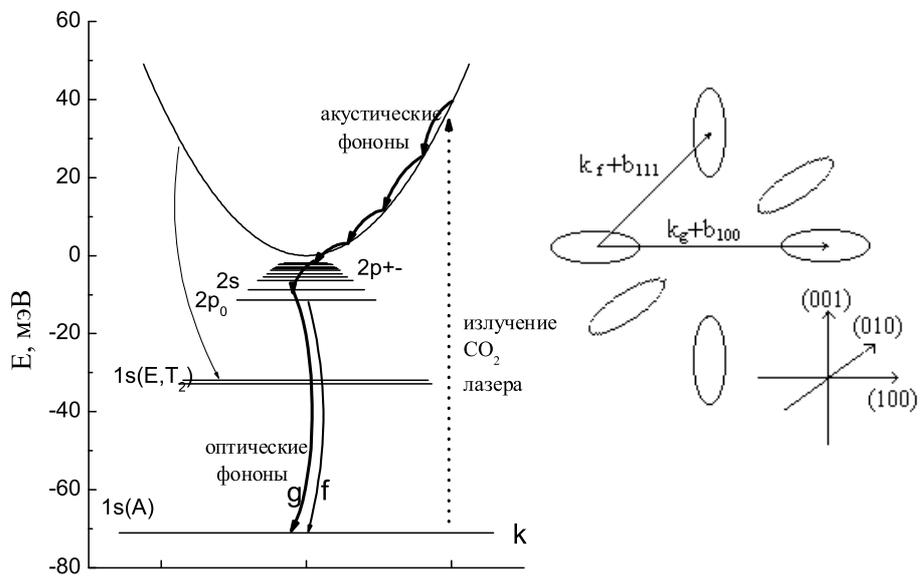
Инверсия населенностей образуется на переходах с верхних возбужденных в состоянии  $2p_0$  и  $2s$  [A12, A25], а также отщепленные состояния  $1s(E, T)$  [A29]. Состояния  $2p_0$  и  $2s$  оголяют быстрые переходы с излучением оптических фононов. Отщепленные состояния  $1s(E, T)$  оказываются относительно мало заселенными, поскольку большинство носителей заряда релаксирует с состояний  $2p_0$  и  $2s$  непосредственно в основное примесное состояние, минуя отщепленные.

## 4.1 Населенности верхних возбужденных состояний

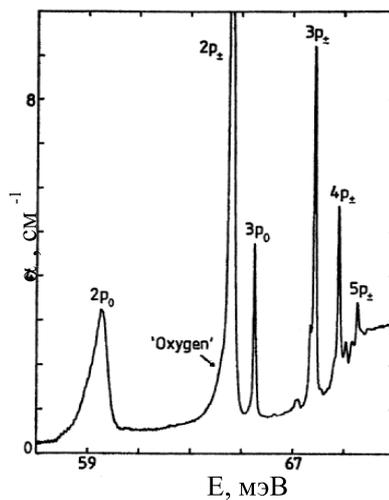
### 4.1.1 Квазиклассическое описание распределения по верхним возбужденным состояниям

Населенности верхних возбужденных примесных состояний и состояний зоны проводимости рассчитывались в квазиклассическом приближении [64, 8], которое удовлетворительно описывает примесные состояния, пока расстояние между уровнями не превышает характерной энергии испускаемого фонона (см раздел 1.4.2). В рамках этого приближения плотность состояний  $\tilde{\rho}(E)$  (Рис. 2) в поле примесных центров считается непрерывной функцией полной энергии (1.9) Распределение носителей заряда описывается кинетическим уравнением Больцмана. Квазиупругий характер взаимодействия с акустическими фононами позволяет считать, что время релаксации импульса меньше, чем время релаксации энергии, и функция распределения носителей заряда в поле притягивающих центров зависит только от полной энергии  $f = f(E)$ . При  $2ms^2 \ll T$  энергетическую релаксацию можно рассматривать как диффузию в пространстве полной энергии, и функция распределения при оптическом возбуждении удовлетворяет уравнению Фоккера-Планка:

$$\tilde{\rho} \frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial E} + I \delta(E - E_{g.s.} - \hbar\omega_{pump}), \quad (4.1)$$



**Рис. 25** Схема переходов в Si:Bi при фотоионизации излучением CO<sub>2</sub>-лазера и схема междолинных переходов при взаимодействии с g и f - фононами ( $b_{100}$  и  $b_{111}$  - вектора обратной решетки в соответствующих направлениях).



**Рис. 26** Спектр поглощения Si:Bi при T=4.2 К  
N.R. Butler, P. Fisher and A.K. Ramdas, Phys. Rev. B **12**, 3200 (1975)

где  $J$  – поток носителей в пространстве полной энергии,  $\omega_{pump}$  – частота накачки,  $I = n_{g.s.} \mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt}$  – поток оптически ионизованных носителей. Уравнение (4.1) предполагает малость потока носителей, связанного с фотоионизацией возбужденных состояний. При взаимодействии с равновесными акустическими фононами:

$$J = -B(E) \left( f + T \frac{\partial f}{\partial E} \right), \quad (4.2)$$

$$B(E) = \frac{1}{V} \int \int_V \mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) \tau_{\mathcal{E}}^{-1}(\mathcal{E}) \delta(E - \mathcal{E} + V(\mathbf{r})) d\mathcal{E} d\mathbf{r}, \quad (4.3)$$

Время энергетической релаксации при взаимодействии с акустическими фононами в модели изотропной невырожденной зоны:

$$\tau_{\mathcal{E}}^{ac}(\mathcal{E}) = L_0 \sqrt{\frac{m^*}{2\mathcal{E}}}, \quad (4.4)$$

$L_0 = 7.5 \times 10^{-4}$  см - характерная длина рассеяния электронов кремния на акустических фононах [53]. Для коэффициента энергетического динамического трения получаем, считая распределение заряженных примесных центров однородным с концентрацией  $N^+$ :

$$B(E) = \begin{cases} \frac{16N^+ Ry}{L_0} \frac{e^2}{3\epsilon|E|} & \text{при } E < E_N \\ \frac{16N^+ Ry}{L_0} R_N \left( \frac{1}{3} \left( \frac{E}{E_N} \right)^2 + \frac{E}{E_N} + 1 \right) & \text{при } E > E_N \end{cases}, \quad (4.5)$$

где  $Ry = e^4 m^* / 4\pi \epsilon^2 \hbar^3$ ,  $R_N = (4N^+ / 3\pi)^{-1/3}$ ,  $E_N = -e^2 / \epsilon R_N$  - средняя энергия, ниже которой нет перекрытия орбит соседних примесных центров.

## 4.1.2 Граничное условие для функции распределения

Влияние переходов при взаимодействии с оптическими фононами на распределение носителей заряда удастся учесть, используя в качестве граничного условия для квазиклассической функции распределения  $f(E)$  значение относительной заселенности уровня, резонансно взаимодействующего

с оптическими фононами, вычисленное в рамках вероятностного описания распределения по дискретным уровням.

$$f(E_{2s}) = n_{2s}/N^+, \quad (4.6)$$

где  $N^+$  – концентрация заряженных доноров,  $E_{2s}$  и  $n_{2s}$  – энергия ионизации и населенность состояния  $2s$  соответственно.

В соответствии с (3.42), в рамках вероятностного метода отношение населенностей возбужденных примесных состояний к населенности основного состояния при фотоионизации:

$$\frac{n_k}{n_{g.s.}} = \frac{\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt} P_{c,k,g.s.} + \widetilde{W}_{g.s.,k}^{ph,imp}}{\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp} + \mathbf{W}_{k,c}^{opt}(1 - P_{c,k,g.s.})}, \quad (4.7)$$

Поскольку разность энергий состояния  $2s$  и следующего возбужденного состояния  $2p_{\pm}$  превышает характерный шаг фононной релаксации, вероятность попадания фотоионизованного носителя на состояние  $2s$  до релаксации на основное состояние близка к единице:  $P_{c,2s,g.s.} \simeq 1$ . Скорости теплового возбуждения и релаксации в случае преобладания релаксационных процессов при взаимодействии с равновесными фононами связаны принципом детального баланса (3.43) и их соотношение определяется температурой решетки. При этом:

$$\frac{n_{2s}}{n_{g.s.}} \simeq \frac{\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt}}{\widetilde{W}_{2s,g.s.}^{ph}} + \exp\left(\frac{E_{g.s.} - E_{2s}}{T}\right), \quad (4.8)$$

Время жизни  $2s$  состояния  $\tau_{2s} = 1/\widetilde{W}_{2s,g.s.}^{ph}$  определяется взаимодействием с оптическими междолинными  $g$  фононами и составляет  $\tau_{2s} \simeq 10^{-12}$  с.

