

**Российская академия наук  
Институт физики микроструктур**

*На правах рукописи*

**Цыпленков Вениамин Владимирович**

**Релаксация рабочих состояний в лазере на внутри-  
центровых переходах доноров V группы в кремнии при  
излучении фононов**

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:  
д.ф.-м.н. В.Н. Шасти́н

Нижний Новгород 2010 г.

## Содержание:

<b>Введение</b>	4
<b>Глава 1. Теоретическая модель</b>	
1.1 Обзор литературы	10
1.2 Состояния мелких доноров в кремнии	21
1.3 Электрон-фононное взаимодействие и релаксация состояний мелких доноров в кремнии	25
1.3.1 Матричный элемент взаимодействия	25
1.3.2 Вероятности междолинной релаксации	29
<b>Глава 2. Релаксация возбужденных состояний доноров пятой группы в недеформированном кремнии при взаимодействии с фононами</b>	
2.1 Постановка задачи	36
2.2 Релаксация возбужденных состояний доноров V группы в кремнии	37
2.3 Сравнительные данные по темпам внутридолинной релаксации состояний мелких доноров и темпам междолинного рассеяния электронов проводимости в кремнии	43
<b>Глава 3. Релаксация доноров в одноосно деформированном кремнии</b>	
3.1 Состояния мелких доноров в условиях одноосного сжатия	47
3.2 Междолинная релаксация в Si:P	51
3.3 Междолинная релаксация в Si:As	54
3.4 Междолинная релаксация в Si:Sb	57
3.5 Междолинная релаксация в Si:Bi	59
<b>Глава 4. Сравнение с экспериментом</b>	
4.1 Pump-probe измерения в Si:P и Si:As.	64
4.2 Сравнение с данными спектральных измерений в натуральном и моноизотопном кремнии ( $^{28}\text{Si}$ )	67

4.3 Обсуждение данных измерений в деформированном кремнии	68
<b>Заключение</b>	85
<b>Цитируемая литература</b>	88
<b>Список публикаций автора</b>	94

## Введение

### Актуальность темы

Интерес к изучению физики мелких доноров в кремнии связан с возможностью развития полупроводниковых источников стимулированного терагерцового (ТГц) излучения (47-58 мкм). Такого рода источники могли бы использоваться в различных приложениях: спектроскопия газов, твердых тел, плазмы, мониторинг окружающей среды, радиоастрономия, создание новых средств контроля и обнаружения скрытых предметов, разработки методов диагностики в медицине.

Первые полупроводниковые лазеры длинноволнового ИК излучения работали на межзонных переходах в узкозонных материалах PbSnSe [1]. Такой подход позволил достичь длинноволновой границы  $\lambda \approx 40$  мкм. Первыми источниками на внутризонных переходах стали лазеры на горячих дырках в германии: НЕМАГ [2], лазер на циклотронном резонансе [10, 11] и лазер на межподзонных переходах горячих дырок германия [3, 4]. Эти источники позволили перекрыть диапазоны (700÷2000 мкм), (100÷400 мкм) и (70÷200 мкм) соответственно. Одним общим недостатком перечисленных лазеров является малая эффективность ( $\eta \sim 10^{-4}$ ), что затрудняет реализацию непрерывного режима генерации. Позже появилось сообщение о стимулированном излучении резонансных состояний акцепторов в одноосно деформированном германии при разогреве дырок электрическим полем [5]. Как утверждается, этот источник ИК излучения может работать в непрерывном режиме на длинах волн  $\sim 100$  мкм [5].

Самый большой резонанс получили успехи в развитии источников стимулированного излучения на переходах между состояниями размерного квантования в GaAs/AlGaAs и AlInAs/GaInAs гетероструктурах при вертикальном транспорте электронов [6, 7]. Квантово-каскадные лазеры позволили перекрыть диапазоны от 3÷ 24 мкм и 67÷ 200 мкм, но они не работают в диапазо-

не 30÷ 50 мкм из-за сильного решеточного поглощения в полосе остаточных лучей.

В кремнии и структурах на его основе такое поглощение мало и создание ТГц лазеров в таких средах считается перспективным [8, 9].

К настоящему времени эффект стимулированного ТГц излучения в кремнии получен, и он связан с внутрицентровыми переходами оптически возбуждаемых доноров V группы в кремнии. Лазерный эффект получен на  $2p_0-1s$  переходах в Si:P и Si:Sb и  $2p_0/2p_{\pm}-1s(E, T_2)$  переходах в Si:As и Si:Bi. Соответствующие частоты генерации недоступны для квантово-каскадных лазеров и лежат в диапазоне 47-59 мкм. В то же время такие источники находятся в стадии развития и их потенциал не реализован в полной мере. Последнее во многом объясняется отсутствием адекватного описания процессов формирующих неравновесные состояния и населенность рабочих состояний активной среды. Данная работа призвана хотя бы частично, устранить имеющиеся недостатки теоретического описания.

### **Цель работы**

Конкретной целью диссертационной работы является вычисление времен жизни состояний мелких доноров в кремнии, определяемых междолинными процессами электрон-фононного взаимодействия, в условиях низких температур; расчет темпов междолинных переходов в зависимости от деформации кристалла Si. Важной составляющей является интерпретация полученных данных по экспериментальному изучению стимулированного излучения доноров в кремнии.

### **Научная новизна результатов диссертационной работы**

- Получены сравнительные значения скоростей релаксации различных состояний доноров фосфора, сурьмы, мышьяка и висмута в кремнии при междолинном рассеянии на фононах  $f$  и  $g$  типа и показано, что рассеяние на аку-

стических  $f$ – фононах вносит существенный вклад в релаксацию примесных состояний.

- Исследована зависимость темпов междолинной релаксации для доноров V группы в кремнии от одноосной деформации кристалла.

- Показано, что наблюдаемое в эксперименте изменение характеристик излучения лазера на мелких донорах в кремнии (интенсивность, порог накачки, частота излучения) от одноосной деформации кристалла в значительной мере определяется зависимостью от этого параметра релаксации неравновесных состояний центров легирования на междолинных фононах.

### **Научная и практическая значимость работы**

Проведенные расчеты дают новое знание о неравновесных состояниях мелких доноров в кремнии и важны для понимания процессов лежащих в основе лазеров на внутрицентровых переходах доноров в кремнии.

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

1. Междолинное рассеяние с излучением TA- $f$ , TA-g, LA-f, LA-g, TO-f, LO-g фононов определяют распад нижних возбужденных состояний мелких доноров в кремнии при низких температурах.

2. Химический сдвиг  $1s$ -состояний доноров V группы в кремнии, связанный с потенциалом центральной ячейки, существенно влияет на время жизни состояния  $2p_0$  и определяет тип фононов, ответственных за распад отщепленной группы состояний  $1s(E, T_2)$ .

3. Одноосная деформация кристалла кремния существенно меняет как маршруты, так и времена релаксации возбужденных состояний доноров V группы в кремнии, при этом могут меняться фононы, доминирующие в релаксационном процессе.

4. Одноосная деформация кристалла кремния, приложенная в направлении (100), существенно влияет на времена жизни рабочих состояний лазера на внутрицентровых переходах мелких доноров в кремнии, и, как следствие,

при оптимальных деформациях может увеличить время жизни верхнего рабочего состояния и коэффициент усиления активной среды.

### **Вклад автора**

- Равнозначный вклад в выбор модели расчета темпов междолинных переходов между состояниями доноров в кремнии при взаимодействии с фонами (совместно с Демидовым Е.В.) [A1, A4, A5]

- Определяющий вклад в проведение расчетов темпов междолинной релаксации состояний мелких доноров [A4, A5]

- Равнозначный вклад в сопоставление результатов расчета с экспериментальными результатами (совместно с Жукавиным Р.Х.) [A2, A3, A6, A7]

### **Реализация результатов работы**

Полученные результаты применялись при интерпретации данных эксперимента и способствовали проведению уточняющих измерений при исследовании стимулированного излучения донорами в кремнии.

### **Апробация работы**

Материалы диссертационной работы обсуждались на семинарах ИФМ РАН, на радиофизических конференциях в ННГУ им. Лобачевского (2003 г.), на трех всероссийских молодежных конференциях по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике (С.-Петербург, 2003 г., 2005 г., 2006 г.), на всероссийском семинаре по терагерцовой оптике и спектроскопии в рамках конференции «Фундаментальные проблемы оптики» (С.-Петербург, 2008 г.). Они представлены в материалах симпозиумов по наноп физике и наноэлектронике (2006 г., 2008 г.), на Российской конференции по физике полупроводников (Новосибирск-Томск, 2009г), международной конференции TERA - MIR (Turkey, 3-6 November 2009г).

## **Публикации**

По теме диссертации опубликовано 26 печатных работ, в том числе 7 статей в рецензируемых журналах, а так же 7 публикаций в материалах международных и 11 в материалах российских конференций.

## **Объем и структура диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Общий объем составляет 98 страниц, включая 33 рисунка и 7 таблиц. Список цитированной литературы содержит 54 наименования, список публикаций автора по теме диссертации – 26 наименований.

## **Содержание работы**

**Во введении** показана проблематика и обоснована актуальность проблемы исследования.

**В первой главе** представлена обзорная часть работы, цель которой – позиционирование проблемы исследования в настоящей работе относительно других исследований в мире, касающихся мелких примесей и электрон-фононного взаимодействия в кремнии. Далее описана теоретическая модель, в рамках которой проведены все расчеты. А именно описан подход к описанию состояний мелких доноров в кремнии, а так же взаимодействия связанных потенциалом примеси электронов с фононами.

**Вторая глава** посвящена представлению результатов расчета темпов низкотемпературной междолинной релаксации возбужденных состояний доноров V группы в недеформированном кремнии. Рассматриваются состояния рабочего перехода при генерации стимулированного ТГц излучения, а так же состояния, времена жизни которых необходимо знать для описания динамики населенностей рабочих состояний при возбуждении донорных центров.

**В третьей главе** рассматривается релаксация состояний мелких доноров (P, Bi, Sb, As) в кремнии при взаимодействии с различными типами фо-



нонов в зависимости от одноосной деформации сжатия кристалла в направлении (100).

**Четвертая глава** посвящена сопоставлению результатов расчета с различными экспериментальными данными:

-сравнение с Pump-probe измерениями времен жизни возбужденных состояний доноров фосфора и мышьяка в кремнии;

- сравнение с данными спектральных измерений ширины линии поглощения на переходе в состояние  $2p_0$  донора фосфора в натуральном и моноизотопном кремнии ( $\text{Si}^{28}$ )

- сравнение с измерениями характеристик стимулированного излучения (интенсивность излучения, порог накачки) в зависимости от приложенного к образцу давления в кристаллографическом направлении (100). На основе вычисленных темпов перехода между различными состояниями донора при взаимодействии с различными фононными модами в рамках упрощенной системы балансных уравнений рассчитывалась инверсия населенностей на рабочем переходе при различных значениях приложенного давления. Полученная зависимость сопоставлялась с экспериментальными данными.

**Заключение** содержит основные результаты диссертационной работы.

# ГЛАВА I. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

## 1.1 Обзор литературы

Рассматриваемые в данной работе доноры фосфора (P), висмута (Bi), мышьяка (As) и сурьмы (Sb) в кремнии являются примесями замещения. По сравнению с ядром Si они имеют один дополнительный электрон. Притягивающий потенциал между этим избыточным валентным электроном и ядром мелкого примесного центра меньше, чем в изолированном атоме, т.к. в кристалле кремния кулоновский потенциал ядра примесного центра экранируется не только электронами остова донора, но и остальными четырьмя валентными электронами кремния. Этот эффект экранирования позволяет приближенно представить притягивающий потенциал, действующий на дополнительный валентный электрон примеси, как кулоновский потенциал протона, экранированный валентными электронами кремния. Таким образом, мелкий донорный центр в кремнии ведет себя подобно атому водорода, помещенному в решетку кремния, за тем исключением, что масса ядра примесного центра настолько больше массы протона, что ее можно считать бесконечной [10].

Для описания структуры примесного центра можно воспользоваться методом эффективных масс [11] (*Kohn W., Luttinger J.M.*). В этом приближении используются известные параметры зонной структуры, такие как эффективные массы идеального кристалла. В работе [11] потенциал примесного иона считают кулоновским. Однако уравнение для нахождения волновых функций в случае произвольных значений эффективных масс на дне зоны проводимости полупроводника аналитически не решается точно, поэтому в [11] используют пробные волновые функции с подгоночными параметрами, значения которых находятся методом минимизации энергии состояния донора. Такая процедура для возбужденных донорных состояний в кремнии дает хорошее согласие между рассчитанными энергиями данных состояний и значениями энергий, взятыми из эксперимента. Для основного же состояния

$1s(A_1)$  данный метод дает большую ошибку в определении энергии. Вызвано это тем, что на самом деле потенциал, связанный с наличием примесного иона в кристалле, не является кулоновским. Помимо кулоновской части примесного потенциала, плавно зависящей от координат ( $\sim \frac{1}{r}$ ), существует также, так называемый, потенциал центральной ячейки, который быстро меняется с изменением координат и зависит от химической природы элемента легирования.

Существуют попытки учета эффекта центральной ячейки [12] (*Pantelides S.T.*). Метод дельта - потенциала (см. например [13]), 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 волновой функции на меньших расстояниях от центра выходит за рамки метода эффективных масс. До настоящего момента эта задача не решена.

Среди первых работ, в которых рассматривалась теория взаимодействия донорных электронов с фононами, были работы [14] (*Lax u Burstein*), [15] (*Barrie u Nishikawa*), посвященные исследованию уширения примесных линий за счет взаимодействия с фононами. Lax и Burstein рассматривали ширину линии поглощения в кремнии  $p$  и  $n$ -типа на переходах между связанными состояниями электронов и дырок, обусловленную взаимодействием с длинноволновыми акустическими фононами. Считалось, что состояния имеют водородоподобный характер. Для описания взаимодействия электронов и дырок с колебаниями решетки использовалось представление о деформационном потенциале [16] (*Bardeen u Shockley*), величина которого определялась на основе экспериментально измеряемой подвижности носителей заряда. Так как деформационный потенциал, в рамках которого построена теоретическая модель, описывающая взаимодействие примесных электронов с фононами,

является изотропным, то взаимодействие возможно лишь с продольными акустическими фононами. Но поскольку деформационный потенциал вычислялся на основе экспериментально измеренной подвижности зарядов, то взаимодействие с поперечными фононами пусть и довольно грубо, но тоже неявно учитывалось.