Стационарное решение уравнения (4.1) с граничным условием (4.6) и условием спадания  $f$  при больших энергиях:

$$\text{при } E < E_{pump} = E_{g.s.} + \hbar\omega_{pump}$$

$$f = \frac{I \exp(-E/T)}{T} \int_{E_{2s}}^E \frac{\exp(\mathcal{E}/T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E} + \frac{n_{2s}}{N^+} \exp\left(\frac{E_{2s} - E}{T}\right), \quad (4.9)$$

$$\text{при } E > E_{g.s.} + \hbar\omega_{pump}$$

$$f = \frac{I \exp(-E/T)}{T} \int_{E_{2s}}^{E_{pump}} \frac{\exp(\mathcal{E}/T)}{B(\mathcal{E})} d\mathcal{E} + \frac{n_{2s}}{N^+} \exp\left(\frac{E_{2s} - E}{T}\right).$$

Стационарный релаксационный поток равен потоку фотоионизованных носителей:  $-J = I = n_{g.s.} \mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt}$ .

Такие расчеты дают отношение населенностей состояний к населенности основного состояния, их абсолютную величину можно получить, решая уравнение электронейтральности:

$$N_D - N_A = \sum n_i + n + 2N_{D^-}, \quad (4.10)$$

где  $N_D$  - концентрация доноров,  $N_A$  - концентрация акцепторов,  $n = \int_{E_N} f(E) \tilde{\rho}(E) dE$  - число свободных носителей,  $\sum n_i = n_{g.s.} + n_{1s} + n_{2s} + n_{2p0} + \int_{E_N} f(E) \tilde{\rho}(E) dE$  - число связанных носителей, учитывая, что число заряженных доноров  $N^+ = n + N_A + N_{D^-}$ .

### 4.1.3 Инверсия населенности верхних возбужденных состояний

Населенность состояния  $2p_0$  при фотоионизации:

$$\frac{n_{2p0}}{n_{g.s.}} \simeq \frac{\mathbf{W}_{g.s.,c}^{opt} P_{c,2p0,g.s.}}{\widetilde{W}_{2p0,g.s.}^{ph}} + \exp\left(\frac{E_{g.s.} - E_{2p0}}{T}\right), \quad (4.11)$$

Поскольку электроны попадают в состояние  $2p_0$  в основном с состояния  $2s$ , а вероятность попасть в состояние  $2s$  при релаксации близка к единице, вероятность

$$P_{c,2p0,g.s.} \simeq \mathbf{W}_{2s,2p0}^{ph} / \widetilde{W}_{2s,g.s.}^{ph} \simeq 10^{-1} \quad (4.12)$$

Таким образом при низких температурах, когда

$$\exp\left(\frac{E_{g.s.} - E_{2p0}}{T}\right) \ll \frac{W_{g.s.,c}^{opt}}{\widetilde{W}_{2p0,g.s.}^{ph}}, \quad (4.13)$$

тепловое возбуждение на состояния  $2s$  и  $2p_0$  несущественно, населенность состояния  $2p_0$  меньше населенности состояния  $2s$ . Поскольку времена жизни состояний  $2s$  и  $2p_0$  ( $10^{-12}$  с) значительно меньше времен жизни, связанных с акустическими внутривалентными переходами ( $10^{-10} \div 10^{-11}$  с), эти состояния относительно мало заселены.

Распределения носителей в Si:Bi для состояний выше  $2p_0$ , рассчитанные при различных температурах кристаллической решетки, интенсивности накачки  $CO_2$  лазером  $I = 100 \text{ Вт/см}^2$ , концентрации донорной примеси  $N_D = 10^{16} \text{ см}^{-3}$  и компенсации менее одного процента, представлены на Рис. 27.

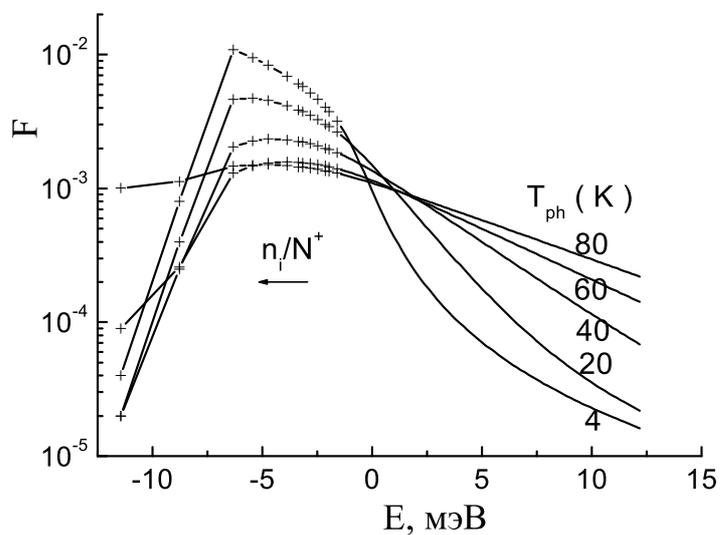
Формируется инверсия населенностей верхних возбужденных донорных состояний, а также состояний зоны проводимости с энергиями ниже тепловой по отношению к населенности состояний донора  $2p_0$  и  $2s$  вплоть до температур, превышающих азотную, что соответствует условию (4.13) (при интенсивности накачки  $I = 100 \text{ Вт/см}^2$ ).

При более высоких температурах существенным становится приток носителей на состояния  $2p_0$  и  $2s$  с основного состояния из-за поглощения оптических фононов и инверсия сглаживается.

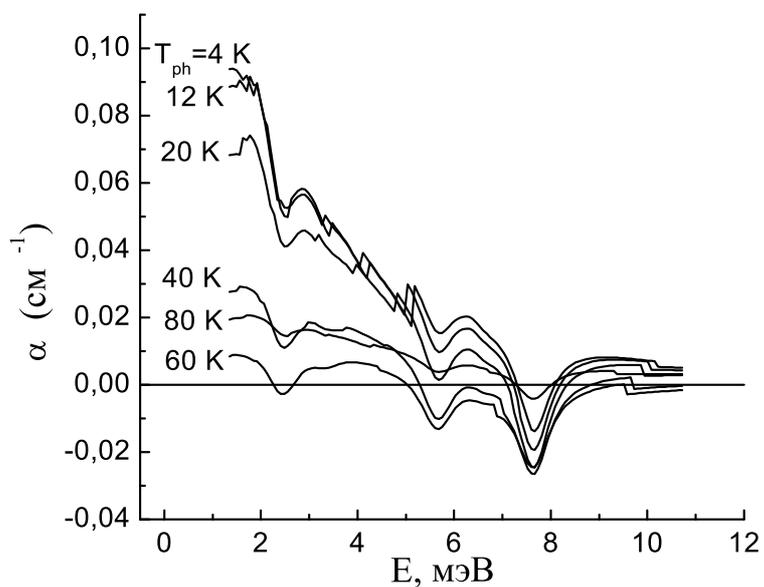
#### 4.1.4 Возможность усиления излучения на переходах в состояния $2p_0$ и $2s$

Частоты переходов на состояния  $2p_0$  и  $2s$  с состояний, на которых реализуется инверсия населенностей, лежат в диапазоне 25-100  $1/\text{см}$  (Рис. 27). Фотовозбуждение и фотоионизации верхних возбужденных состояний  $D^0$  центров приводят к поглощению в том же диапазоне.

Усиление и поглощение излучения на примесных переходах  $D^0$  центров в диапазоне энергий 1-12 мэВ при оптической накачке  $CO_2$  лазером было рассчитано с учетом переходов между всеми состояниями с энергиями ионизации больше  $E_N$ . Матричные элементы оптических переходов между примесными состояниями оценивались с использованием матричных элементов переходов между состояниями атома водорода с квантовыми числами  $l, m, n$  и Боровским радиусом, соответствующим эффективной массе плотности состояний в зоне проводимости кремния. Такое приближение дает хорошее соответствие (в пределах 10 процентов) с экспериментальными данными по поглощению на примесных переходах в кремнии [11]. Поглощение на переходах с примесных состояний в континуум оценивалось с использованием правила сумм (см. (2.45)). Ширина линий оценивалась в соответствии с [90]. Такие оценки дают значение коэффициента усиления на примесных переходах  $0.02 \text{ см}^{-1}$  при плотности потока фотонов накачки  $P = 10^{22} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ ,  $N_{Bi} = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .



**Рис. 27.** Вероятность заполнения состояний при накачке  $\text{CO}_2$  лазером с плотностью мощности излучения  $I = 100 \text{ Вт/см}^2$ , концентрации донорной примеси  $N_D = 10^{16} \text{ см}^{-3}$  и компенсации менее одного процента



**Рис. 28.** Зависимость коэффициента поглощения на переходах  $D^0$  центров от энергии фотона при плотности потока мощности  $100 \text{ Вт/см}^2$ ,  $N_{\text{Bi}} = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_A/N_{\text{Bi}} < 1\%$ .

Слабая зависимость величины усиления от температуры при выполнении условия (4.13) связана с тем, что при этом условии тепловое возбуждение на примесные состояния мало, их населенность определяется фото возбуждением (см. раздел 3.2.1). Хотя скорость захвата свободных носителей существенно меняется с температурой решетки, это слабо влияет на населенности примесных состояний, поскольку концентрация свободных носителей в рассматриваемых условиях мала, а основная часть носителей находится на основном состоянии, пока его время жизни  $1/W_{g.s.,c}^{opt}$  больше времен жизни остальных состояний. Таким образом температурная зависимость усиления при температурах, удовлетворяющих (4.13), определяется в основном уменьшением поглощения с ростом температуры из-за более плавной функции распределения. Оптимальная температура для наблюдения усиления на таких переходах, таким образом, близка к азотной.

Этот расчет показывает баланс усиления и поглощения на переходах  $D^0$  центров. Однако, указанный диапазон частот соответствует максимуму оптического поглощения  $D^-$  центров (см. 3.2.5), которое препятствует наблюдению усиления на переходах в состояния  $2p_0$  и  $2s$ . В соответствии с (3.63), при мощности накачки  $CO_2$  лазером до  $10^{24}$  квантов/см<sup>2</sup>с, которые использовались в экспериментах, обзор которых приведен в разделе 4.3, усиление на этих переходах возможно лишь в компенсированных образцах, когда нейтральных центров захвата меньше, чем заряженных центров.

## 4.2 Населенности нижних возбужденных состояний

Населенности нижних возбужденных состояний описывались в рамках вероятностного метода. Скорости переходов рассчитывались в модели изотропной невырожденной зоны. Выражение отношения населенностей возбужденных примесных состояний к населенности основного состояния при фотоионизации выражается через вероятности:

$$\frac{n_k}{n_{g.s.}} = \frac{W_{g.s.,c}^{opt} P_{c,k,g.s.} + \widetilde{W}_{g.s.,k}^{ph,imp}}{\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp} + W_{k,c}^{opt} (1 - P_{c,k,g.s.})}, \quad (4.14)$$

где  $\widetilde{W}_{g.s.,k}^{ph,imp}$  и  $\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp}$  – полная скорость перехода с  $g.s.$  на  $k$  уровень и обратно при взаимодействии с фононами и соударениях, учитывающая различные возможные пути по лестнице возбужденных примесных состояний;  $W_{g.s.}^{opt}$  – скорость оптической ионизации основного состояния;  $W_{k,c}^{opt}$  – скорость оптической ионизации состояния  $k$ , которая для используемых мощностей оптической накачки (до  $I = 10^{25}$  квантов/см<sup>2</sup>с) мала по сравнению с  $\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph,imp}$ ;  $P_{c,k,g.s.}$  – вероятность, что носитель заряда из зоны проводимости ( $c$ ) попадет на уровень  $k$  до того, как он достигнет основного состояния  $g.s.$ . Связь между нерадиационным возбуждением и релаксацией в случае преобладания взаимодействия с равновесными фононами:

$$\frac{\widetilde{W}_{g.s.,k}^{ph}}{\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph}} = \exp\left(\frac{E_{g.s.} - E_k}{T}\right), \quad (4.15)$$

$E_k$  и  $E_{g.s.}$  энергии состояний  $k$  и  $g.s.$ ,  $T$  – температура. Таким образом, при

$$\exp\left(\frac{E_{g.s.} - E_k}{T}\right) \ll \frac{W_{g.s.,c}^{opt} P_{c,k,g.s.}}{\widetilde{W}_{k,g.s.}^{ph}}, \quad (4.16)$$

термическое возбуждение несущественно. Прямой захват с излучением оптических фононов на основное состояние невозможен ( $E_{g.s.} > \hbar\omega_f, \hbar\omega_g$ ), а на возбужденные состояния мало эффективен при температурах  $T \ll \hbar\omega - E_i$ . В этих условиях преобладает каскадный захват при взаимодействии с акустическими фононами. Скорость перехода с излучением акустического фонона быстро спадает при увеличении разности энергий соседних уровней  $\Delta E$  при  $\Delta E > \delta E = \sqrt{8E_i m^* s^2}$ , где  $m^*$  эффективная масса носителя заряда,  $s$  скорость звука,  $E_i$  энергия ионизации состояния  $i$  [7, 9]. Разность энергий соседних уровней растет с увеличением энергии ионизации. Поскольку разность энергий уровня  $2p_{\pm}$  и ближайшего к нему уровня  $3p_0$  превышает  $\Delta E$ , вероятность попадания электрона при релаксации на каждое из двух состояний уровня  $2p_{\pm}$  близка к 1/2.

Быстрые переходы при спонтанном излучении оптических фононов с состояний  $2s$  и  $2p_0$  непосредственно в основное состояние приводят к тому, что основной поток носителей идет мимо состояний  $1s(E, T)$ . Вероятность  $P_{c,1s(E,T),g.s.}$  существенно меньше единицы. Скорости перехода с состояний  $2p_0$  и  $2s$  на основное состояние с излучением оптических фононов на пять порядков быстрее, чем скорость перехода с излучением акустических фононов между состояниями  $2p_0$  и  $1s(E, T)$ . Носители попадают в состояния

$1s(E, T)$  в основном при прямой рекомбинации в это состояние с излучением оптического фонона и одноквантовых переходов с излучением акустического фонона с состояния  $3s$ . Вероятность релаксации на состояние  $1s(E, T)$  через состояние  $3s$  мала:  $P_{c,1s(E,T),g.s.}^{3s} \simeq 2 \times 10^{-3}$ . Вероятность прямой рекомбинации на состояние  $1s(E, T)$  с излучением оптических фононов  $P_{c,1s(E,T),g.s.}^{o.p.}$  можно оценить, используя выражение для вероятности перехода (2.22). Вероятность излучения оптического фонона при рекомбинации на уровень  $1s(E, T)$  в единицу времени для электрона с энергией  $E$ :

$$W^{o.p.}(E) = \frac{\pi D_0^2}{\rho_c \omega_f} N^+ \delta(E - \hbar\omega_0 - E_{1s(E,T)}), \quad (4.17)$$

где  $D_0$  – константа деформационного оптического потенциала. Полная вероятность прямой рекомбинации на уровень  $1s(E, T)$  для релаксирующего носителя заряда:

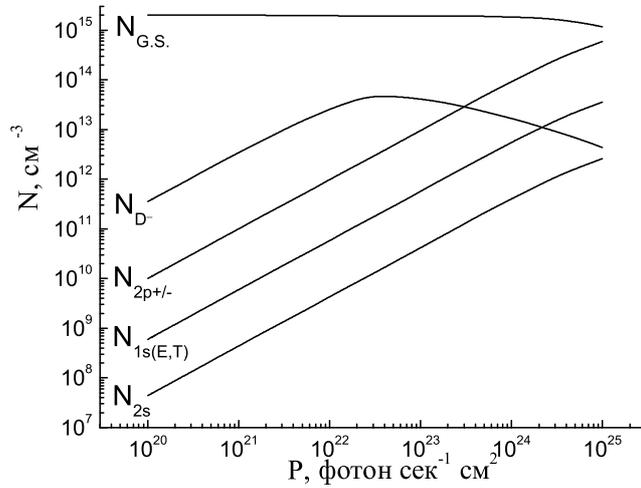
$$P_{c,1s(E,T),g.s.}^{o.p.} = \int W^{o.p.}(E(t)) dt, \quad (4.18)$$

где  $E(t)$  – зависимость энергии электрона от времени при релаксации. Для  $T \ll \hbar\omega_0 - E_{1s(E,T)}$ , релаксация энергии при взаимодействии с акустическими фононами описывается уравнением  $\frac{\partial E}{\partial t} = E/\tau_E$ . В этом случае вероятность

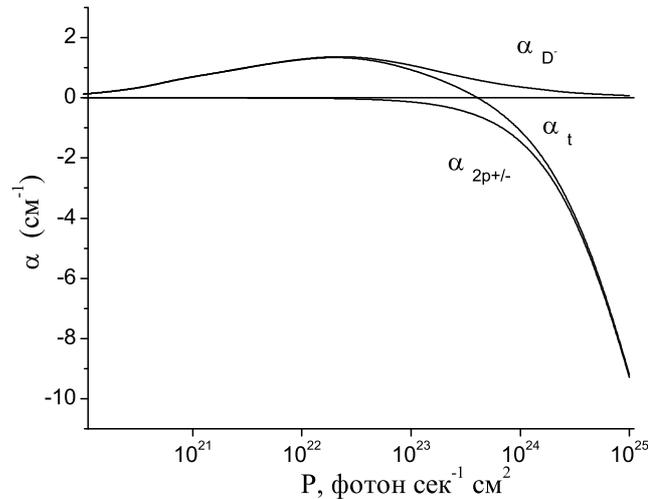
$$P_{c,1s(E,T),g.s.}^{o.p.} = \int W^{o.p.}(E) \frac{\tau_E}{E} dE = \frac{\pi D_f^2 N^+ \tau_E (E_{1s(E,T)} + \hbar\omega_f)}{\rho_c \omega_f (E_{1s(E,T)} + \hbar\omega_f)}. \quad (4.19)$$