В работе Barrie и Nishikawa [15] так же рассматривается теория фононного уширения спектральных линий мелких примесных центров в кремнии, но с модификацией водородной модели описания состояния примесей и метода деформационного потенциала. В отличие от Bardeen и Shockley [16] в работе Barrie и Nishikawa была учтена анизотропия и многодолинность кристалла: в качестве огибающих волновых функций состояний доноров подобно работе [11] (*Кон и Латинджер*) были использованы пробные анизотропные волновые функции с вариационными параметрами, задающими локализацию волновой функции в пространстве. Для описания электрон-фононного взаимодействия был использован метод деформационного потенциала для многодолинных полупроводников [17] (*Herring u Vogt, 1956*). Было произведено сравнение теоретических ширин линий для доноров фосфора и мышьяка и акцепторов бора в кремнии с их экспериментальными значениями. В целом они получили адекватное совпадение эксперимента и теории. При низких температурах (4,2 К) более широкие линии в эксперименте по сравнению с их расчетными значениями, как они считали, имеют чисто инструментальную причину. При более высоких температурах (около 60 К), по мнению авторов, включаются так же дополнительные механизмы уширения примесных линий, такие как, например, Штарковское уширение, вызванное электрическим полем ионизованных примесных центров.

Для раскрытия темы большое значение имеет работа [18] (*Wilson u Feher*), в которой исследуются возбужденные состояния доноров фосфора, мышьяка и сурьмы в кремнии в условиях одноосного сжатия образца и анализируется при этом изменения спектра электронного спинового резонанса. В данной работе, используя теорию донорных состояний в кремнии *Кона и*

Латинжера [11] и теорию деформационного потенциала для многодолинных полупроводников [17] (*Herring u Vogt*), найдены теоретические зависимости от одноосной деформации сжатия энергий примесных состояний и распределений данных состояний по долинам зоны проводимости кремния. Полученные в данной работе результаты были использованы в настоящей диссертации.

Следует уделить внимание работе [19] (*Theodore G. Castner*), которая посвящена экспериментальному измерению и теоретическим вычислениям времени Рамановской двух фононной спин-решеточной релаксации для мелких доноров в кремнии. В ней затрагивается теория релаксации состояний доноров с излучением фононов, и большое внимание уделено взаимодействию с междолинными фононами. Правда, рассматривались лишь переходы между противоположащими долинами зоны проводимости кремния, т.е.  $g$ -переходы, влияние же  $f$ -переходов (между смежными долинными) на релаксацию примесных состояний не рассматривалось. Для описания междолинных процессов излучения фононов при релаксации состояний мелких доноров так же используется теория деформационного потенциала для многодолинных полупроводников [17] (*Herring u Vogt*). Деформационный потенциал имеет смысл энергетического сдвига электронной зоны при макроскопической статической деформации полупроводникового кристалла, и, если применять его для описания процессов взаимодействия электронов с фононами, то наиболее адекватно он должен описывать лишь взаимодействие с длинноволновыми фононами, когда длина волны фонона на много превышает постоянную решетки полупроводника, чтобы деформация решетки в процессе распространения фононной волны локально была похожа на макроскопическую деформацию. Междолинные же фононы имеют малую длину волны (сравнимую с постоянной решетки полупроводника), поэтому, строго говоря, метод деформационного потенциала для описания взаимодействия электронов с междолинными фононами не подходит. Но расчеты в работе [19] были выполнены в рамках предположения, что константы деформационного по-

тенциала не зависят от волнового вектора фонона, и метод деформационного потенциала применен для описания релаксации состояний доноров с излучением междолинных  $g$ -фононов. Было показано, что для доноров мышьяка и висмута в кремнии междолинный процесс релаксации возбужденных  $1s$ -состояний превалирует над внутримолинными процессами взаимодействия донорных электронов с фононами, в то время как для доноров фосфора, согласно полученным результатам, скорости междолинных и внутримолинных процессов сравнимы.

Интересными являются работы [20] (*Harris u Prohofsky*), [21] (*Rodriguez u Schultz*), в которых независимо друг от друга теоретически исследовано уширение примесных линий в условиях сильного резонансного взаимодействия электронов примеси с колебаниями решетки. В обеих работах использовалась двухуровневая модель электронных связанных состояний, находящихся в условиях сильной связи с модами колебаний кристаллической решетки. Ярким примером такой системы является донор висмута в кремнии, в котором переход  $2p_0-1s(A_1)$  находится в резонансе с междолинными  $TO-f$  фононами. В качестве огибающих волновых функций состояний примеси в этих работах используются пробные волновые функции Кона и Латинжера [11]. Для описания электрон-фононного взаимодействия они применяют самые общие представления о структуре оператора электрон-фононного взаимодействия, т.к. они не интересуются точными значениями времен релаксации, а лишь формой примесных линий поглощения оптического излучения, для чего нужно знать только зависимость матричного элемента взаимодействия от частоты фонона с точностью до постоянных множителей. Они показали, что электрон-фононное взаимодействие может приводить к возникновению далеко не тривиальных форм линий оптического поглощения на переходах между состояниями примеси.

Взаимодействие электронов с междолинными фононами всегда является короткодействующим и в первом приближении не зависит от волнового вектора фонона. Вероятность междолинного перехода между двумя состоя-

ниями электрона проводимости с импульсами  $k$  и  $k'$  в этом случае дается следующим выражением [22] (*C. Jacoboni, L. Reggiani*):

$$P(k', k) = \frac{\pi(D_l k)^2}{\rho V \omega_q} \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}) - \hbar \omega_q) \quad (\text{I.1})$$

где  $E(\mathbf{k}')$  и  $E(\mathbf{k})$  – энергии конечного и начального состояний электрона,  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  – начальный и конечный импульс,  $\omega_q$  – частота излучаемого (поглощаемого) фонона,  $\rho$  – плотность материала,  $V$  – его объем. Константа  $D_l k$  называется междолинным деформационным потенциалом, которая в отличие от случая взаимодействия с длинноволновыми фононами имеет размерность энергии, деленной на расстояние. Междолинное рассеяние оказывает большое влияние на подвижность электронов в непрямозонных полупроводниках, подобных Si, поэтому значения данных потенциалов обычно определяют на основе подгонки результатов моделирования транспортных свойств полупроводника под результаты эксперимента [10]. Но в рассеянии электронов участвуют несколько различных фононных мод, что затрудняет определение значений междолинных деформационных потенциалов, поэтому соответствующие значения в разных работах отличаются. Однако справедливости ради следует сказать, что формально в этом приближении, т.е. когда деформационные потенциалы взаимодействия не зависят от волнового вектора фонона (нулевой порядок по  $q$ ), далеко не все междолинные переходы разрешены. Междолинные переходы при взаимодействии со многими фононными модами оказываются запрещенными симметрией. Как показано в работах [23, 24] (*M. Lax, J.J. Hopfield*), в нулевом порядке разложения междолинного деформационного потенциала по волновому вектору фонона  $f$ -переходы в кремнии возможны только при взаимодействии с LA и TO фононами,  $g$ -переходы – только с LO-фононами. Однако существуют эксперименты, в которых видно, что взаимодействие электронов с остальными типами фононов все же присутствует. В частности, это измерения магнитофононного резонанса, который происходит, когда разница энергий между уровнями Ландау кратно энергии фонона [25]. Это связано с тем, что полный запрет переходов имеет место толь-

ко тогда, когда переход происходит между точками зоны Бриллюэна, лежащими на осях, направленных точно вдоль определенных кристаллографических направлений, что никогда не выполняется в реальных условиях. Более того, связанные с симметрией запреты междолинных переходов в нулевом приближении часто игнорируются, и при вычислениях междолинных деформационных потенциалов считают, что они не зависят от волнового вектора фонона (см. например [22]). В этом случае вычисляемые величины на самом деле являются лишь неким средним значением истинных деформационных потенциалов, но такой подход приводит в итоге к хорошему согласию теории с экспериментом.

Используются и другие подходы для описания запрещенных в нулевом приближении переходов. В работе *D.K. Ferry* [26] рассматривается взаимодействие с междолинными фононами в первом порядке разложения матричного элемента электрон-фононного взаимодействия по волновому вектору фонона. В этом случае деформационный потенциал имеет размерность энергии, как и в случае взаимодействия с длинноволновыми фононами.

Существует много работ, посвященных теоретическому описанию транспортных свойств кремния, которые, как отмечено выше, в сильной степени определяются характером междолинных процессов электрон-фононного взаимодействия. В данных работах производится вычисление констант связи электронов с междолинными фононами – междолинных деформационных потенциалов, полученные значения которых в различных работах отличаются довольно сильно. Перечислим некоторые из этих работ. Во-первых, это работа [27] (*Canali и др.*), в которой экспериментально измеряется дрейфовая скорость электронов в кремнии в электрическом поле, направленном вдоль различных кристаллографических направлений, и при различных температурах. Данные эксперимента сравнивались с результатами моделирования транспортных свойств кремния методом Монте-Карло. В теоретическую модель было заложено рассеяние электронов ионизованными примесными центрами и рассеяние при взаимодействии с фононами. Расчеты



проводились в приближении изотропной параболической зоны проводимости кремния. При рассмотрении внутривалинных процессов релаксации электронов считалось, что закон дисперсии акустических фононов изотропен. Кроме того, не делалось различия между поперечными и продольными фононами. Взаимодействие с ними описывалось посредством одной общей константы связи электрон-фононного взаимодействия, которая впоследствии подбиралась такой, чтобы результаты моделирования совпадали с результатами эксперимента. Описание междолинных процессов релаксации строилось в рамках обычного феноменологического подхода с использованием междолинных деформационных потенциалов, которые так же находились путем подгонки результатов моделирования под транспортные измерения. Было учтено взаимодействие с TA- $f$ , LA/LO- $f$ , TO- $f$ , TA- $g$ , LA- $g$  и LO- $g$  фононами.

Следующая работа, о которой хотелось бы упомянуть, это работа [28] (*Joergensen, 1978*), в которой исследуется электрон-фононное взаимодействие и транспорт в сильном электрическом поле в кремнии  $n$ -типа, используя кинетическое уравнение Больцмана. Бралась аналитическая, но с учетом непараболичности и анизотропии, структура зоны проводимости кремния. Внутривалинные процессы рассеяние электронов на акустических фононах описывались, используя известные константы деформационного потенциала кремния. Междолинные процессы релаксации рассматривались с участием TO- $f$ , LA/LO- $f$ , LO- $g$  и TA- $g$  фононов. Константы междолинных деформационных потенциалов вычислялись так же на основе подгонки расчетов под экспериментальные результаты.

Важным является результат, полученный в работе [29] (*Brunetti и др.*), посвященной теоретическому и экспериментальному исследованию диффузии электронов в кремнии как функции температуры, напряженности и направления электрического поля. В теоретической части используется моделирование Монте-Карло в рамках такой же модели, какая использовалась в работе *Canali и др.* [27], но благодаря новым экспериментальным результа-

там, появилась возможность более точного определения констант связи электронов с междолинными фононами. Взаимодействие рассматривается с участием TA-*f*, TO-*f*, LA/LO-*f*, LO-*g*, LA-*g* и TA-*g* фононов

Совсем недавней работой, в которой так же производится расчет констант связи электронов с междолинными фононами, является работа [30] (E. Pop, W. Dutton и K. Goodson). В ней тоже производится моделирование транспортных свойств кремния методом Монте-Карло. Используется модель непараболической зоны проводимости. Рассеяние электронов на колебаниях кристаллической решетки описывается с использованием аналитического изотропного закона дисперсии фононов, в котором учтено различие между акустическими/оптическими и продольными/поперечными фононными ветками. В модель так же включено взаимодействие со всеми типами междолинных фононов: TA-*f*, TO-*f*, LA/LO-*f*, LO-*g*, LA-*g* и TA-*g*.

Подытоживая результаты упомянутых работ, приведем значения рассчитанных в них междолинных деформационных потенциалов в виде таблицы (1).

Таблица 1. Значения междолинных деформационных потенциалов для различных типов фононов. Жирным шрифтом выделены значения, использованные в настоящей работе.

Тип фонона	Canali et all	Jorgensen	Brunetti et all	E. Pop et all
	[18]	[19]	[20]	[21]
	Значения междолинных деформационных потенциалов ( $10^8$ эВ/см)			
TA- <i>f</i>	0.15	-	<b>0.3</b>	0.5
LA/LO- <i>f</i>	3.4	4.3	<b>2</b>	3.5
TO- <i>f</i>	4	2	<b>2</b>	1.5
TA- <i>g</i>	0.5	0.65	<b>0.5</b>	0.3
LA- <i>g</i>	0.8	-	<b>0.8</b>	1.5
LO- <i>g</i>	3	7.5	<b>11</b>	6

Возвращаясь опять к разговору о разрешенных и запрещенных в нулевом порядке междолинных переходов с излучением фононов, следует обсудить совсем новую работу В.Г. Тютерева и др. (2010 г.) [31]. Предмет иссле-

дования в данной работе пересекается с тематикой настоящей диссертации и состоит в вычислении времени жизни состояния  $2p_0$  донора фосфора в кремнии. Рассматривается релаксация данного состояния при взаимодействии с междолинными TA- $f$  и LA- $g$  фононами. Оба эти процесса в нулевом приближении запрещены симметрией. Однако авторы работы не пользуются никакими известными данными по поводу деформационных потенциалов взаимодействия с рассматриваемыми фононами, а вычисляют их «из первых принципов». Они используют самосогласованный псевдопотенциальный расчет методом функционала плотности в базисе плоских волн возмущения, создаваемого фононом с произвольным значением волнового вектора (DFPT). Результаты их расчета деформационных потенциалов для TA- $f$  и LA- $g$  фононов представлены на следующем рисунке (1):

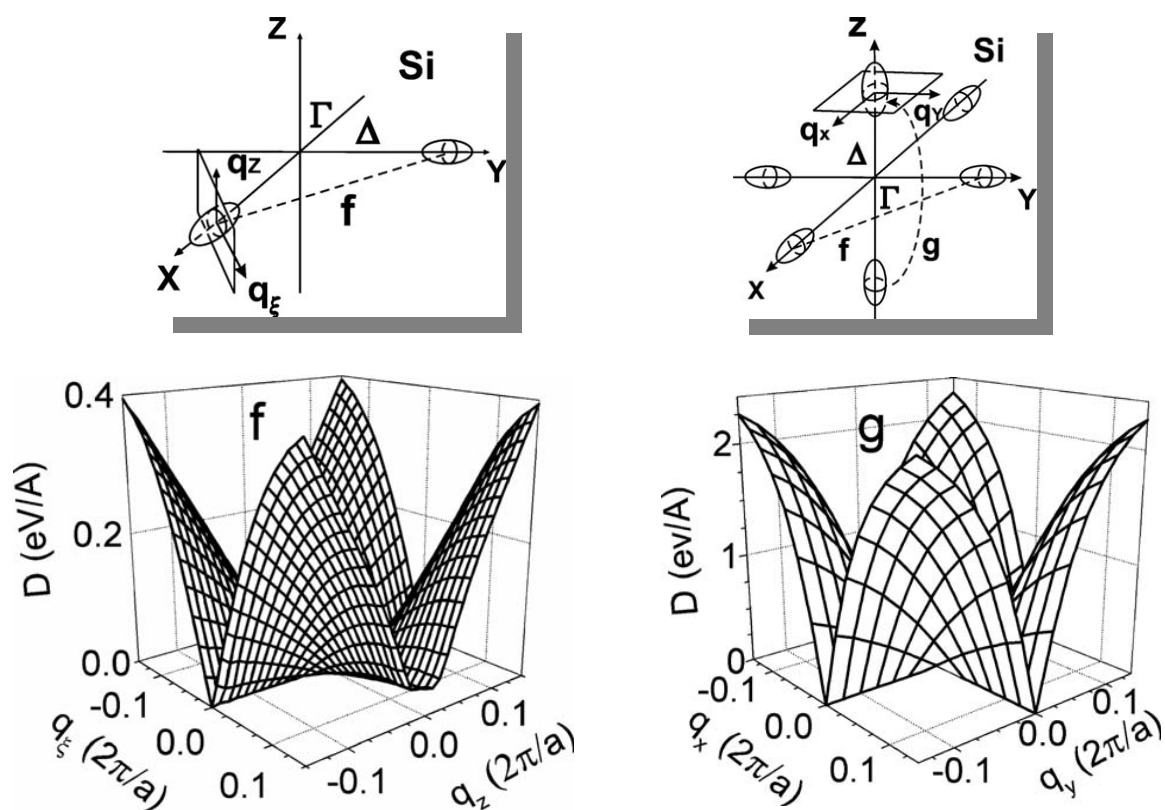


Рис. 1 Зависимость междолинных деформационных потенциалов согласно [22] для TA- $f$  и LA- $g$  фононов от волнового вектора фонона.