При концентрации заряженных доноров  $N^+ \leq 2 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , что выполняется в n-Si с  $N_D = 2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$  и компенсацией до 10% при используемой мощности накачки, используя константы взаимодействия с оптическими междолинными фононами, получаем [84],  $P_{c,1s(E,T),g.s.}^{o.p.} \leq 10^{-3}$ . Таким образом, вероятность  $P_{c,1s(E,T),g.s.} = P_{c,1s(E,T),g.s.}^{3s} + P_{c,1s(E,T),g.s.}^{o.p.} \leq 3 \times 10^{-3}$  существенно меньше единицы. Хотя время жизни состояния  $2p_{\pm}$   $\tau_{2p_{\pm}} \simeq 10^{-10}$  с меньше времени жизни состояний  $1s(E, T)$  ( $\tau_{1s(E)} \simeq 10^{-9}$  с), благодаря большой разнице вероятностей попадания на уровни  $1s(E, T)$  и  $2p_{\pm}$ , между ними образуется инверсия населенностей.

На Рис. 29 представлены результаты расчетов распределения носителей в Si:Bi при различной мощности накачки  $CO_2$  лазером. На Рис. 30 представлены результаты расчетов усиления излучения на переходе  $2p_{\pm} \rightarrow 1s(E)$ , поглощения на переходах с  $D^-$ -центров на соответствующей частоте и полного коэффициента усиления на примесных переходах.



**Рис. 29.** Результаты расчета населенностей состояний  $2p(+/-)$  ( $N_{2p+/-}$ ),  $1s(E,T)$  ( $N_{1s}$ ),  $1s(A)$  ( $N_{G.S.}$ ),  $D^-$  центров ( $N_{D^-}$ ) в Si:Bi ( $N_d=2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $K=0.1$ ) при оптической ионизации излучением  $\text{CO}_2$  лазером.



**Рис. 30.** Коэффициент поглощения в Si:Bi ( $N_d=2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $K=0.1$ ) на частоте перехода  $2p_{+/-} - 1s(E)$  при оптической ионизации излучением  $\text{CO}_2$  лазера:  $\alpha_{2p+/-}$  - на переходах с состояния  $2p_{+/-}$ , включая переходы в континуум,  $\alpha_{D^-}$  - поглощение  $D^-$  центров,  $\alpha_t$  - полный коэффициент поглощения без учета потерь в резонаторе и решеточного поглощения.

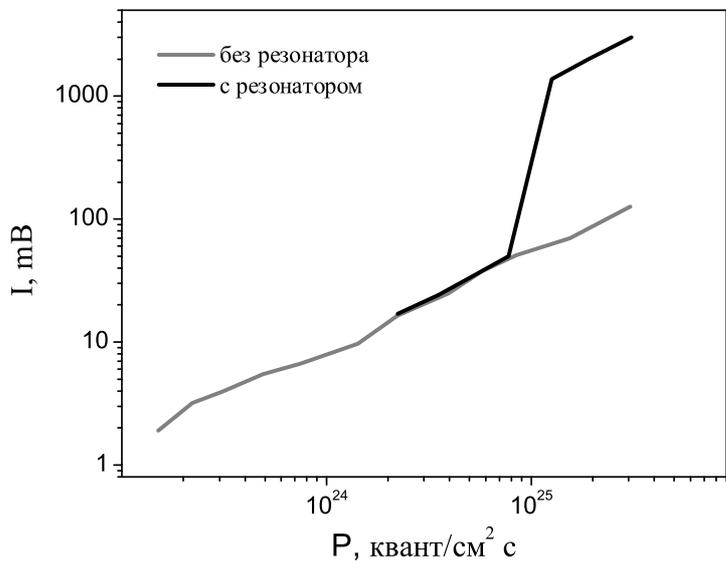


Рис. 31. Спонтанное и стимулированное излучение из Si:Bi,  $N_{\text{Bi}} = 2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$

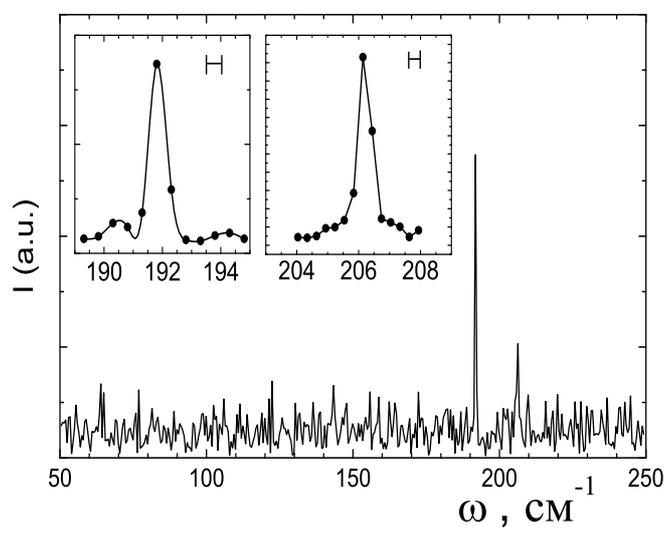


Рис. 32. Спектр стимулированного излучения Si:Bi.

Порог генерации определяется мощностью накачки, при которой усиление на примесных переходах превышает сумму поглощения кристаллической решетки и потери в резонаторе.

## 4.3 Обсуждение экспериментальных результа-

### ТОВ

С целью получения стимулированного излучения на примесных переходах Si:Bi при фотоионизации излучением CO<sub>2</sub> лазера исследовались образцы с уровнем легирования  $5 \times 10^{13} \div 2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .

Образцы были вырезаны в форме параллелепипедов  $7 \times 7 \times 5 \text{ мм}^3$ . После исследования спонтанного излучения образцы были оптически обработаны с целью получения резонаторов на полном внутреннем отражении.

В оптически обработанных образцах с уровнем легирования  $2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$  наблюдалось пороговое увеличение интенсивности излучения при эффективной плотности потока накачки  $8 \times 10^{24} \text{ квантов} \times \text{см}^{-2} \times \text{с}^{-1}$  (рис. 31). В образцах с уровнем легирования ниже  $8 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$  стимулированное излучение не наблюдалось.

Длины волн стимулированного излучения 52.2 мкм, что соответствует переходу между состояниями  $2p_{\pm}$  и  $1s(E)$  нейтрального донора, и 48.6 мкм, что соответствует переходу  $2p_{\pm} \rightarrow 1s(E)$  (рис. 32). Линии, соответствующие переходам на состояния  $2p_0$  и  $2s$  в спектре стимулированного излучения не наблюдались.

Теоретическая модель, предложенная выше согласуется с полученными экспериментальными результатами. Теоретический порог стимулированного излучения соответствует наблюдаемому с точностью до порядка величины.

Результаты этой главы опубликованы в работах [A8, A10, A12, A15, A21, A23, A25-A29]

# Заключение.

## Основные результаты работы

1. Разработан вероятностный метод расчета неравновесных населенностей возбужденных примесных состояний с учетом переходов по всей лестнице примесных уровней. В рамках этого метода число необходимых для расчета населенностей матричных элементов переходов ограничивается на основе анализа вероятностей различных маршрутов носителей заряда. Доказана эквивалентность вероятностного описания стационарных распределений носителей заряда по примесным состояниям и описания с помощью уравнений баланса. Использование населенностей, рассчитанных вероятностным методом в качестве граничного условия для уравнения Больцмана, позволяет описывать населенности состояний дискретного и непрерывного спектра согласованно.

2. Проведен расчет рекомбинации с излучением оптических фононов на возбужденные уровни водородоподобного центра. Показано, что рекомбинация при спонтанном излучении оптических фононов приводит к аномально большой населенности примесных состояний при разогреве свободных носителей электрическим полем до энергий порядка энергии оптического фонона при низких температурах кристаллической решетки.

3. Проведен расчет населенностей возбужденных акцепторных состояний в р-Ge лазере на межподзонных переходах горячих дырок. Обнаружено, что примесное поглощение существенно влияет на коэффициент усиления и эффективность р-Ge лазера. Показано, что диапазон оптимальных энергий ионизации легирующей примеси лежит между максимальной энергией фотона излучения на межподзонных переходах и энергией ионизации, при которой становится существенным рассеяние легких дырок на нейтральных примесных центрах.

4. Показано, что рекомбинация с излучением оптических фононов и преимущественная фотоионизация основного состояния лазерным излу-

чением приводит к инверсии населенностей и усилению излучения на примесных переходах в нелинейном режиме Ge:Ga лазера.

5. Получены вероятности переходов при взаимодействии с фононами между состояниями мелких донорных центров с учетом многодолинности зоны проводимости. Показано, что интерференция вкладов различных долин может существенно влиять на вероятность внутривалинного перехода, которая зануляется для  $1s(T) \rightarrow 1s(E)$  и  $1s(T) \rightarrow 1s(A)$  переходов в кремнии, а вклады междолинных и внутривалинных переходов не интерферируют в пределах применимости приближения эффективных масс для примесных состояний. Показано, что междолинные переходы между примесными состояниями преобладают над внутривалинными, если различие волнового вектора фонона и междолинного волнового вектора не превышает локализацию огибающей волновой функции примесных состояний в пространстве волновых векторов, и существенно уменьшают время жизни долгоживущего донорного состояния  $2p_0$  в кремнии.

6. Рассчитаны населенности состояний  $D^0$  и  $D^-$  центров в Si:P в условиях фотоионизации при низких температурах решетки. Показано, что накопление носителей на долгоживущем состоянии  $2p_0$  может приводить к инверсии населенностей и усилению на переходах в  $1s(E, T)$  состояния. Сделан расчет порога генерации, коэффициента усиления, влияния компенсации на характеристики Si:P лазера.

7. Проведен расчет населенностей примесных состояний в Si:Bi при фотоионизации. Показано, что резонансное взаимодействие состояний  $2s$  и  $2p_0$  с оптическими междолинными фононами может приводить к инверсии на переходах в эти состояния верхних возбужденных состояний и состояний зоны проводимости в интервале энергий, соответствующем температуре кристаллической решетки. Установлено, что преобладание одноквантовой релаксации с состояний  $2s$  и  $2p_0$  на основное состояние приводят к малой вероятности попадания релаксирующего носителя в состояния  $1s(E, T)$  и их относительно малой населенности. Показано, что на переходах в эти состояния с верхних возбужденных состояний может быть реализована инверсия населенностей и усиление излучения.

В заключение автор благодарит своего научного руководителя В.Н. Шастина за руководство работой, Р.Х. Жукавина, С.Г. Павлова, А.В. Муравьева, Н.W. Huebers, M. Rummeli, K. Auen, N.Hovenier, T. Klaassen за подготовку, проведение экспериментов и обсуждение результатов, А.А. Андропова за вдохновляющие замечания, Б.А. Андреева и T. Wenckebach за поддержку, Е.Ф. Орлова, И.М. Орлову, М.Е.Орлову, Т.В. Титову, А.П. Степанову за помощь.

# Приложение А

## Вероятности переходов между водородоподобными уровнями при взаимодействии с акустическими фононами

Волновые функции примесных состояний в рамках метода эффективных масс для невырожденной изотропной зоны с параболическим законом дисперсии:

$$\phi_f(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})\Phi_f(\mathbf{r}), \quad (\text{A.1})$$

где  $\psi(\mathbf{r})$  Блоховские функции вблизи экстремума зоны,  $\Phi_f(\mathbf{r})$  – огибающие функции, подобные состояниям атома водорода с обратным боровским радиусом  $\alpha = m^*e^2/\hbar^2\varepsilon$ . Электронная часть матричного элемента (3.5) отлична от 0 лишь для продольных фононов. Учитывая, что огибающие мало меняются на масштабе ячейки:

$$\begin{aligned} M_{1,2}^{\mathbf{q}} &= i\Xi(\mathbf{q}e^s)F_{1,2}(\mathbf{q}), \\ F_{1,2}(\mathbf{q}) &= \int d\mathbf{r} \phi_2^*(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}\phi_1(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$\mathbf{e}^s$  – единичный вектор поляризации фонона. Величина аналогичная  $F_{1,2}(\mathbf{q})$  в атомной физике носит название форм-фактора. Для переходов между состояниями, подобными  $1s$  ( $\Phi_{1s} = Ne^{-\alpha r}$ ) получаем:

$$F_{1,2}^{1s}(\mathbf{q}) = \frac{N_1 N_2 8\pi(\alpha_1 + \alpha_2)}{((\alpha_1 + \alpha_2)^2 + q^2)^2}, \quad (\text{A.3})$$

$N_f$  - нормировочные константы состояний,  $1/\alpha_f$  - радиусы локализации. Матричные элементы для переходов между водородоподобными состояниями  $(n, l, m) \rightarrow (n', l', m')$  можно получить, учитывая, что Матричные элементы для рекомбинации на возбужденные водородоподобные состояния  $\Phi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  могут быть получены из матричного элемента перехода по состояниям  $1s$  с помощью дифференцирования форм-фактора (A.3), поскольку функции  $\Phi_{n,l,m}$  представляют собой суммы слагаемых вида:  $e^{-r/a_n} r^k x^j y^{m-j} z^i$ . С другой стороны,

$$\frac{\partial^n \Phi_{1s}}{\partial \alpha^n} = (-r)^n \Phi_{1s}, \quad \frac{\partial^n \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})}{\partial q_x^l \partial q_y^{n-l}} = (ix)^j (iy)^{n-j} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}). \quad (\text{A.4})$$

Поскольку при дифференцировании подынтегрального выражения в (A.3) сходимость интеграла не нарушается, можно получить выражения для матричных элементов перехода  $(n, l, m) \rightarrow (n', l', m')$ , дифференцируя интеграл по параметрам:

$$F_{(n,l,m),f}(\mathbf{q}) = \frac{N_{nlm}}{N_1} \sum_{p=0}^{n-l-1} \sum_{i=i_0}^l \sum_{j=0}^{|m|} C_p \frac{\partial^{l+p} F_{1,f}(\mathbf{q})}{\partial \alpha^{2l-2i+p} \partial q_x^j \partial q_y^{|m|-j} \partial q_z^{2i-l-|m|}} \Big|_{\alpha=1/a_n},$$

$$C_p = C_{p-1} \frac{2(n-l-p)}{pa_n(2l+p+1)}, \quad C_0 = \binom{l}{i} \binom{2i}{l+|m|} \binom{|m|}{j} \frac{i^{-j}}{a_n^l},$$

$$N_{nlm} = \frac{1}{(2l)! l!} \sqrt{\frac{(n+l)!(l-|m|)!(l+|m|)!}{n(n-l-1)!(2l+1)\pi a_n^3}}, \quad (\text{A.5})$$

где  $i_0 = \frac{l+|m|}{2}$  для четных  $l+|m|$ , а для нечетных  $i_0 = \frac{l+|m|+1}{2}$ .

# Приложение В

## Средняя вероятность перехода с вырожденного уровня

Средняя вероятность перехода с вырожденного уровня 1 с вырождением  $n$  в некоторое состояние 2 с волновой функцией  $\varphi$  под действием возмущения  $\hat{V}$ :

$$P_{1 \rightarrow 2} = \frac{2\pi}{n\hbar} \sum_i \langle \phi_i | \hat{V} | \varphi \rangle^2 \delta(E_1 - E_2). \quad (\text{B.1})$$

Если  $\phi_i, i = 1, \dots, n$  – ортонормированные волновые функции состояний уровня 1, то для любой интегрируемой функции  $\Phi$  можно рассматривать  $C_i = \langle \Phi | \phi_i \rangle = \int \Phi^* \phi_i d\mathbf{r}$  как компоненты вектора в  $n$ -мерном пространстве. Действительно, при линейном преобразовании системы волновых функций вырожденного уровня  $\phi'_j = \sum L_{ji} \phi_i$ ,  $C_i$  преобразуются как компоненты вектора:  $C'_j = \sum L_{ji} C_i$ . Длина вектора  $\sum |C_i|^2$  сохраняется при ортогональных преобразованиях:

$$\sum |C'_j|^2 = \sum \langle \Phi | \phi'_j \rangle \langle \Phi | \phi'_j \rangle = \sum_{i,k} \sum_j L_{i,j}^* L_{k,j} \langle \Phi | \phi_k \rangle \langle \Phi | \phi_i \rangle. \quad (\text{B.2})$$

Откуда получаем, что поскольку  $\sum_j L_{i,j}^* L_{k,j} = \delta_{i,k}$ ,  $\sum |C'_j|^2 = \sum |C_i|^2$ . Выбирая в качестве  $\Phi = \hat{V} \varphi$ , получаем, что  $\sum_i |\langle \phi_i | \hat{V} | \varphi \rangle|^2$ , а с ней и средняя вероятность перехода с вырожденного уровня, не зависит от выбора ортонормированных комбинаций волновых функций вырожденного уровня.