Нулевые значения деформационных потенциалов вдоль определенных направлений в пространстве волновых векторов фононов отражают симмет-

рийный запрет междолинных переходов с излучением фононов данного типа в нулевом приближении. Для незапрещенных переходов междолинные деформационные потенциалы имеют следующие значения:  $D_{LA-f} = 2,51 \cdot 10^8$  эВ/см,  $D_{LO-g} = 4,73 \cdot 10^8$  эВ/см,  $D_{TO-f} = 4,44 \cdot 10^8$  эВ/см.

Конечно, нет сомнений в строгости подхода к вычислениям и важности полученного авторами результата, однако расчеты проведены в предположении идеальности решетки, хотя само по себе наличие примеси уже нарушает эту идеальность. Решетка кремния в окрестности атома примеси нарушена, и локально она не обладает симметрией идеального кристалла, следовательно, для нее не могут строго выполняться симметричные запреты, о которых идет речь. Нарушение симметрии приведет к тому, что зависимости [на рис. 1](#) будут более гладкими, и, разумеется, не будут нигде обращаться в ноль. Это косвенно подтверждается тем, что вычисленное в рассматриваемой работе время жизни состояния  $2p_0$  донора фосфора в кремнии оказывается аномально большим ( $\sim 1$  нс). Соответствующая этому времени ширина линии оптического поглощения на переходе из основного в состояние  $2p_0$  оказывается приблизительно в десять раз уже экспериментально измеренной ширины в моноизотопном кремнии ( $^{28}\text{Si}$ ) при низкой концентрации доноров, где не должно быть столь сильного неоднородного уширения.

Сказанное позволяет допустить, что междолинные деформационные потенциалы на масштабах локализации волновых функций донора в обратном пространстве приближенно можно считать константами даже для «запрещенных» в нулевом приближении междолинных переходов. Поэтому в настоящей работе использовались значения констант, данные в работах [22, 29] (*Риджани /Brunetti и др.*), которые хорошо описывают транспортные явления в объемном кремнии.

В качестве огибающих волновых функций примесных состояний использовались пробные волновые функции, указанные в работах [11, 32], с тем отличием, что по-другому будем выбирать параметры, задающие локализацию волновой функции в пространстве, для  $1s$ -состояний. Как было отме-

чено выше, примесный потенциал помимо кулоновской части имеет быстроспадающую составляющую, называемую потенциалом центральной ячейки, и на сегодняшний день нет методов, корректно учитывающих этот потенциал. Поэтому в данной работе используется упрощенный подход учета влияния потенциала центральной ячейки лишь через локализацию волновой функции в пространстве. Подробнее это будет описано ниже.

Следует отметить, что для состояний донора фосфора в недеформированном кремнии расчеты скоростей междолинной релаксации с излучением фононов уже проводились ранее с использованием того же общего подхода для описания взаимодействия связанных состояний с междолинными фононами, какой используется в настоящей диссертации [33]. В данной работе были использованы водородоподобные волновые функции состояний донора, и при расчете их темпов междолинной релаксации учитывалось взаимодействие лишь с  $g$ -фононами (считалось, что  $f$ -процессы взаимодействия электронов с акустическими фононами не оказывают существенного влияния на общий темп релаксации состояний доноров).

## 1.2 Состояния мелких доноров в кремнии

Волновые функции состояний мелкого донорного центра в кремнии рассматривались в рамках метода эффективных масс. Этот метод подробно представлен в работе [11] (*Кона и Латинжера*). Согласно этому методу волновые функции состояний донора в случае нескольких долин представляются в виде:

$$\Psi_i = \sum_i \alpha_i F_n^i(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (1.2)$$

где  $\varphi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  – блоховская волновая функция на дне зоны проводимости  $i$ -ой долины,  $F_n^i(\mathbf{r})$  – огибающая волновой функции донорного состояния  $n$ -го уровня  $i$ -ой долины, а  $\alpha_i$  – коэффициенты, определяющиеся из соображений симметрии для точечной группы тетраэдра  $T_d$  и отражающие распределение волновой функции по долинам в  $k$ -пространстве. Суммирование ведется по

всем шести долинам кремния. Коэффициенты  $\alpha_i$  имеют следующие значения (см. например [34] (Г.Л. Бир и Г.Е. Пикус):

$(A_1)$ (синглет)	$\frac{1}{\sqrt{6}}(1,1,1,1,1,1)$	$(T_2)$ (триплет)	$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1,0,0,0,0) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(0,0,1,-1,0,0) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(0,0,0,0,1,-1) \end{cases} \quad (I.3)$
$(E)$ (дублет)	$\begin{cases} \frac{1}{2}(1,1,-1,-1,0,0) \\ \frac{1}{\sqrt{12}}(1,1,1,-2,-2) \end{cases}$		

Гамильтониан, для нахождения огибающих волновых функций состояний мелких доноров  $F_n^i(\mathbf{r})$  (далее эти огибающие для краткости будем называть просто волновыми функциями), в рамках метода эффективных масс записывается в виде [11]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{||}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U(r) \quad (I.4)$$

здесь  $m_{||}$  и  $m_{\perp}$  – продольная и поперечная эффективные массы электрона в кремнии,  $U(r)$  – потенциал примесного иона. В работе Кона и Латинжера [11] потенциал примесного иона считался кулоновским. При произвольном отношении эффективных масс уравнение Шредингера с гамильтонианом (1) не может быть решено точно, поэтому в работе [11] предлагается использовать пробные волновые функции со свободными параметрами, которые должны находиться вариационным методом минимизации энергии состояний донора. Вид этих пробных волновых функций для всех состояний  $1s$  и состояния  $2p_0$  можно взять в той же работе *Кона и Латинжера* [11], волновые функции для состояний  $2s$  и  $2p_{\pm}$  были взяты из [15, 32].

$$\begin{aligned}
F_{1s}^l(r) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^2 b}} \exp\left\{-\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}\right\}, \\
F_{2p_0}^l(r) &= \frac{x_l}{\sqrt{32\pi a^2 b^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}\right\} \\
F_{2p_{\pm}}^l(r) &= \frac{z_l + iy_l}{\sqrt{64\pi a^4 b^3}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}\right\} \quad (I.5) \\
F_{2s}^l(r) &= \frac{2 - \sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}}{\sqrt{32\pi a^2 b}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}\right\}
\end{aligned}$$

Ось  $x_l$  сонаправлена с осью  $l$ -ой долины. Варьируемые параметры  $a$  и  $b$  находятся минимизацией энергии состояний из гамильтониана (4), где в качестве  $U(r)$ , берется кулоновский потенциал. Заметим, что вариационный подход для  $m_{||} = m_{\perp}$  дает точное решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (4), а для реальных значений масс хорошо согласуется с численным подходом в решении [11]. Однако, как известно, выражение (4) с кулоновским потенциалом примеси является не точным, так как не учитывает короткодействующий потенциал, который зависит от химической природы центра легирования. Без соответствующих поправок данный гамильтониан приводит к шестикратному вырождению основного состояния  $1s$  с энергией  $31.27$  мэВ. Реально же это состояние расщеплено на синглет  $1s(A_1)$ , дублет  $1s(E)$  и триплет  $1s(T_2)$  (см. например [11, 34]), их энергии зависят от химической природы примеси и заметно отличаются от значения приведенного выше. Если для состояний  $1s(E)$  и  $1s(T_2)$  расхождение не превышает восьми процентов, то для основного состояния  $1s(A_1)$  оно может превышать все сто. Для примера энергия связи состояния  $1s(A_1)$  для донора фосфора  $45.2$  мэВ, а для висмута  $70.98$  мэВ. Другой стороной проблемы, связанной с короткодей-

ствующим потенциалом, является определение волновых функций состояний, и, в частности, что наиболее для нас важно, состояний  $1s$ .

Для преодоления обозначенных трудностей при расчете темпов междолинных переходов при излучении фононов, в отношении  $1s$ -состояний мы предлагаем использовать упрощенный подход. Будем исходить из того, что на величину матричного элемента безызлучательного перехода существенно влияет локализация волновых функций  $1s$ -состояний, а другие детали их устройства сказываются не столь сильно. Тогда волновые функции состояний  $1s$  можно оставить в форме (5), а соответствующие параметры локализации  $a$  и  $b$  определить, используя единственно известный точно параметр, это энергию состояний. Связь между энергией состояния и параметрами  $a$  и  $b$  получается на основании анализа асимптотического поведения волновой функции на больших расстояниях от примесного иона, проведенного в квазиклассическом приближении [36] (Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос). Необходимо, чтобы асимптотическое поведение волновой функции вдали от кулоновского центра соответствовало асимптотике, вычисленной в квазиклассическом приближении.

Согласно [35] асимптотика представляет собой экспоненциально спадающую функцию:

$$F(r) = e^{-q(\mathbf{n})r}, \quad (\text{I.6})$$

где  $q(\mathbf{n}) = \hbar^{-1} \sqrt{2m_{\perp}|E|(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2/\gamma)}$ ,  $\gamma = m_{\perp}/m_{\parallel}$ ,  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ . Подчеркнем, что методика определения асимптотического поведения волновой функции в квазиклассическом приближении не опирается на конкретный вид потенциала донорного центра, т.к. данная асимптотика отражает поведение волновой функции глубоко под энергетическим барьером, созданным ионом примеси, и определяется лишь энергией состояния.

Приравнивая показатель экспоненты асимптотики (6) к показателю экспоненты волновой функции  $1s$ -состояния (5), легко получить следующие выражения для параметров  $a$  и  $b$ :



$$a^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp} E}, \quad b^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel} E} \quad (1.7)$$

Численные значения этих параметров отличаются от значений, получаемых вариационным методом. Например для значения энергии основного состояния  $E=31.27$  мэВ, которое дает метод эффективных масс, по формулам (7) параметры  $a$  и  $b$  имеют значения:  $a=4.67 \cdot a_0$ ,  $b=2.13 \cdot a_0$ , а в рамках вариационного метода  $a=4.58 \cdot a_0$ ,  $b=2.57 \cdot a_0$ , где  $a_0$  – постоянная решетки кремния.

Предложенная процедура построения волновых функций  $1s$ –состояний позволяет легко учесть поправки связанные с особенностью короткодействующего потенциала того или иного донора, опираясь на экспериментальные значения энергий состояний. Указанный подход полезен, в частности, при анализе влияния одноосной деформации кристалла кремния на релаксацию различных состояний доноров, т.к. деформация приводит к энергетическому сдвигу состояний донора, а, следовательно, и к изменению их локализации в пространстве.

### 1.3 Электрон-фононное взаимодействие и релаксация состояний мелких доноров в кремнии

**1.3.1 Матричный элемент взаимодействия электронов мелких доноров в кремнии с фононами.** Оператор взаимодействия электронов с колебаниями решетки можно записать в виде (см. например [21]):

$$H_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{a}\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{a}\alpha}) \mathbf{Q}_{\mathbf{a}\alpha} \quad (1.8)$$

где  $\mathbf{F}(\mathbf{R}_{\mathbf{a}\alpha}, \mathbf{r})$  имеет смысл силы, действующей со стороны иона решетки, положение которого  $\mathbf{R}_{\mathbf{a}\alpha}$ , на электрон с координатами  $\mathbf{r}$ ,  $\alpha$  – номер этого иона в ячейке, положение которой в кристалле задается вектором  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{Q}_{\mathbf{a}\alpha}$  – вектор смещения иона кристаллической решетки. Сумма ведется по всем атомам кристаллической решетки. Используя известные соотношения квантовой механики, вектор  $\mathbf{Q}_{\mathbf{a}\alpha}$  можно представить в виде [21]:

$$\mathbf{Q}_{a\alpha} = \sum_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_q}} \mathbf{e}_{sq} a_{qs}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}} + k.c. \quad (\text{I.9})$$

Эта формула представляет собой разложение смещения атома кристаллической решетки по фононам, где  $s$ -номер фононной ветви,  $\mathbf{q}$  – волновой вектор фонона,  $\mathbf{e}_{sq}$  – его поляризация,  $a_{qs}^+$  – оператор рождения фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$ , и принадлежащим ветви с номером  $s$ ,  $N$  – число элементарных ячеек в кристалле,  $V$  – объем кристалла,  $\rho$  – его плотность. Таким образом, оператор излучения фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$ , и принадлежащим ветви с номером  $s$ , можно переписать в виде:

$$H_{\text{int}}^{sq} = \sum_{a\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{a\alpha}) \mathbf{e}_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_q}} a_{qs}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}} \quad (\text{I.10})$$

Используя теперь выражения для  $H_{\text{int}}^{sq}$ , можно записать матричный элемент перехода между состояниями донора с номерами  $m$  и  $n$  с излучением фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$ :

$$M_{nm} = \int \langle n_q + 1 | \Psi_n^* \left( \sum_{a\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{a\alpha}) \mathbf{e}_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_q}} a_{qs}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}} \right) \Psi_m | n_q \rangle d\mathbf{r} \quad (\text{I.11})$$

здесь  $|n_q\rangle$  – волновая функция фононов,  $n_q$  – число фононов в моде с волновым вектором  $\mathbf{q}$  (при отсутствии взаимодействия между электронами и фононами волновая функция представляет собой произведение электронной и фононной волновых функций).

Т.к. волновая функция состояния мелкого донора имеет вид (I.2), то выражение (I.11) можно переписать в следующем виде:

$$M_{nm} = \sum_{ij} \alpha_i \beta_j \int \langle n_q + 1 | F_n^i(\mathbf{r})^* \varphi_i^*(\mathbf{r}) \times \\ \times \left( \sum_{a\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{a\alpha}) \mathbf{e}_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_q}} a_{qs}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}} \right) F_m^j(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) | n_q \rangle d\mathbf{r} \quad (\text{I.12})$$

Здесь  $\alpha_i$  и  $\beta_j$  – коэффициенты, определяющиеся из соображений симметрии для точечной группы тетраэдра  $T_d$  и отражающие распределение волновой

функции по долинам в  $k$ -пространстве (см. (I.3)). В этом выражении удобно поменять местами интегрирование по  $\mathbf{r}$  и суммирование по  $\mathbf{a}$ :

$$M_{nm} = \sum_{ij} \alpha_i \beta_j \sum_{\mathbf{a}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}} \int \langle n_q + 1 | F_n^i(\mathbf{r})^* \varphi_i^*(\mathbf{r}) \times \\ \times \left( \sum_{\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha\alpha}) \mathbf{e}_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_{\mathbf{q}}}} a_{qs}^+ \right) F_m^j(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) | n_q \rangle d\mathbf{r} \quad (\text{I.13})$$

Электрон на дне зоны проводимости кремния имеет большой волновой вектор ( $k \sim 0.83 \div 0.85 \ 2\pi/a$ , где  $a$  – постоянная решетки), поэтому блоховские волновые функции на дне зоны можно считать быстро осциллирующими (период осцилляций порядка  $a$ ), функция  $F(\mathbf{r})$  достаточно быстро спадает с увеличением  $\mathbf{r}$  (характерный масштаб спадания тоже порядка постоянной решетки  $a$ ), в то время как огибающие волновых функций  $F_n^i(\mathbf{r})$  и  $F_m^j(\mathbf{r})$  состояний доноров можно считать плавными и почти не меняющими своего значения на масштабах элементарной ячейки, поэтому их можно вынести за знак интеграла. Выражение (I.13) примет вид [21]:

$$M_{nm} = \sum_{ij} \alpha_i \beta_j \sum_{\mathbf{a}} F_n^i(\mathbf{a})^* F_m^j(\mathbf{a}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}} \times \\ \times \int \langle n_q + 1 | \varphi_i^*(\mathbf{r}) \left( \sum_{\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha\alpha}) \mathbf{e}_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_{\mathbf{q}}}} a_{qs}^+ \right) \varphi_j(\mathbf{r}) | n_q \rangle d\mathbf{r} \quad (\text{I.14})$$

Далее, если рассматривать взаимодействие с длинноволновыми фононами (внутридолинные переходы), то для случая кремния (экстремумы зоны проводимости лежат на оси симметрии) интеграл в последней формуле (I.15) выражается через деформационные потенциалы, введенные (7) [36], следующим образом:

*для взаимодействия с продольными фононами:*

$$\int \langle n_q + 1 | \varphi_i^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \left( \sum_{\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha\alpha}) \mathbf{e}_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_{\mathbf{q}}}} a_{qs}^+ \right) \varphi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) | n_q \rangle d\mathbf{r} = \\ = iq \sqrt{\frac{\hbar(n_q + 1)}{2NV\rho\omega_{\mathbf{q}}}} (\Xi_u \cos^2 \vartheta + \Xi_d)$$

для взаимодействия с поперечными фононами: (I.15)

$$\begin{aligned} & \int \langle n_q + 1 | \varphi_i^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \left( \sum_{\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha\alpha}) \mathbf{e}_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_q}} a_{qs}^+ \right) \varphi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) | n_q \rangle d\mathbf{r} = \\ & = iq \sqrt{\frac{\hbar(n_q + 1)}{2NV\rho\omega_q}} \left( \frac{1}{2} \Xi_u \sin 2\mathcal{G} \right) \end{aligned}$$

где  $\mathcal{G}$  – угол между волновым вектором  $\mathbf{q}$  и осью симметрии долины.

Для рассмотрения же взаимодействие с коротковолновыми фононами, какими являются междолинные фононы, перепишем выражение (I.14) в виде:

$$\begin{aligned} M_{nm} &= \sum_{ij} \alpha_i \beta_j \sum_{\mathbf{a}} F_n^i(\mathbf{a})^* F_m^j(\mathbf{a}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}} e^{-i(\mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i - \mathbf{g})\mathbf{a}} \times \\ & \times \int \langle n_q + 1 | \varphi_i^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \left( \sum_{\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha\alpha}) \mathbf{e}_{sq} \sqrt{\frac{\hbar}{2NV\rho\omega_q}} a_{qs}^+ \right) \varphi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) | n_q \rangle e^{i(\mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i + \mathbf{g})\mathbf{a}} d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (I.15)$$

где  $\mathbf{g}$  – вектор обратной решетки кремния. Интеграл в последнем выражении формально имеет вид матричного элемента перехода между состояниями, описываемыми блоховскими функциями дна зоны  $\varphi_i(\mathbf{r})$  и  $\varphi_j(\mathbf{r})$ , с излучением фонона с волновым вектором  $\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j$  за нехваткой суммы по элементарным ячейкам. Заметим, что в силу периодичности кристалла значение интеграла в нем не зависит от  $\mathbf{a}$ , поэтому данный интеграл можно просуммировать по всем ячейкам, поделив при этом на общее их количество в кристалле. Для междолинных переходов можно воспользоваться выражением (I.1), и выразить матричный элемент перехода между блоховскими состояниями электрона через междолинный деформационный потенциал. Тогда, переходя от суммирования по элементарным ячейкам к интегралу, матричный элемент перехода между состояниями донора для случая спонтанного излучения фонона будет даваться следующим выражением:

$$M_{nm} = \sum_{ij} \alpha_i \beta_j \sqrt{\frac{\hbar(D_t k)^2}{2\rho V \omega_q}} \int F_n^i(\mathbf{r})^* F_m^j(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j - \mathbf{g} - \mathbf{q})\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (I.16)$$

Конечно, проделанная процедура не совсем корректна, т.к. в кремнии переход между блоховскими волновыми функциями, матричный элемент которого

го рассматривается, представляет собой переход между состояниями с одинаковой энергией, следовательно, излучения фонона не может быть в принципе. Но эта некорректность имеет ту же степень, в какой некорректна сама формула (I.1), т.к. в ней не специфицируются конкретные начальные и конечные состояния перехода. Выражение (I.1) имеет феноменологический характер и нацелено на расчет вероятностей перехода при взаимодействии лишь с конкретными фононными модами, поэтому проделанные выкладки для случая взаимодействия с коротковолновыми фононами вполне правомерны.

Для расчетов скоростей релаксации состояний донора фосфора в кремнии при взаимодействии с междолинными фононами g-типа выражение (I.16) впервые было использовано в [33].

### 1.3.2 Вероятности междолинной релаксации состояний доноров

Введем матричный элемент перехода с излучением фонона между одностепенными состояниями донорного центра:

$$M_{nm}^{ij} = \sqrt{\frac{\hbar(D_t k)^2}{2\rho V \omega_q}} \int F_n^i(\mathbf{r}) F_m^j(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j - \mathbf{g} - \mathbf{q})\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (\text{I.17})$$

Вероятность перехода между состояниями  $n$  и  $m$  согласно «Золотому правилу Ферми» представляется в виде:

$$P_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \left| \sum_{ij} \alpha_i \beta_j M_{nm}^{ij} \right|^2 \delta(\varepsilon_{nm} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \quad (\text{I.18})$$

где  $\varepsilon_{nm}$  - энергия перехода между уровнями  $n$  и  $m$ . В силу эквивалентности шести долин кремния суммирование по  $\alpha_i$  и  $\beta_j$  можно свести к умножению всего выражения на определенный коэффициент  $K_t$ , зависящий от конкретной симметрии распределения верхнего и нижнего состояний перехода по долинам и типа перехода ( $f$  или  $g$ ), т.е. представить полную вероятность перехода в виде:

$$P_{nm} = K_t \cdot P_{nm}^{ij} \quad \text{I.19}$$

где  $P_{nm}^{ij}$  - вероятность перехода между однодолинными волновыми функциями, принадлежащими  $i$ -ой и  $j$ -ой долине:

$$P_{nm}^{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |M_{nm}^{ij}|^2 \delta(\varepsilon_{nm} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \quad \text{I.20}$$

а коэффициент  $K_t$  для  $f$ - и  $g$ -процессов ( $t=f, g$ ) выражаются следующими формулами:

$$\begin{aligned} K_f = & (\alpha_3 \cdot \beta_5 + \alpha_6 \cdot \beta_4)^2 + (\alpha_5 \cdot \beta_3 + \alpha_4 \cdot \beta_6)^2 + (\alpha_3 \cdot \beta_6 + \alpha_5 \cdot \beta_4)^2 + \\ & + (\alpha_6 \cdot \beta_3 + \alpha_4 \cdot \beta_5)^2 + (\alpha_1 \cdot \beta_3 + \alpha_4 \cdot \beta_2)^2 + (\alpha_3 \cdot \beta_1 + \alpha_2 \cdot \beta_4)^2 + \\ & + (\alpha_1 \cdot \beta_4 + \alpha_3 \cdot \beta_2)^2 + (\alpha_4 \cdot \beta_1 + \alpha_2 \cdot \beta_3)^2 + (\alpha_1 \cdot \beta_5 + \alpha_6 \cdot \beta_2)^2 + \\ & + (\alpha_5 \cdot \beta_1 + \alpha_2 \cdot \beta_6)^2 + (\alpha_1 \cdot \beta_6 + \alpha_5 \cdot \beta_2)^2 + (\alpha_6 \cdot \beta_1 + \alpha_2 \cdot \beta_5)^2, \end{aligned} \quad \text{I.21}$$

$$K_g = (\alpha_1 \cdot \beta_2)^2 + (\alpha_2 \cdot \beta_1)^2 + (\alpha_3 \cdot \beta_4)^2 + (\alpha_4 \cdot \beta_3)^2 + (\alpha_5 \cdot \beta_6)^2 + (\alpha_6 \cdot \beta_5)^2,$$

Численные значения симметричных коэффициентов  $K_f$  и  $K_g$  междолинных переходов даны в [таблице 2](#).

Таблица 2 Значения симметричных коэффициентов $K_f$ и $K_g$ для переходов между состояниями с различными симметриями							
		$K_g$ ( $g$ – переходы)			$K_f$ ( $f$ – переходы)		
		$A_1$	$E$	$T_2$	$A_1$	$E$	$T_2$
2	1						
	$A_1$	1/6	1/6	1/6	4/3	1/3	2/3
	$E$	1/3	1/3	1/3	2/3	5/3	4/3
	$T_2$	1/2	1/2	1/2	2	2	2

Междолинные переходы  $f$  и  $g$  типа обычно относят к процессам переброса, т.е. рассеянию с участием вектора обратной решетки. Однако отметим, что междолинный переход между состояниями доноров может происходить и без участия вектора обратной решетки, вследствие размытости волновых функций этих состояний в импульсном пространстве. В этом случае вклад в

матричный элемент дают лишь «хвосты» волновых функций в  $k$ -пространстве, и соответствующие вероятности переходов относительно малы, хотя порой могут вносить заметный вклад в общий темп релаксации рассматриваемого состояния.

### ***$f$ – переходы***

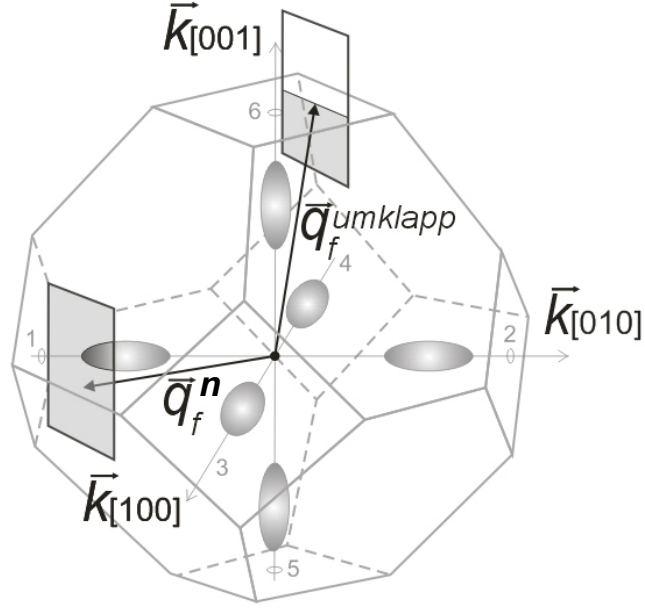
Излучение или поглощение  $f$ -фонона представляет собой переход между смежными долинами зоны проводимости кремния, т.е. между долинами, лежащими на осях, перпендикулярных друг другу. Пусть, для примера, переход происходит с участием вектора обратной решетки из  $(-X)$  – долины в  $(Y)$  – долину, т.е. из долины  $(-100)$  в  $(010)$  долину. В этом случае волновой вектор фонона ориентирован в направлении близком:

$$\mathbf{q}_{0f} = \left( k_v - \frac{2\pi}{a}, k_v - \frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{a} \right),$$

где  $a$  – постоянная решетки кремния,  $k_v$  – расстояние от центра зоны Бриллюэна до центра долины (ее значение для кремния не известно точно, в разных источниках приводятся различные значения в диапазоне  $0.83 \div 0.85 \frac{2\pi}{a}$ ). Как видно, волновой вектор  $f$ -фонона, соответствующего переходу между центрами долин, лежит на самой границе зоны Бриллюэна в направлении близком кристаллографическому направлению  $(0,0,-1)$ . Очевидно, что на границе закон дисперсии фононов нельзя считать изотропным, но из соображений симметрии можно заключить, что изоэнергетическая поверхность подходит ортогонально к рассматриваемой границе зоны Бриллюэна. А так как локализация донорных состояний мала по сравнению с периодом обратной решетки, то на таких масштабах данную изоэнергетическую поверхность фононов можно считать плоскостью, подходящей перпендикулярно к границам зоны Бриллюэна в направлениях ориентации долин (рис.2). Уравнение данной плоскости будет иметь вид:

$$q_x + q_y = -\sqrt{2}q_z \tag{1.22}$$

где  $q_x, q_y$  – координаты волнового вектора фонона в обратном пространстве,  $q_\varepsilon$  – длина волнового вектора  $f$ -фонона с энергией, равной энергии перехода  $\varepsilon_{nm}$ .



**Рис. 2** Зона Бриллюэна и положения долин зоны проводимости кремния;  $q_f^n$  и  $q_f^{um}$  волновые вектора междолинного  $f$ -фонона в случае нормального процесса и процесса с перебросом. Плоскости на рисунке показывают локальную аппроксимацию изоэнергетической поверхности фононов, соответствующих  $f$ -переходам, для нормального процесса и процесса с перебросом.