## Литература

- [1] C. Sirtori, J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho, *Long wavelength infrared ( $\lambda \simeq 11\mu\text{m}$ ) quantum cascade lasers*, Appl. Phys. Lett., **69**, 2810 (1996).
- [2] O. Gauthier-Lfaeys, P. Boucaud, F. H. Julien, S. Sauvage, S. Cabaret, J.-M. Lourtioz, V. Thierry-Mieg and R. Planel, *Long wavelength ( $15.5\mu\text{m}$ ) unipolar semiconductor laser in GaAs quantum wells*, Appl. Phys. Lett., **71**, 3619 (1997).
- [3] A. A. Ignatov, K. F. Renk, and E. P. Dodin, *Esaki-Tsu superlattice oscillator: Josephson-like dynamics of carriers*, Phys. Rev. Lett. **70**, 1996 (1993).
- [4] A. A. Andronov, Yu. N. Nozdrin, V. N. Shastin, *Tunable FIR Lasers in Semiconductors Using Hot Holes*, Infrared Physics, **27**, 31 (1987).
- [5] Special Issue on Far-infrared Semiconductor Lasers, J. Opt. Quantum Electronics **23**, No.2 (1991).
- [6] M. Lax, *Cascade capture in solids*, Phys. Rev **119**, 1502 (1960).
- [7] G. Ascarelly and S. Rodriguez, *Recombination of electrons and donors in n-type germanium*, Phys. Rev. **124**, 1321 (1961).
- [8] В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич *Захват носителей заряда на притягивающие центры в полупроводниках ФТП* **12**, 3 (1978).
- [9] С. В. Мешков, Э. И. Рашба, *Вероятности безызлучательных переходов в акцепторных центрах*, ЖЭТФ **76**, 2207 (1979).

- [10] S. T. Pantelides, *The electronic structure of impurities and other point defects in semiconductors*, Rev. Of Modern Phys. **50**, 797 (1978).
- [11] A. K. Ramdas and S. Rodriguez, *Spectroscopy of the solid-state analogues of the hydrogen atom: donors and acceptors in semiconductors*, Rep. Prog. Phys. **44**, 1297 (1981).
- [12] W. Pickin, *Impact ionization in n-germanium, 4-9.5 K*, Phys. Rev. B **20**, 2451 (1979).
- [13] L. Reggiani and V. Mitin, *Recombination and ionization processes at impurity centers in hot-electron semiconductor transport*, Rivista del Nuovo Cimento **12**, 1 (1989).
- [14] Я. Е. Покровский, О. И. Смирнова, *Релаксация примесного возбуждения в кремнии, легированном примесями III и V групп*, Письма в ЖЭТФ **516**, 377 (1990).
- [15] Е. М. Гершензон, Г. Н. Гольцман, Н. Г. Птицина, *Заселенность и время жизни возбужденных состояний мелких примесей в Ge*, ЖЭТФ, **76**, 711 (1979).
- [16] K. Geerinck, Doctor degree thesis, Technical University of Delft (1995).
- [17] T. Theiler, F. Keilman and E. E. Haller, *Nonlinear effects in impurity pumping and impurity ionization*, Inst. Phys. Conf. ser. No95: chapter 2, 179, Third conf. on shallow impurities in semiconductors, Linkoping, Sweden (1988).
- [18] L. E. Vorob'ev, S. N. Danilov, D. V. Donetskii, Yu. V. Kochegarov, V. I. Stafeev, and D. A. Firsov, *Noninjection narrow-band laser emitting far-infrared radiation due to hot holes and its use in impurity breakdown investigations*, Semiconductors **27**, 77 (1993).
- [19] S. V. Demihovsky, A. V. Murav'ev, S. G. Pavlov and V. N. Shastin, *Stimulated emission using the transitions of shallow acceptor states in germanium*, Semicond. Sci. Technol. **7**, B622 (1991).
- [20] Yu. A. Mityagin, V. N. Mursin, O. N. Stepanov and S. A. Stoklitsky, *Anisotropy and uniaxial effects in submillimeter stimulated emission*

*spectra of hot holes in germanium in strong E, H fields*, Semicond. Sci. Technol. **7**, B641 (1991).

- [21] И. В. Алтухов, М. С. Каган, В. П. Синис, *Меэзонное излучение горячих дырок в Ge при одноосном сжатии*, Письма в ЖЭТФ, **47**, 136, (1988).
- [22] M. A. Odnobliudov, I. N. Iassievich, M. S. Kagan, Yu. M. Galperin and K. A. Chao, *Population inversion induced by resonant states in semiconductors*, Phys. Rev. Lett. **83**, 644 (1999).
- [23] A. Onton, P. Fisher, A. K. Ramdas, *Anomalous width of some photoexcitation lines of impurities in silicon*, Phys. Rev. Lett. **19**, 781 (1967).
- [24] N. R. Butler, P. Fisher and A. K. Ramdas, *Excitation spectrum of bismuth donors in silicon*, Phys. Rev. B **12**, 3200 (1975).
- [25] S. Rodriguez and T. D. Schultz, *Effects of resonant phonon interaction on shapes of impurity absorption lines*, Phys. Rev. **178**, 1252 (1969).
- [26] G. J. Rees, H. G. Grimmeiss, E. Jansen and B. Skarstam, *Capture, emission and recombination at a deep level via an excited state*, J. Phys C: Solid St. Phys. **13**, 6157 (1980).
- [27] E. Scholl, W. Heisel and W. Prettl, *Impact ionization induced negative Far-Infrared photoconductivity in n-GaAs*, Z. Phys. B - Condensed Matter **47**, 285 (1982).
- [28] V. V. Mitin, *A negative differential conductivity due to recombination and impact ionization in semiconductors at low temperatures*, Appl. Phys. A **39**, 123 (1986).
- [29] J. Peinke, A. Muhlbach, R. P. Huebener and J. Parisi, *Spontaneous oscillations and chaos in p-germanium*, Phys. Lett. **108A**, 407 (1985).
- [30] W. Quade, G. Hupper, and E. Scholl, *Monte-Carlo simulation of nonequilibrium phase transition in p-type Ge at impurity breakdown*, Phys. Rev. B **49**, 13408 (1994).

- [31] D. Schechter, *Theory of shallow acceptor states in Si and Ge* J. Phys. Chem. Solids **23**, 237-247 (1962).
- [32] R. L. Jones and P. Fisher, *Excitation spectra of group III impurities in germanium*, J. Phys. Chem. Solids **26**, 1125 (1965).
- [33] K. S. Mendelson and H. M. James, *Wave functions and energies of shallow acceptor states in germanium*, J. Phys. Chem. Solids **25**, 729 (1964).
- [34] N. Binggeli and A. Baldereschi, *Prediction of line intensities and interpretation of acceptor spectra in semiconductors*, Solid State Communications **66**, 323 (1988).
- [35] В. Н. Абакумов, *Расчет вероятности захвата электрона на кулоновский центр при спонтанном излучении оптического фонона*, ФТП **13**, 59 (1979).
- [36] D. J. Robbins and P. T. Landsberg, *Impact ionization and Auger recombination involving traps in semiconductors*, J. Phys. C: Solid St. Phys. **13**, 2425 (1980).
- [37] С. В. Мешков, *Безызлучательные переходы в примесных центрах с участием коротковолновых фононов*, ФТТ **21**, 1114 (1979).
- [38] Б. Л. Гельмонт, М. И. Дьяконов, *Примесные состояния в полупроводниках с нулевой запрещенной зоной*, ЖЭТФ **62**, 713 (1972).
- [39] Ш. М. Коган, Р. Таскинбоев, *Спектры мелких доноров в германии и кремнии*, Ф.Т.П.б **17**, 1583 (1983).
- [40] A. F. Polulanov, V. I. Galiev and V. E. Zhuravlev, *Photoionization cross-section of shallow acceptors in semiconductors: effect of a change in heavy-to light-hole mass ratio*, Materials Science Forum **65-66**, 41 (1990).
- [41] C. Kittel and A. Mitchell, *Theory of donor and acceptor states in silicon and germanium*, Phys.Rev. **96**, 1488 (1954).
- [42] W. Kohn, J. M. Luttinger, *Theory of donor states in silicon*, Phys.Rev. **98**, 915 (1955).