Закон дисперсии фононов мы всегда локально будем считать линейным, т.е.

$$\omega_q = \omega_0 + vq \quad (1.23)$$

здесь  $\omega_q$  – частота фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$ ,  $\omega_0$  – константа,  $v$  – групповая скорость фононов,  $q$  – длина волнового вектора фонона, направленного

вдоль  $\mathbf{q}_{0f} = (k_v - \frac{2\pi}{a}, k_v - \frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{a})$ . Очевидно, что  $\frac{\varepsilon_{nm}}{\hbar} = \omega_0 + vq_\varepsilon$ , поэтому,

используя это выражение и формулу (1.22), получим локальную аппроксимацию изоэнергетической поверхности фононов в направлении  $\mathbf{q}_{0f}$  с частотой

$\omega_q$ :

$$\omega_q = \omega_0 - v \frac{q_x + q_y}{\sqrt{2}} \quad (1.24)$$

Используя теперь выражения для  $M_{nm}^{ij}$  (1.17) и  $P_{nm}^{ij}$  (1.20), для вероятности перехода из (-X) долины в (Y) получим:



$$P_{nm}^{(-X)(Y)} = \frac{\pi(D_t k)^2}{\rho V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left( \int F_n^{(-X)*}(\mathbf{r}) F_m^{(Y)}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{q}_{0f} - \mathbf{q})\mathbf{r}} d\mathbf{r} \right)^2 \delta(\varepsilon_{nm} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \quad \text{I.25}$$

Переходя теперь от суммирования по  $\mathbf{q}$  к интегралу, последнюю формулу можно переписать в виде:

$$P_{nm}^{(-X)(Y)} = \frac{(D_t k)^2}{8\pi^2 \rho} \int \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left( \int F_n^{(-X)*}(\mathbf{r}) F_m^{(Y)}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{q}_{0f} - \mathbf{q})\mathbf{r}} d\mathbf{r} \right)^2 \delta(\varepsilon_{nm} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) d\mathbf{q} \quad \text{I.26}$$

Вычисления удобней проводить, если использовать волновые функции состояний донора в импульсном представлении. В этом случае выражение  $\int F_n^{(-X)*}(\mathbf{r}) F_m^{(Y)}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{q}_{0f} - \mathbf{q})\mathbf{r}} d\mathbf{r}$  в формуле (I.23) перейдет в свертку:

$$\int F_n^{(-X)*}(\mathbf{k}) F_m^{(Y)}(\mathbf{q}_{0f} - \mathbf{q} - \mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad \text{I.27}$$

Теперь, учитывая уравнение изоэнергетической поверхности фононов (I.24) выражение (I.27) можно проинтегрировать по одной из компонент вектора  $\mathbf{q}$ , используя фильтрующее свойство  $\delta$ -функции. Вероятность  $P_{nm}^{(-X)(Y)}$  тогда запишется в виде:

$$P_{nm}^{(-X)(Y)} = \frac{(D_t k)^2}{8\pi^2 \rho} \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon_{nm} v} \iint J^2 dq_x dq_z \quad \text{I.28}$$

где  $J$  представляет собой следующий интеграл:

$$J = \iiint F_n^{(-X)*}(k_x, k_y, k_z) \times \\ \times F_m^{(Y)}\left(k_y - \frac{2\pi}{a} - q_x - k_x, k_y - \frac{2\pi}{a} + q_x - q_\varepsilon \sqrt{2} - k_y, -\frac{2\pi}{a} - q_z - k_z\right) dk_x dk_y dk_z \quad \text{I.29}$$

В случае, когда междолинный переход с участием  $f$ -фонона происходит без переброса, волновой вектор фонона лежит в направлении (110), а изоэнергетическая поверхность аппроксимируется тоже плоскостью, но ортогональной волновому вектору  $f$ -фонона, т.е. направлению (110) (рис. 1).

Продельвая те же выкладки, не трудно показать, что  $P_{nm}^{ij}$  будет находиться по той же формуле (I.28), а выражение для  $J$  будет иметь вид:

$$J = \iiint F_n^{i*}(k_x, k_y, k_z) \times \times F_m^j(k_v - q_x - k_x, k_v + q_x - q_\varepsilon \sqrt{2} - k_y, -q_z - k_z) dk_x dk_y dk_z \quad \text{I.30}$$

Следует учесть, что  $q_\varepsilon$  в этом случае уже не учитывает вектор обратной решетки. Видно, что (I.30) образуется из (I.29) вычитанием из  $\mathbf{q}$  вектора обратной решетки  $(1,1,1)\frac{2\pi}{a}$ , поэтому с точки зрения конечного результата, как и должно быть, совершенно не важно как проводить расчет, в схеме расширенных зон или в схеме приведенной зоны Бриллюэна.

### ***g - переходы***

Волновой вектор фононов, соответствующий  $g$  – переходам, расположен в направлении близком направлению (100) и имеет длину равную примерно третьей части расстояния от центра зоны Бриллюэна до ее края. Например, для перехода из центра (-X) долины в центр долины (X) волновой вектор фонона с учетом вектора обратной решетки  $(-\frac{2\pi}{a}, 0, 0)$  будет равен:

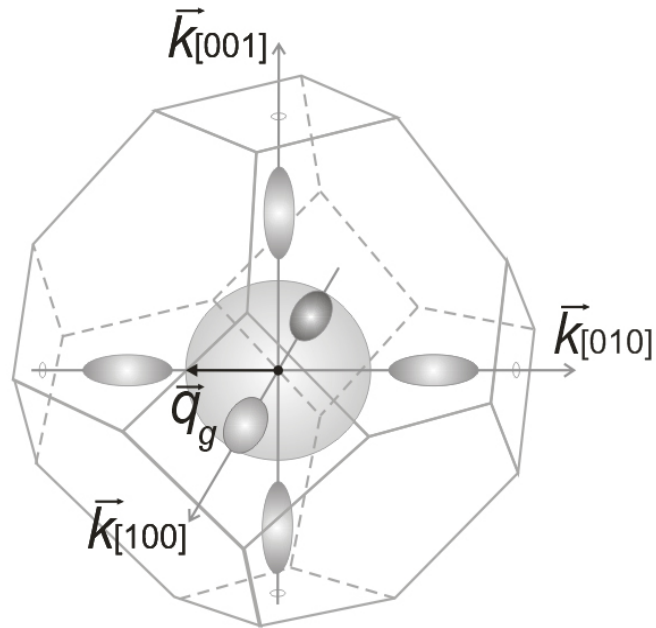
$$\mathbf{q} = (2k_v - \frac{2\pi}{a}, 0, 0). \text{ В этой области закон дисперсии фононов можно считать}$$

изотропным, а изоэнергетические поверхности, следовательно, сферами (рис. 3). Уравнение данной изоэнергетической поверхности будет:  $q = const$ ,  $q$  – модуль волнового вектора фонона. В этом случае удобно проводить вычисления в сферической системе координат. Прodelывая простые выкладки легко получить, что  $P_{nm}^{ij}$  будет находиться по следующей формуле:

$$P_{nm}^{ij} = \frac{(D_i k)^2}{8\pi^2 \rho} \frac{q_\varepsilon^2}{\varepsilon_{nm} v} \iint \sin(\vartheta) J^2 d\varphi d\vartheta \quad \text{I.31}$$

где

$$J = \iiint F_n^{i*}(k_x, k_y, k_z) F_m^j(-\frac{4\pi}{a} - 2k_v - q_\varepsilon \sin(\vartheta) \cos(\varphi) - k_x, -q_\varepsilon \sin(\vartheta) \sin(\varphi) - k_y, -q_\varepsilon \cos(\vartheta) - k_z) dk_x dk_y dk_z \quad \text{I.32}$$



**Рис. 3** Сфера в центре зоны Бриллюэна – изоэнергетическая поверхности фононов с энергией  $g$ -фонона;  $q_g$  – волновой вектор  $g$ -фонона.

Следует обратить внимание на тот факт, что, как следует из полученных формул для вероятности междолинных  $f$  и  $g$ -переходов, вероятность стремится к бесконечности при стремлении групповой скорости к нулю. На самом деле, достаточно очевидно, что это не может соответствовать действительности, и значит лишь то, что данная модель не применима при достаточно малых групповых скоростях фононов. Это является недостатком теории, т.к. на дисперсионной характеристике фононов есть точки, где групповая скорость обращается в ноль, и при определенных условиях такие фононы принимают участие в релаксации примесных состояний. Для расчета темпов переходов на таких фононах следует более строго подходить к аппроксимации фононной дисперсионной характеристики. Но в данной работе решение такой задачи не рассматривается.

## ГЛАВА II. РЕЛАКСАЦИЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ДОНОРОВ ПЯТОЙ ГРУППЫ В КРЕМНИИ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ФОНОНАМИ.

### 2.1 Постановка задачи

Перейдем теперь к обсуждению релаксации на междолинных фононах возбужденных состояний доноров фосфора, сурьмы, висмута и мышьяка в кремнии. Различие релаксационных сценариев при возбуждении системы (кремний, легированный мелкими донорами) обусловлено, главным образом, различием энергий основного состояния рассматриваемых доноров. Глубина залегания основного состояния донора фосфора (P) относительно дна зоны проводимости кремния составляет 45,59 мэВ, донора мышьяка (As) – 53,76 мэВ, донора сурьмы (Sb) – 42,74 мэВ и донора висмута (Bi) – 70,98 мэВ [37] (*A. K. Ramdas and S. Rodriguez*). Это обуславливает тот факт, что релаксация отщепленной группы состояний  $1s(E, T_2)$  в донорах фосфора и сурьмы происходит с участием TA-g фононов и с участием LA-g и TA-f фононов в донорах мышьяка и висмута. Заметим, что междолинное электрон-фононное взаимодействие является единственным механизмом, обеспечивающим релаксацию состояния  $1s(T_2)$ , которое является нижним состоянием рабочего перехода при стимулированном излучении мелкими донорами. В донорах фосфора и сурьмы верхним рабочим состоянием является состояние  $2p_0$  [38-41]. Его релаксация определяется переходом в отщепленную группу  $1s(E, T_2)$  с излучением LA-g и TA-f фононов. В донорах висмута и мышьяка излучательный переход при возбуждении легированного образца CO<sub>2</sub>-лазером происходит не из состояния  $2p_0$ , а из состояния  $2p_{\pm}$  [38-41]. В Si:Bi это происходит по той причине, что переход  $2p_0 - 1s(A_1)$  находится в резонансе с TO-f фононами, и это приводит к тому, что время жизни состояния  $2p_0$  слишком мало для возникновения инверсной населенности. В донорах же мышьяка, конечно, существует дополнительный канал релаксации состояния  $2p_0$  по сравнению с Si:P и Si:Sb на переходе в основное со-

стояние  $1s(A_1)$  подобный случаю в Si:Bi, только при излучении не TO- $f$ , а LA- $f$  фононов, но темп такого процесса согласно расчетам не достаточно велик, чтобы привести к заметному уменьшению времени жизни состояния  $2p_0$ . Поэтому аналогию такого сорта между данными материалами (Si:Bi и Si:As) провести не удастся. Причиной того, что генерация развивается на переходе  $2p_{\pm}-1s(E,T_2)$ , является то, что в процессе релаксации заметная часть носителей переходит сразу в основное состояние  $1s(A_1)$  из состояний  $2p_{\pm}$  и  $2s$  при взаимодействии с LA- $f$  фононами, минуя состояние  $2p_0$ , и это ведет к недостаточной населенности последнего.

## 2.2 Релаксация возбужденных состояний доноров V группы в кремнии

Далее на рис. 4(а)-4(г) приведены результаты вычислений, где показаны схемы нижних состояний доноров P, Sb, As и Bi в кремнии. Стрелками показаны междолинные переходы, а справа от них типы фононов, с излучением которых происходит данный переход, и темп этого перехода;  $K_f$  и  $K_g$ , как уже было сказано выше, – симметричные коэффициенты междолинных переходов, которые учитывают распределение верхнего и нижнего состояний перехода по долинам зоны проводимости кремния. Цифры слева означают энергию уровня, выраженную в миллиэлектронвольтах.

В случае примесей фосфора и сурьмы в кремнии времена жизни состояний, находящихся выше состояния  $2p_0$ , определяются внутримолиновыми процессами электрон-фононного взаимодействия, поэтому они не отображены в схемах (рис. 4(а), 4(б)). К тому же, как говорилось выше, верхним рабочим состоянием при генерации ТГц стимулированного излучения всегда является состояние  $2p_0$ , в отличие от доноров висмута и мышьяка, в которых верхним рабочим состоянием является состояние  $2p_{\pm}$ , причем релаксация из континуума состояний происходит таким образом, что большинство носителей проходит через состояние  $2p_0$ . Поэтому уровни, находящиеся выше состояния  $2p_0$ , в сис-

тему балансных уравнений, описывающих инверсию на рабочем переходе, включать не нужно.

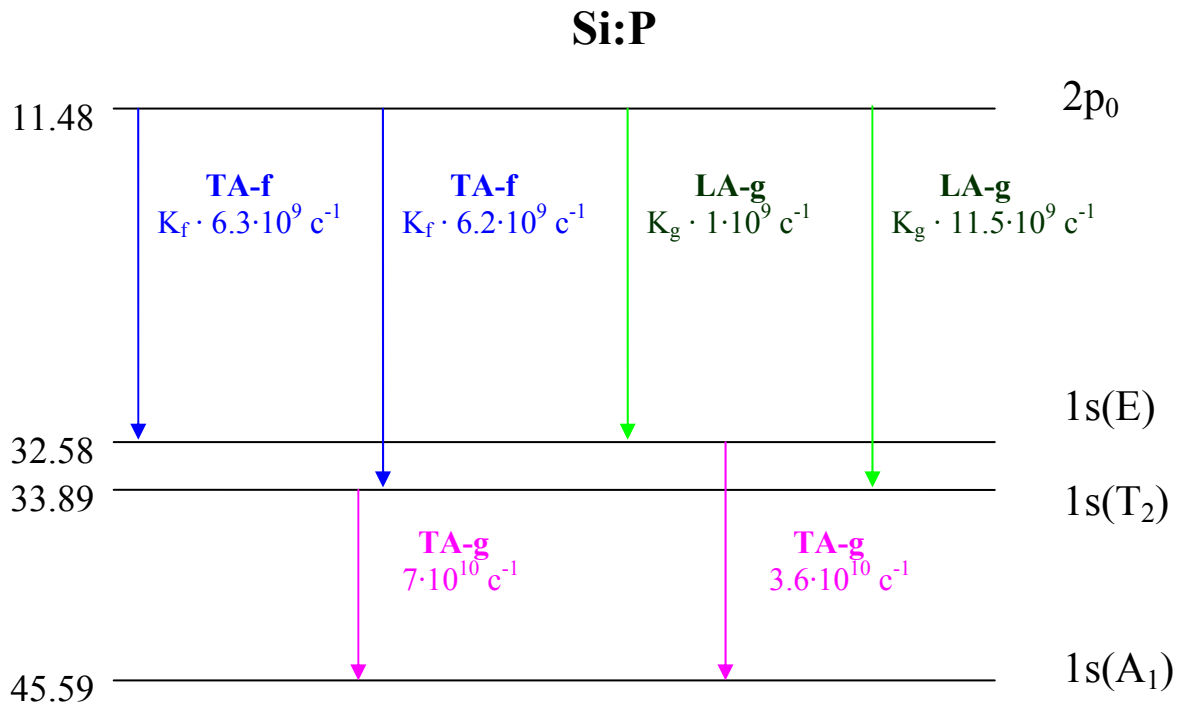


Рис. 4(а)

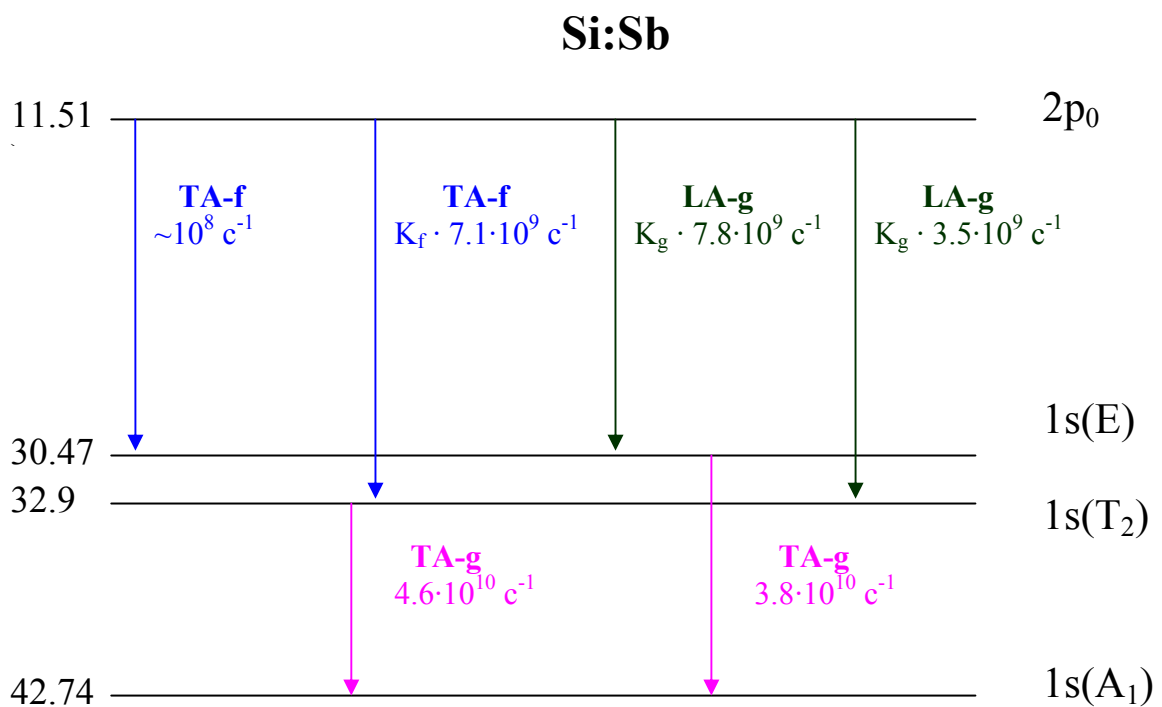


Рис. 4(б)

# Si:As

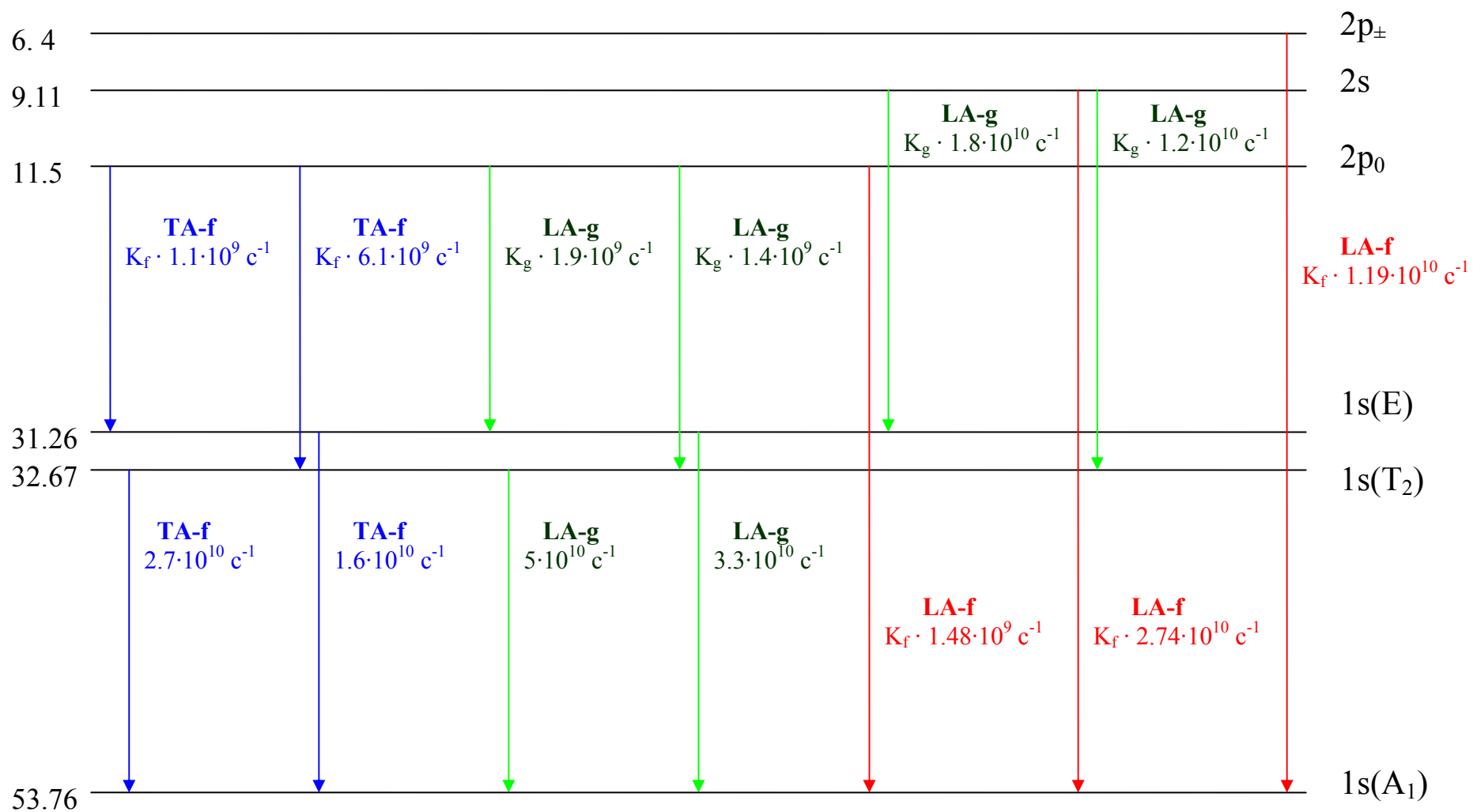


Рис. 4(в)

# Si:Bi

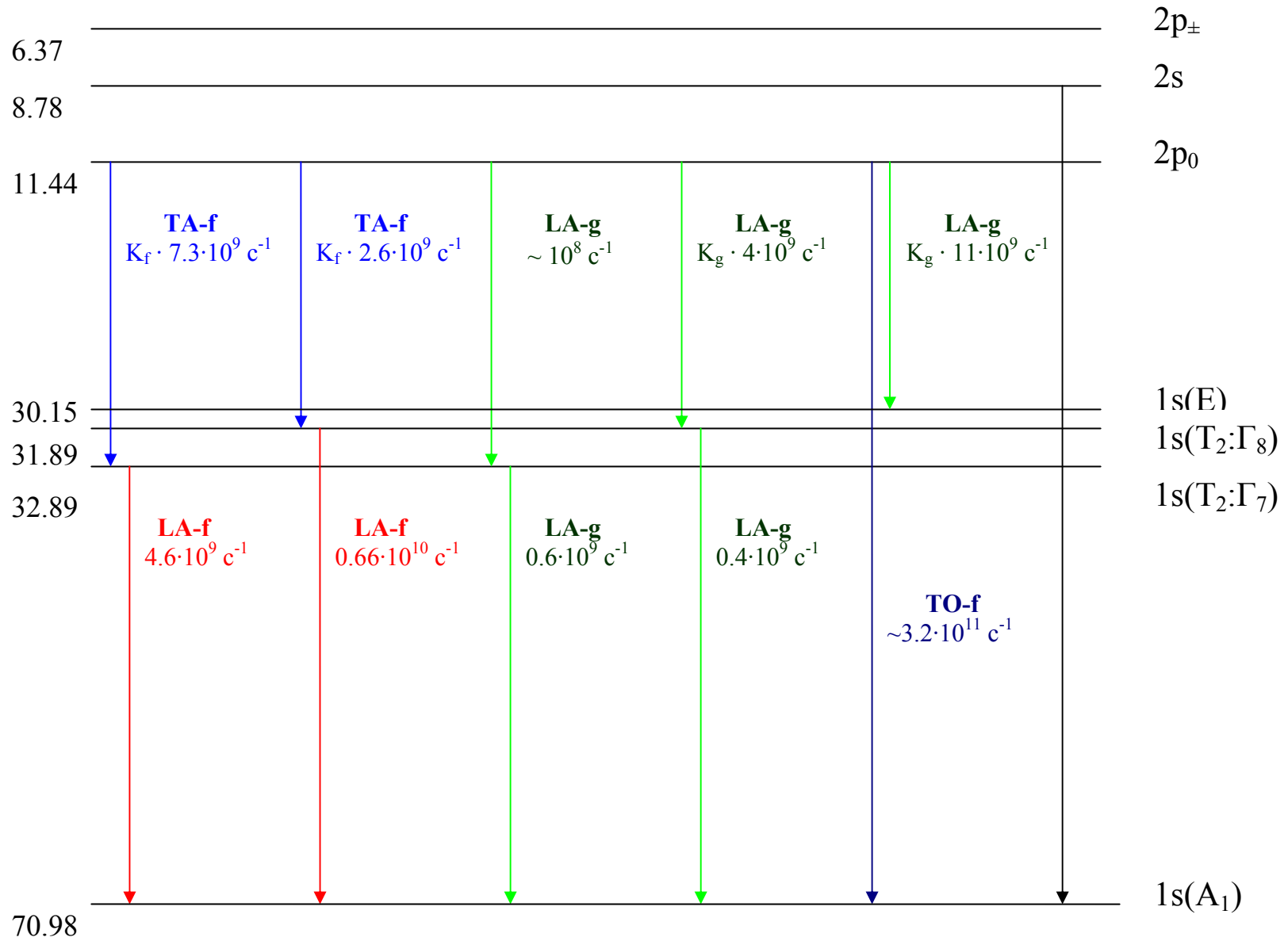
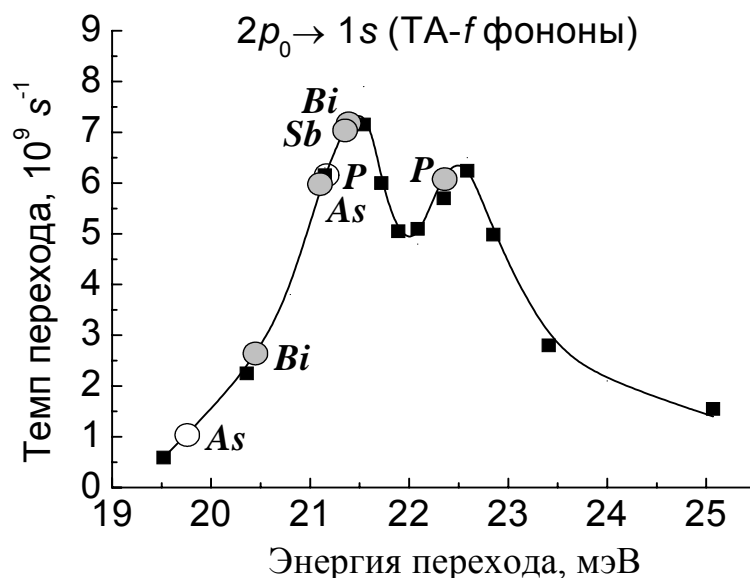


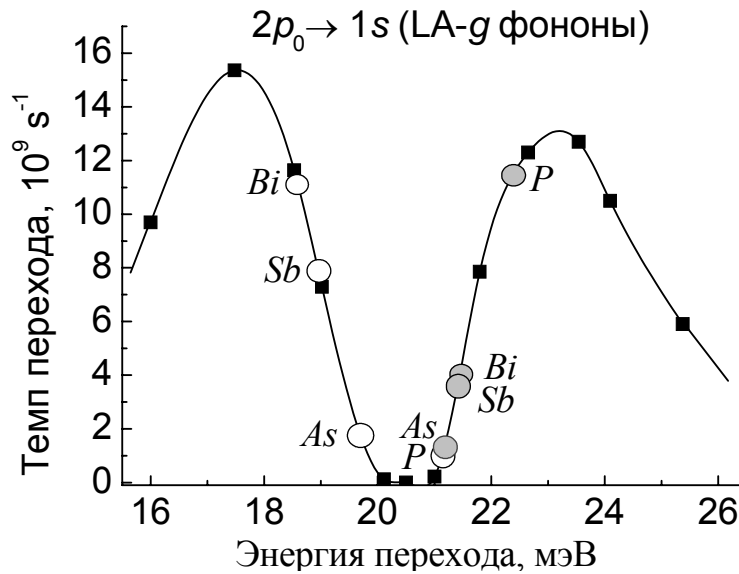
Рис. 4(г)



Интересным является тот факт, что темпы переходов из состояния  $2p_0$  в отщепленную группу состояний  $1s(E, T_2)$  для различных доноров отличаются довольно сильно, хотя энергии этих переходов во всех донорах (P, Bi, As, Sb) близки (они разнятся в диапазоне 19.6–22.41 мэВ), и вроде бы не следует ожидать заметного различия между этими темпами. Поэтому проведем расчет зависимостей скоростей переходов между рассматриваемыми состояниями при взаимодействии с TA- $f$  и LA- $g$  фононами от величины энергии перехода. Этот расчет очень важен, т.к. именно такое небольшое различие в энергиях перехода приводит к большому различию во временах релаксации состояния  $2p_0$ , и именно это, как будет показано в IV главе, и является причиной различия в порогах накачки лазеров на кремнии легированном фосфором и легированном сурьмой.

В рамках описанной выше модели численно был проведен такой расчет. Его результаты приведены на графиках (рис.5). По оси ординат на этих графиках отложен темп междолинного перехода  $P_{nm}^{ij}(E)$ , не учитывающий распределение состояний по долинам. Как уже было сказано выше, чтобы получить истинную вероятность перехода, нужно вероятность  $P_{nm}^{ij}(E)$ , взятую из графика, умножить на соответствующий коэффициент, зависящий от этого распределения,  $K_f$  для  $f$ -переходов и  $K_g$  для  $g$ -переходов (11, 12).