- [43] Б. Л. Гельмонт, А. В. Родина, *Энергия связи дырки на многозарядном акцепторе в полупроводниках со структурой алмаза*, ФТП, **25**, 2189 (1991).
- [44] A. Baldereschi, *Valley-orbit interaction in semiconductors*, Phys. Rev. B **1**, 4673 (1970).
- [45] П. Дирак, *Принципы квантовой механики*, Наука, Москва, 1979.
- [46] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва, 1971.
- [47] F. Bassani, G. Iadonisi and B. Preziosi *Band structure and impurity states*, Phys. Rev. **186**, 735 (1969).
- [48] R. Buczko and F. Bassani, *Shallow acceptor bound and resonant states in Si*, Inst. Phys. Conf. ser. No95: chapter 2, 107, Third conf. on shallow impurities in semiconductors, Linköping, Sweden (1988).
- [49] M. A. Odnobliudov, V. M. Chistyakov, I. N. Yassievich and M. S. Kagan *Resonant States in Strained Semiconductors* Physica Status Solidi (b) **210**, 873 (1998).
- [50] N. O. Lipari, A. Baldereschi, M. I. W. Thewalt, *Central cell effects on acceptor spectra in Si and Ge*, Solid State Comm. **33**, 277 (1980).
- [51] Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников*, Наука, Москва, 1979.
- [52] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, Москва, 1989.
- [53] В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках*, Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН, С.-Петербург, 1997.
- [54] N. Sclar and E. Burstein, *Optical and impact recombination in impurity photoconductivity of germanium and silicon*, Phys. Rev. **98**, 1757 (1955).
- [55] H. Gummel, M. Lax, *Thermal capture of electrons in silicon*, Annals of physics **2**, 28 (1957).

- [56] I. Wilke, O. D. Dubon, J. W. Beeman, E. E. Haller, *Spectroscopy of the hole population in bound excited acceptor states during recombination in p-type Ge*, Solid State Commun. **93**, 409 (1995).
- [57] P. T. Landsberg, C. Rhys-Roberts and P. Lal, *Auger recombination and impact ionization involving traps in semiconductors*, Proc. Phys. Soc. **84**, 915 (1964).
- [58] A. Haug, *Auger recombination with traps*, Phys. Stat. Sol. (b) **97**, 481 (1980).
- [59] M. E. Cohen and P. T. Landsberg, *Effect of compensation on breakdown fields in homogenous semiconductors*, Phys. Rev. **154**, 683 (1967).
- [60] K. Omidvar, *Ionization of excited atomic hydrogen by electronic collision*, Phys. Rev. **140**, A26 (1965).  
K. Omidvar, *Excitation by electron collision of excited atomic hydrogen*, Phys. Rev. **140**, A38 (1965).
- [61] В. Л. Бонч-Бруевич, Ю. В. Гуляев, *К теории ударной рекомбинации в полупроводниках*, ФТТ **2**, 465 (1960).
- [62] В. Ф. Банная, Е. М. Гершензон, Т. Г. Фукс, *Особенности рассеяния и рекомбинации горячих носителей в Si:B*, ФТП **13**, 264 (1979).
- [63] Н. Мотт, Г. Месси *Теория атомных столкновений*, ИЛ, Москва, 1951.
- [64] Л. П. Питаевский, *Рекомбинация электронов в одноатомном газе*, ЖЭТФ, **42**, 1326 (1962).
- [65] А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, *Коэффициент рекомбинации в плотной низкотемпературной плазме*, ЖЭТФ, **46**, 1281 (1964).
- [66] В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* Наука, Москва, 1984.
- [67] В. Н. Абакумов, *Рекомбинация горячих электронов на примесные центры в полупроводниках*, ФТП **13**, 969 (1979).
- [68] А. А. Андронов, В. А. Козлов, Л. С. Мазов, В. Н. Шастин, *Об усилении далекого инфракрасного излучения в германии при инверсии населенностей горячих дырок*, Письма в ЖЭТФ, **30**, 585 (1979).

- [69] S. Komiyama and S. Kuroda, *Far-infrared laser oscillation in p-Ge* Solid State Commun. **59**, 167 (1986).
- [70] F. Keilmann, V. N. Shastin and R. Till, *Pulse buildup of the germanium far-infrared laser*, Appl. Phys. Lett. **58(20)**, 2205 (1991).
- [71] E. V. Starikov, P. N. Shiktorov, *Numerical simulation of far infrared emission under population inversion of hole subbands*, Opt. quantum Electronics, **23**, S177 (1991).
- [72] F. Ghianni, T. O. Klaassen and W. Th. Wenckebach, *The influence of intense THz fields on the magneto-photoconductivity of n-GaAs under impact ionization conditions.*, Conference Digest of the 23rd International Conference on Infrared and Millimeter Waves, 7-11 September 1998, Essex United Kingdom, p 60 (1998).
- [73] H. A. Bethe and E. Solpiter, *Quantum mechanics of one and two electron atoms*, Academic Press, N.Y. (1957).
- [74] Erik Brundermann, Danielle R. Chamberlin, and Eugene E. Haller, *High duty cycle and continuous terahertz emission from germanium*, Appl. Phys. Lett. **76**, 2991 (2000).
- [75] E. Brundermann, A. M. Linhart, R. L. Reichertz, H. P. Roeser, O. D. Dubon, W. L. Hansen, G. Simain, E. E. Haller, *Double acceptor doped Ge: A new medium for inter-valence-band lasers*, Appl. Phys. Lett. **68**, 3075 (1996).
- [76] J. N. Hovenier, R. M. de Klein, T. O. Klaassen, and W. Th. Wenckebach, D. R. Chamberlain, E. Brundermann, and E. E. Haller, *Mode locked operation of the copper-doped germanium terahertz laser*, Appl. Phys. Lett. **77**, 3155 (2000).
- [77] C. Erginsoy, *Neutral impurity scattering in semiconductors*, Phys.Rev. **79**, 1013 (1950).
- [78] *Субмиллиметровые лазеры на горячих дырках в полупроводниках*, под ред. Андропова, ИПФ АН СССР, Горький, 1986.

- [79] W. Heiss, K. Unterrainer, E. Gornik, W. L. Honsen, E. E. Haller, *Influence of impurity absorption on germanium hot hole laser*, Semicond. Sci. Technol. **7**, 638 (1994).
- [80] A. Dargys, S. Zurauskas, and N. Zurauskiene, *Lifetime of excited states of a phosphorous atom in silicon single crystal*, Lietuvos fizikos zurnalas **34**, 483, (1994).
- [81] Ya. E. Pokrovskii, O. I. Smirnova, N. A. Khvalkovskii, *Longliving excited states of impurities in Si*, Solid State Commun. **93**, 405 (1995).
- [82] T. G. Castner, *Raman spin-lattice relaxation of shallow donors in silicon*, Phys. Rev. **130**, 58 (1963)
- [83] A. Griffin, P. Karruthers, *Thermal conductivity of solids IV: Resonance fluorescence scattering of phonons by donor electrons in germanium*, Phys. Rev. **131**, 1976 (1963).
- [84] C. Iacoboni and L. Reggiani, *The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with application to covalent materials*, Rev. Of Modern Phys. **55**, 645 (1983).
- [85] A. Dargys, J. Kundrotas *Handbook on physical properties of Ge, Si, GaAs and InP*, Science and Encyclopedia Publishers, Vilnius, 1994.
- [86] R. Barrie and K. Nishikawa, *Phonon broadening of impurity spectral lines*, Can. J. Phys. **41**, 1135; 1823 (1963).
- [87] М. Аше, О. Г. Сарбей, *О роли междолинного рассеяния в рекомбинации электронов в кремнии* Письма в ЖЭТФ, **28**, 625 (1978).
- [88] E. M. Gershenson, A. P. Melnikov and R. I. Rabinovich, *H<sup>-</sup>-like impurity centers, Molecular complexes and electron delocalization in semiconductors*, Electron-electron interactions in disordered systems, ed. by A.L. Efros and M. Pollak, Elsevier, 1985.
- [89] A. J. Mayur, M. Dean Sciacca, A. K. Ramdas, and S. Rodriguez, *Redetermination of the valley-orbit (chemical) splitting of 1s ground state of group-V donors in silicon*, Phys. Rev. B **48**, 10983 (1993).

- [90] K. Colbow, *Infrared absorption lines in boron doped silicon*, Can. J. of Phys. **41**, 1801 (1963).
- [91] P. Bruesch, *Phonons: Theory and experiment. Part II*, Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [92] Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва, 1972.