**Рис. 5** На верхнем графике темп перехода  $2p_0 \rightarrow 1s$  при взаимодействии с  $LA-g$  фононами, на нижнем – при взаимодействии с  $TA-f$  фононами в приближении однодолинных волновых функций, т.е. без учета распределения волновых функций верхнего и нижнего состояний по долинам кремния. Квадратными точками на графике показаны расчетные значения, которые соединены интерполяционной кривой. Кружки отмечают значения соответствующие реальным переходам в донорах P, Bi, As и Sb. Темные кружки соответствуют переходам из состояния  $2p_0$  в состояния  $1s(T_2)$ , светлые – из  $2p_0$  в  $1s(E)$ .

Как видно из графиков на обеих характеристиках наблюдается провал в окрестности точного резонанса, определяющегося тем, что энергия фонона с волновым вектором равным расстоянию между центрами долин равняется энергии соответствующего внутрицентрового перехода. При точном резонансе матричный элемент равен нулю из-за различной четности волновых функций состояний  $2p_0$  и  $1s$ . Вследствие этого при расчете скорости релаксации состояния  $2p_0$  имеет место эффект компенсации вкладов в матричный элемент положительной и отрицательной части волновой функции состояния  $2p_0$ . Разница величин провалов для  $f$ - и  $g$ -переходов объясняется, во-первых, различной ориентацией волновых функций состояний перехода в обратном пространстве друг относительно друга, а во-вторых, отличием фононных изоэнергетических поверхностей, по которым производится интегрирование. В случае  $g$ -переходов изоэнергетическая поверхность, как отмечалось выше, представляет собой сферу, а при радиусе сферы равном длине волнового век-

тора  $g$ -фонона эта сфера локально является почти плоскостью, ортогональной волновому вектору фонона. При интегрировании по этой поверхности, вследствие симметричной ориентации изоэнергетической поверхности по отношению к оси, вдоль которой вытянуты волновые функции<sup>1</sup>, вклады в матричный элемент положительной и отрицательной части волновой функции состояния  $2p_0$  всегда почти одинаковы. Поэтому значение вероятности перехода при излучении  $g$ -фононов в точке минимума равно почти нулю. В случае  $f$ - переходов изоэнергетическая поверхность ориентирована так, что определяющий вклад в матричный элемент в основном всегда дает только одна из частей волновой функции состояния  $2p_0$ , либо положительная либо отрицательная. Поэтому эффект упомянутой компенсации проявляется в меньшей степени.

### **2.3 Сравнение с темпами внутридолинной релаксации состояний мелких доноров и темпами междолинного рассеяния электронов проводимости в кремнии**

Полного расчета вероятностей внутридолинных переходов между состояниями мелких доноров в кремнии в настоящей диссертации не проводилось. Эти вероятности рассчитаны в работе [42], где вычисления проводились аналитически, но с использованием некоторых приближений. Значения темпов внутридолинной релаксации показаны в [таблице 3](#).

В настоящей работе лишь для сравнения проведены вычисления вероятностей нескольких внутридолинных переходов в рамках численной процедуры счета, которая использовалась для вычисления темпов междолинных переходов. Расхождения в значениях получились порядка 20-50 %, что достаточно приемлемо, т.к. погрешность используемого численного счета имеет значение приблизительно 20 %.

---

<sup>1</sup> Огибающие волновых функций примесных состояний имеют цилиндрическую симметрию, и в случае  $g$ -переходов оси симметрии состояний вытянуты вдоль одного направления

	$w_L$	$w_T$	$\Delta E$ мэВ
$2p_0 \rightarrow 1s$	1.9	0.02	19.8
$2s \rightarrow 2p_0$	22	1.2	2.7
$2s \rightarrow 1s$	5.6	0.15	22.4
$2p_{\pm 1} \rightarrow 2s$	3.8	0.8	2.4
$2p_{\pm 1} \rightarrow 2p_0$	14	0.4	5.1
$2p_{\pm 1} \rightarrow 1s$	0.01	0	24.9
$3p_0 \rightarrow 2p_{\pm 1}$	0.8	0.52	0.9
$3p_0 \rightarrow 2s$	3.8	0.8	3.4
$3p_0 \rightarrow 2p_0$	24	0.48	6.0
$3p_0 \rightarrow 1s$	0.14	0	25.8
$3p_{\pm 1} \rightarrow 3p_0$	0.10	0.52	2.4
$3p_{\pm 1} \rightarrow 2p_{\kappa 1}$	3.8	0.3	3.3
$3p_{\pm 1} \rightarrow 2p_{\pm 1}$	2.4	0.07	3.3

**Таблица 3.** Вероятности внутривалидных переходов между состояниями мелкого донорного центра в Si с излучением поперечных ( $w_T$ ) и продольных ( $w_L$ ) акустических фононов в единицах  $10^9 \text{ с}^{-1}$ . Использовалось следующее значение диэлектрической проницаемости  $\epsilon=11.4$ .

Сравнивая значения темпов в данной таблице, с результатами расчета темпов междолинных переходов, приведенных выше, видно, что междолинные процессы электрон-фононного взаимодействия сильно преобладают в релаксации состояния  $2p_0$ . Это связано с относительно большим энергетическим зазором между ним и  $1s$ -состояниями. Состояние  $1s(T_2)$  соответствует нижнему рабочему уровню при генерации лазерного излучения для всех мелких доноров V группы в кремнии в случае накачки  $\text{CO}_2$  лазером. Его релаксация всецело определяется междолинными переходами в силу симметричного запрета внутривалидных процессов на переходе из него в основное состояние  $1s(A_1)$ .

На следующем рисунке так же для сравнения представлены расчеты темпов междолинного рассеяния электронов в зоне проводимости кремния:

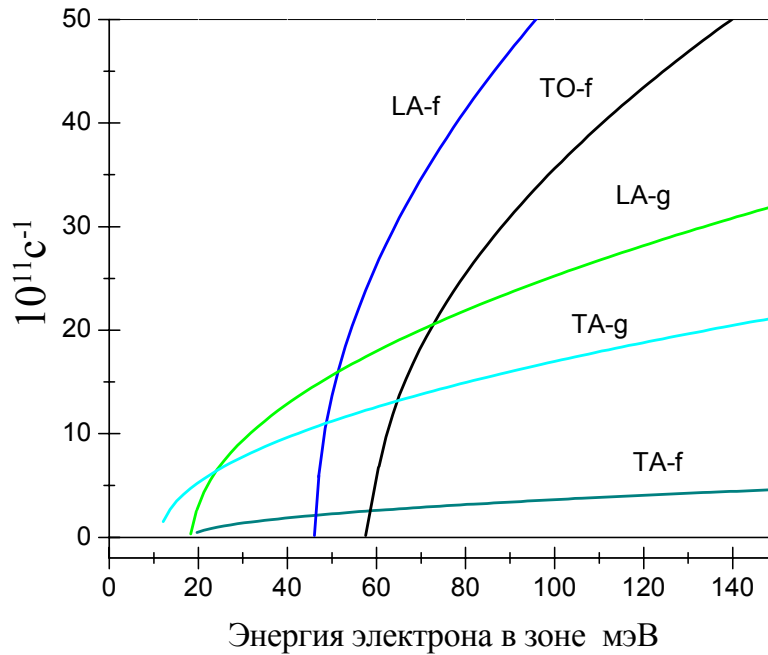


Рис 6. Зависимость темпов междолинных переходов свободных носителей в кремнии от энергии

Вычисления проведены, используя сферический параболический закон дисперсии электронов в зоне, на основе формулы (I.1) [22] (*C. Jacoboni, L. Reggiani*):

$$P(k', k) = \frac{\pi(D_t k)^2}{\rho V \omega_q} \delta(E(k') - E(k) - \hbar \omega_q)$$

Проведя интегрирования по конечным состояниям электрона в кремнии, для вероятности перехода в единицу времени между парой долин с излучением фонона получим:

$$P(E) = \frac{(D_t k)^2 m^{3/2}}{\sqrt{2} \pi \rho \hbar^3 \omega_q} \sqrt{E - \hbar \omega_q} \quad (\text{II.1})$$

здесь  $E$  – энергия электрона, отсчитанная от дна зоны проводимости,  $m$  – эффективная масса электрона,  $\omega_q$  – частота излучаемого фонона.

Как было упомянуто в главе I, для донора фосфора в кремнии существуют расчеты времени жизни состояния  $2p_0$  при релаксации на междолинных фононах, выполненные другими авторами, это работы [31] и [33]. В работе

[31] была сделана попытка явно учесть зависимость междолинных деформационных потенциалов взаимодействия с ТА- $f$  и LA- $g$  фононами от волнового вектора фонона (рис. 1). Согласно результатам расчетов в данной работе время жизни состояния  $2p_0$  равняется приблизительно 1 нс.

В работе [33] расчеты проводились, как и в настоящей, диссертации в нулевом порядке разложения деформационного потенциала по волновому вектору фонона (I.16), но без учета взаимодействия с  $f$ -фононами (см. диссертацию [33], стр. 76). Вычисления проведены для различных значений междолинного деформационного потенциала взаимодействия с LA- $g$  фононами, и для того же его значения, что используется в настоящей диссертации, суммарный темп релаксации состояния  $2p_0$  согласно [33] получается равным  $5 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ . Так же в [33] были рассчитаны и скорости релаксации состояний  $1s(E)$  и  $1s(T_2)$  при взаимодействии с ТА- $g$  фононами, их значения  $3.5 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$  и  $3.7 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$  соответственно. Различие значений вычисленных темпов излучения  $g$ -фононов в [33] и в настоящей диссертации связано, по-видимому, с различными используемыми параметрами: положение долин зоны проводимости кремния, дисперсия фононов, параметры огибающих волновых функций состояний доноров.

## ГЛАВА III. РЕЛАКСАЦИЯ СОСТОЯНИЙ ДОНОРОВ В ДЕФОРМИРОВАННОМ КРЕМНИИ

### 3.1 Состояния мелких доноров в условиях одноосного сжатия

Особое внимание в данной работе уделено расчетам темпов междолинных переходов между состояниями доноров в деформированном кремнии. Рассматривается случай, когда давление приложено в направлении (100). Деформация приводит к сдвигу по энергии долин кремния (рис. 7), а, следовательно, к расщеплению и энергетическим сдвигам состояний примесных центров (см. например [18, 34]), а это, в свою очередь, приводит к изменению вклада в общий темп релаксации состояний доноров взаимодействия с различными типами междолинных фононов.

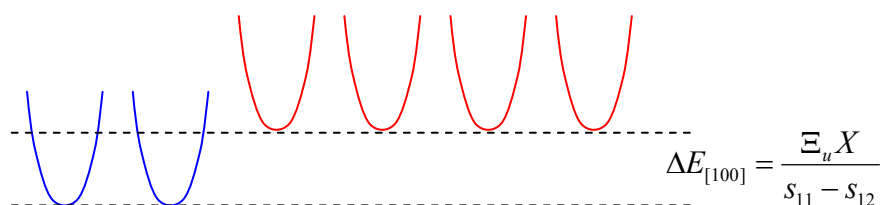


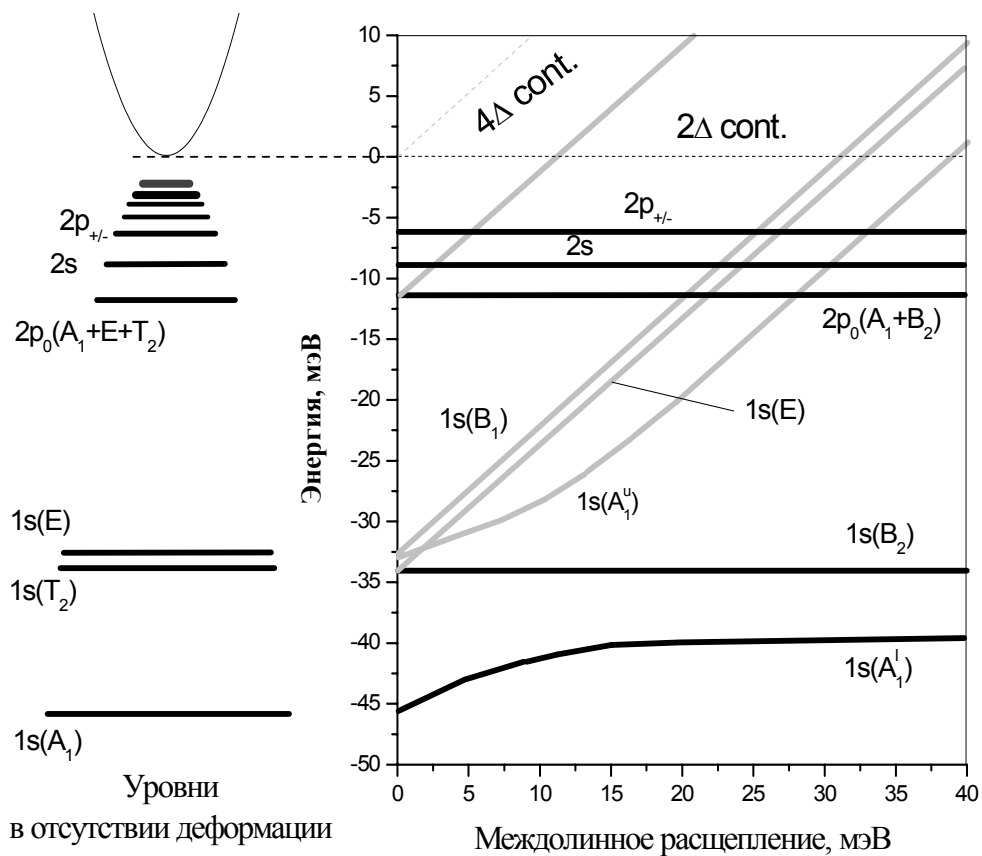
Рис. 7. Схематическое изображение расщепления долин кремния при одноосном сжатии в кристаллографическом направлении {100}. Здесь  $\Xi_u$  - сдвиговый деформационный потенциал,  $s_{11}$  и  $s_{12}$  - коэффициенты жесткости кристалла.

На рис.8 для примера показана зависимость энергий уровней донора фосфора в кремнии от междолинного расщепления при одноосном сжатии в направлении {100}. Черным цветом показаны уровни, принадлежащие 2Δ-долинам, т.е. долинам, вдоль которых приложено давление, серым – принадлежащие 4Δ-долинам [18].

Согласно [18, 34] сдвиг при давлении энергии 4Δ-долин равняется  $(-2/3)\Delta$ , а сдвиг 2Δ-долин, соответственно –  $(+1/3)\Delta$ , где  $\Delta$  – междолинное расщепление. Сдвиг энергии основного состояния  $1s(A_1^h)$  и  $1s(A_1^u)$  мелких доноров дается следующим выражением [18, 34]:

$$\Delta E_{g.s.} = \Delta_c \left( 3 - \frac{1}{6} \frac{\Delta}{\Delta_c} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left( \frac{\Delta}{\Delta_c} \right)^2 - 4 \frac{\Delta}{\Delta_c} + 36} \right) \quad (\text{III.1})$$

где знак «+» для состояния  $1s(A_1^u)$ , а «-», соответственно, для  $1s(A_1^l)$ ,  $\Delta_c$  – коэффициент, равный одной шестой от энергетического зазора между состояниями  $1s(A_1)$  и  $1s(E)$  в недеформированном кремнии. При этом в расчетах учитывалось изменение локализации  $1s$ -состояний при изменении его энергии согласно формулам (I.7). Изменение энергии остальных состояний при давлении соответствует изменению энергии долин.