## Список работ автора

- [A1] А. В. Муравьев, С. Г. Павлов, Е. Е. Орлова, В. Н. Шастин, *Инверсия населенностей мелких акцепторных уровней в лазере на горячих дырках германия*, Тезисы докладов на I Российской конференции по физике полупроводников, Нижний Новгород, **2**, 272 (1993).
- [A2] V. N. Shastin, A. V. Muravjov, E. E. Orlova, S. G. Pavlov, *Far-infrared active medium on shallow acceptor states in semiconductors*, Proceedings of SPIE **2104**, 198 (1993).
- [A3] А. В. Муравьев, С. Г. Павлов, Е. Е. Орлова, В. Н. Шастин, *Эффекты мелких акцепторов в лазере на горячих дырках германия*, Письма в ЖЭТФ, **59(2)**, 86-91 (1994).
- [A4] А. В. Муравьев, С. Г. Павлов, Е. Е. Орлова, В. Н. Шастин, Б. А. Андреев, *Конденсация спектра вблизи линии примесного поглощения в лазере на горячих дырках германия*, Письма в ЖЭТФ, **61(3)**, 182-186 (1995).
- [A5] Е. Е. Орлова, *A far infrared active medium based on shallow acceptor states in semiconductors*, Conf. Digest of European Conference for PhD students in Physical Sciences PeH'94, Montpellier, France, SC18, (1994).
- [A6] Е. Е. Орлова, V. N. Shastin, *Inverse Population of Shallow Donor Excited States in Silicon Under Optical Pumping*, Conf. Digest of European Conference for PhD students in Physical Sciences PeH'95, Nice, France, SN9/P (1995).

- [A7] V. N. Shastin, E. E. Orlova, A. V. Muravjov, S. G. Pavlov, R. H. Zhukavin, *Influence of shallow acceptor states on the operation of the FIR hot hole p-Ge laser*, Infrared and Millimeter Waves, **17**, 359-363 (1996).
- [A8] E. E. Orlova, V. N. Shastin, *Inverse population of bismuth donor excited states and FIR amplification in silicon under the optical pumping*, Conference Proceedings of the 21st International Conference on Infrared and Millimeter Waves, July 14-19, Berlin, Germany, CTh4, (1996).
- [A9] V. N. Shastin, R. Kh. Zhukavin, A. V. Muravjov, E. E. Orlova, S. G. Pavlov, V. Ya. Aleshkin, N. A. Bekin, B. N. Zvonkov, *Far-infrared hole absorption in  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  MQW heterostructures with  $\delta$ -doped barriers*, Physica Status Solidi (b) **204**, 174-177 (1997).
- [A10] Е. Е. Орлова, *Неравновесная заселенность возбужденных примесных состояний в полупроводниках и возможности получения инверсии населенностей и усиления FIR излучения*, Тезисы докладов II Нижегородской сессии молодых ученых, 21-25 апреля, Нижний Новгород, 39, (1997).
- [A11] В. Н. Шастин, Р. Х. Жукавин, А. В. Муравьев, С. Г. Павлов, Е. Е. Орлова, В. Я. Алешкин, Н. А. Бекин, Б. Н. Звонков, О. А. Кузнецов, *Длинноволновое ИК поглощение на межподзонных  $Ge/Ge_{1-x}Si_x$  и примесно-зонных  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  переходах дырок в гетероструктурах при латеральном разогреве*, Тезисы докладов 3 Российской конференции по физике полупроводников, Москва, декабрь 1997, 265 (1997).
- [A12] E. E. Orlova, R. Kh. Zhukavin, S. G. Pavlov, V. N. Shastin, *Far infrared active media based on the shallow impurity states transitions in silicon*, Physica Status Solidi (b), **210**, 859-863 (1998).
- [A13] V. N. Shastin, V. Ya. Aleshkin, N. Bekin, R. Zhukavin, B. N. Zvonkov, O. A. Kuznetsov, I. G. Malkina, A. V. Muravjov, E. E. Orlova, S. G. Pavlov, A. Sitdikov, E. A. Uskova, *Far infrared phenomena in p-type MQW heterostructures under lateral electric field*, Proceedings of the 6 Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology" St. Petersburg, Russia, June 1998, 152-153 (1998).

- [A14] H. W. Huebers, K. Auen, S. G. Pavlov, E. E. Orlova, R. Kh. Zhukavin and V. N. Shastin, *Population inversion and far-infrared emission from optically pumped silicon*, Applied Physics Letters, **74(18)**, 2655-2657 (1999).
- [A15] V. N. Shastin, R. Kh. Zhukavin, A. V. Muravjov, E. E. Orlova, S. G. Pavlov, *THz oscillators based on intraband transitions in bulk semiconductors*, Proceedings of SPIE **3828**, 40-51 (1999).
- [A16] H.-W. Huebers, K. Auen, S. G. Pavlov, E. E. Orlova, R. Kh. Zhukavin, V. N. Shastin, *Investigations of phosphorus doped silicon as a possible far-infrared laser material*, Proceedings of SPIE **3828**, 52-57 (1999).
- [A17] В. Н. Шастин, Р. Х. Жукавин, Е. Е. Орлова, С. Г. Павлов, *Инверсная заселенность состояний мелких примесных центров в гетероструктурах с квантовыми ямами*, Известия Академии наук, сер. физич. **64(2)**, 245-248 (2000).
- [A18] S. G. Pavlov, R. Kh. Zhukavin, E. E. Orlova, V. N. Shastin, A. V. Kirsanov, H.-W. Huebers, K. Auen, H. Riemann, *Stimulated emission from donor transitions in silicon*, Phys.Rev.Lett. **84**, 5220-5223 (2000).
- [A19] В. Н. Шастин, Р. Х. Жукавин, Е. Е. Орлова, С. Г. Павлов, *Инверсия населенностей и усиление ТГц излучения при оптическом возбуждении кулоновских центров в гетероструктурах с квантовыми ямами*, Материалы совещания “Нанофотоника”, Н.Новгород, март 2000, 112-113 (2000).
- [A20] Е. Е. Орлова, Д. И. Кулагин, *Времена жизни квазистационарных состояний кулоновских центров в гетероструктурах с дельта-легированными барьерами*, Материалы совещания “Нанофотоника”, Н.Новгород, март 2000, 126-128 (2000).
- [A21] R. Kh. Zhukavin, S. G. Pavlov, E. E. Orlova, V. N. Shastin, *THz lasers based on optically pumped silicon*, Proceedings of International Terahertz Workshop 2000 (ITW2000), Sanbjerg Estate, Denmark, 17-19 September 2000, p.40. (2000).

- [A22] V. N. Shastin, R. Kh. Zhukavin, E. E. Orlova, S. G. Pavlov, A. V. Kirsanov, H.-W. Huebers, K. Auen, *Si based far-infrared lasers*, Proceedings of One day meeting on Si-based optoelectronics, University of Leeds, 18 April, 2000, p 7 (2000).
- [A23] H.-W. Huebers, K. Auen, M. Rummeli, V. N. Shastin, R. Kh. Zhukavin, E. E. Orlova, S. G. Pavlov, H. Riemann, *Population inversion and far-infrared emission from optically pumped silicon*, Proceedings of One day meeting on Si-based optoelectronics, University of Leeds, 18 April, 2000, p 3 (2000).
- [A24] K. Auen, H.-W. Hubers, A. V. Muravjov, E. E. Orlova, S. G. Pavlov, V. N. Shastin R. Kh. Zhukavin, *Influence of group II and III shallow acceptors on gain of p-Ge lasers*, Physica B **302-303**, 334-341 (2001).
- [A25] E. E. Orlova, S. G. Pavlov, R. Kh. Zhukavin, V. N. Shastin, A. V. Kirsanov, H.-W. Huebers, K. Auen, M. Rummeli, H. P. Roeser, and H. Riemann, *FIR Lasing Based on Group V Donor Transitions in Silicon*, Physica B **302-303**, 342-348 (2001).
- [A26] S. G. Pavlov, H. W. Hubers, M. H. Rummeli, V. N. Shastin, R. Kh. Zhukavin, E. E. Orlova, J. N. Hovenier, T. O. Klaassen, H. Nakata, *The physics of optically pumped semiconductor bulk lasers for the 5-15 THz frequency range*, Proceedings of Sixth Annual Symposium of the IEEE/LEOS Benelux Chapter, Brussel, Belgium, 3 December, 2001, p. 49-52 (2001).
- [A27] R. Kh. Zhukavin, E. E. Orlova, V. N. Shastin, S. G. Pavlov, M. H. Rummeli, H.-W. Hubers, J. N. Hovenier, T. O. Klaassen, H. Riemann, A. F. G. van der Meer, *THz stimulated emission from impurities in semiconductors*, Programme of the Workshop on Physics of Condensed Matter, Veldhoven, Netherlands, 18-19 December, 2001, p. 126 (2001).
- [A28] H. W. Hubers, S. G. Pavlov, M. H. Rummeli, R. Kh. Zhukavin, E. E. Orlova, H. Riemann, V. N. Shastin, *Terahertz emission from silicon doped by shallow impurities*, Physica B **308-310**, 232-235 (2001).
- [A29] V. N. Shastin, R. Kh. Zhukavin, E. E. Orlova, S. G. Pavlov, M. H. Rummeli, H.-W. Hubers, J. N. Hovenier, T. O. Klaassen,

H. Riemann, I. V. Bradley, A. F. G. van der Meer, *Stimulated THz emission from group V donors in silicon under intracenter photoexcitation*, Appl. Phys. Lett. **80**, 3512 (2002).