**Рис. 8.** Зависимость энергии уровней донора фосфора в кремнии от междолинного расщепления, образующегося в результате одноосного сжатия в направлении  $\{100\}$  (междолинное расщепление пропорционально давлению; для направления сжатия  $\{100\}$  давление в 1кбар соответствует приблизительно междолинному расщеплению 8,5 мэВ).

Ниже приведены формулы для коэффициентов  $\alpha$ , задающих распределение состояний доноров по долинам в деформированном кремнии в направлении (100) [18]:



$$A_1^l : (c, c, d, d, d, d)$$

$$A_1^u : (a, a, b, b, b, b)$$

$$E(1,2): \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(0,0,0,0,1,-1) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(0,0,1,-1,0,0) \end{cases} \quad (\text{III.2})$$

$$B_1 : \frac{1}{2}(0,0,1,1,-1,-1)$$

$$B_2 : \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1,0,0,0,0)$$

Коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  даются следующими выражениями ( $\delta = \Delta/\Delta_c$ ):

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{1}{4} \left( 1 + \frac{2 - \delta}{\sqrt{\delta^2 - 4\delta + 36}} \right)} \\ b &= \sqrt{\frac{1}{8} \left( 1 - \frac{2 - \delta}{\sqrt{\delta^2 - 4\delta + 36}} \right)} \\ c &= \sqrt{\frac{1}{4} \left( 1 - \frac{2 - \delta}{\sqrt{\delta^2 - 4\delta + 36}} \right)} \\ d &= \sqrt{\frac{1}{8} \left( 1 + \frac{2 - \delta}{\sqrt{\delta^2 - 4\delta + 36}} \right)} \end{aligned} \quad (\text{III.3})$$

Симметричные коэффициенты для междолинных переходов  $K_f$  и  $K_g$  в деформированном кремнии рассчитываются по тем же формулам (I.21), как и в случае отсутствия деформации, но, используя, разумеется, другие значения коэффициентов  $\alpha$ .

Особым случаем является переход из состояния  $2p_{\pm}$ , т.к. оно имеет симметрию распределения по долинам кремния отличную от симметрий распределения состояний с нулевым значением магнитного квантового числа [43] (C. Jagannath, A.K. Ramdas). Т.к. данное состояние имеет двенадцатикратное вырождение, то можно таким образом скомбинировать вырожденные состояния, что каждое из них будет содержать лишь вклады противополо-

жащих долин, что делает более удобным нахождение симметричных коэффициентов междолинных переходов  $K_f$  и  $K_g$ . Огибающие волновых функций вырожденного состояния  $2p_{\pm}$  при каждой долине представляют собой «гантелеобразные» функции, ориентированные перпендикулярно друг другу и оси долин, к которым они принадлежат.

Таким образом, значения темпов междолинных переходов с участием  $2p_{\pm}$ -состояния могут быть различными в зависимости от того, между какими конкретно долинами происходит переход (см. рис. 9(a)). Обозначим как  $P_1$  и  $P_2$  вероятности таких переходов между однодолинными состояниями ( $P_{nm}^{ij}$ ), какие указаны на рис. 8(a). Для случая  $f$ -переходов, когда волновая функция нижнего состояния образована вкладами не только

противолежащих долин, общая вероятность перехода будет являться комбинацией вероятностей  $P_1$  и  $P_2$ . Для  $g$ -переходов из состояния  $2p_{\pm}$  в нижележащие состояния значения темпа междолинного перехода вследствие аксиальной симметрии огибающих волновых функций не зависят от того, каким конкретно образом ориентировано состояние  $2p_{\pm}$  относительно оси долин, т.е. для  $g$ -перехода  $P_1 = P_2$  (см. рис. 9(б)). Поскольку, как сказано выше, все состояния  $2p_{\pm}$  можно представить распределенными по двум противоположащим долинам, то для  $g$ -переходов симметричный коэффициент  $K_i$  будет таким же, как будто состояние  $2p_{\pm}$  имеет симметрию триплета ( $T_2$ ). Для  $f$ -переходов, в случае, когда состояние  $2p_{\pm}$  имеет составляющие, например,

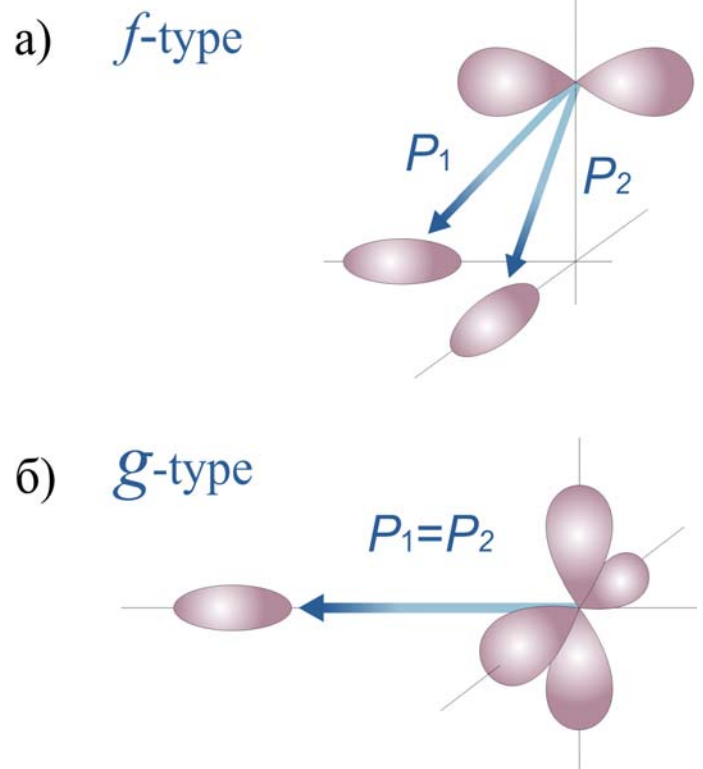


Рис. 9. Ориентация состояния  $2p_{\pm}$  в пространстве и междолинные переходы

лишь  $X$  и  $-X$  долин, полная вероятность перехода будет рассчитываться по следующей формуле:

$$P_{nm}=[(\alpha_1 \cdot \beta_3)^2+(\alpha_1 \cdot \beta_4)^2+(\alpha_2 \cdot \beta_4)^2+(\alpha_2 \cdot \beta_3)^2]P_1+[(\alpha_1 \cdot \beta_5)^2+(\alpha_1 \cdot \beta_6)^2+(\alpha_2 \cdot \beta_5)^2+(\alpha_2 \cdot \beta_6)^2]P_2 \quad (\text{III.4})$$

### 3.2 Междолинная релаксация в Si:P

В кремнии легированном фосфором при генерации стимулированного излучения верхним уровнем рабочего перехода в отсутствии деформации, как отмечено выше, является состояние  $2p_0$ , а нижним – одно из состояний отщепленной группы  $1s(E, T_2)$  (то или другое в зависимости от того, в какое состояние производится накачка) [43]. В деформированном образце верхним уровнем становится  $2p_0(A_1+B_2)$ , нижним –  $1s(B_2)$  [44].

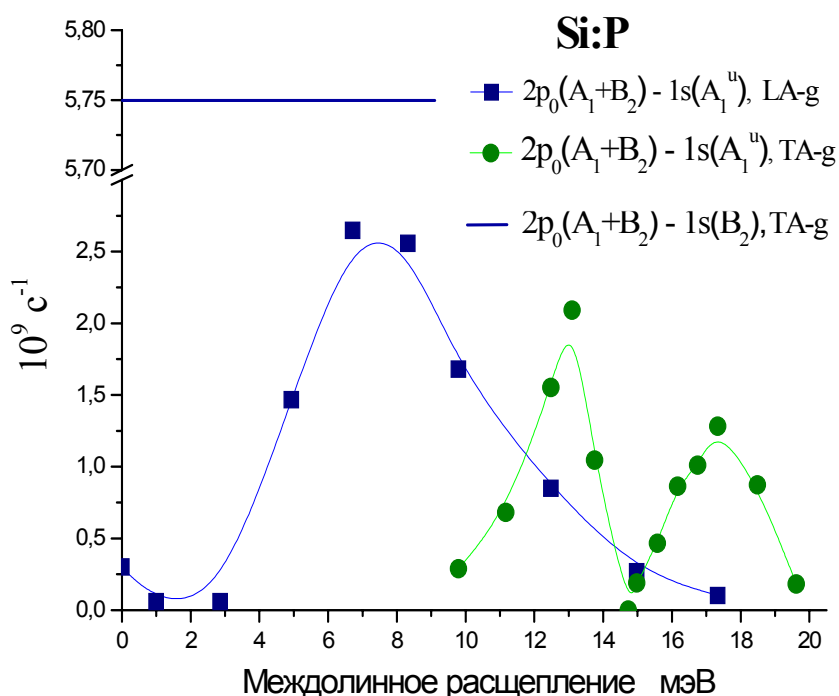
Перейдем к рассмотрению релаксации состояний рабочей пары уровней. Релаксация состояний  $2p_0(A_1+B_2)$  донора фосфора происходит на переходах в состояния  $1s(B_2)$  с излучением  $g$ -фононов,  $1s(B_1)$  и  $1s(E)$  с излучением  $f$ -фононов и в  $1s(A_1^l)$  с излучением как  $f$  так и  $g$ -фононов. Результаты расчета темпов указанных переходов в зависимости от приложенного давления приведены на графиках (рис.10) (давление в 1 кбар соответствует приблизительно междолинному расщеплению 8,5 мэВ).

При изменении давления на образец изменяются энергетические зазоры между уровнями донорного центра, и именно зависимость разности энергий между уровнями от давления главным образом определяет зависимость от давления темпа перехода между рассматриваемыми состояниями с излучением фононов. Так как энергия перехода, как правило, монотонно зависит от давления, то зависимость от деформации темпа релаксации просто отражает его зависимость от энергии перехода в определенном диапазоне энергий. Поэтому, как не трудно заметить, кривые (рис. 10-12), по сути, представляют собой фрагмент зависимостей (рис.5), в которых только энергия

перехода пересчитана в междолинное расщепление и учтена зависимость симметричных коэффициентов от приложенного давления (III.3).

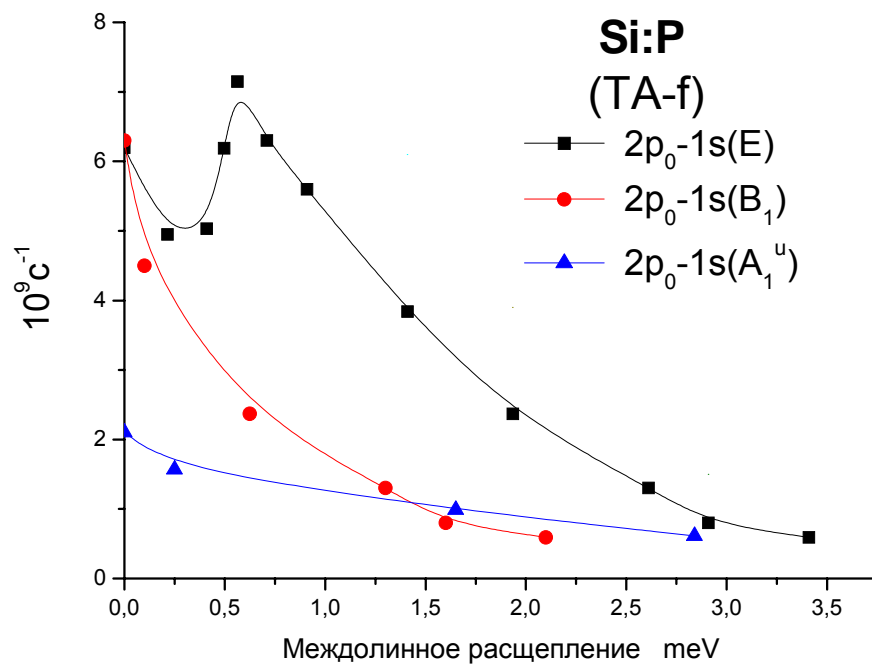
При малых давлениях релаксация состояния  $2p_0$  определяется излучением LA-g фононов на переходе в  $1s(B_2)$  состояние и, как видно из графиков,  $f$ -процессами электрон-фононного взаимодействия. При давлениях свыше приблизительно 400 бар релаксация определяется лишь g-переходами с излучением LA и TA фононов.

На рис.12 представлена зависимость скорости релаксации состояния  $1s(B_2)$  – нижнего состояния рабочего перехода Si:P лазера, в зависимости от приложенного давления. Так как переход происходит между  $1s$  состояниями,

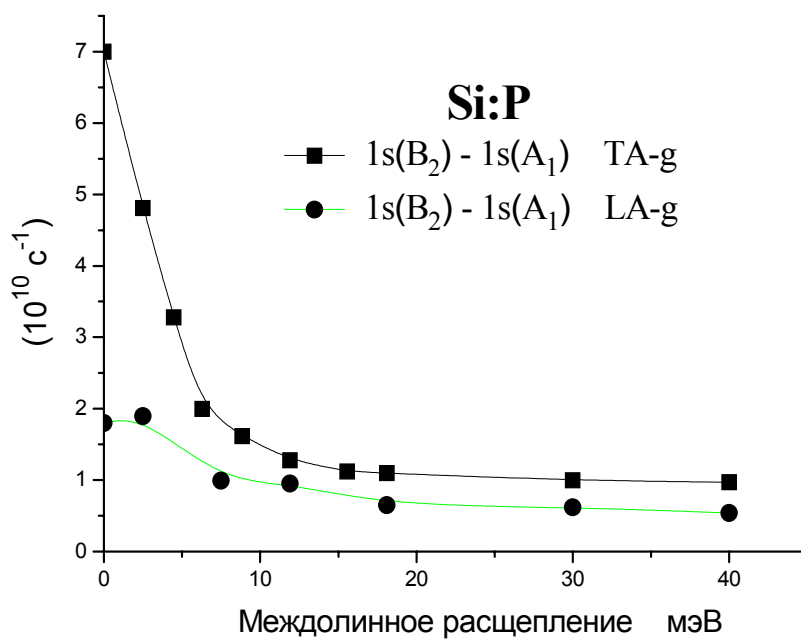


**Рис. 10** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_0$  донора фосфора в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с LA-g и TA-g фононами.

то зависимость темпа от энергии перехода будет иметь вид кривой с одним экстремумом (см. выражение для вероятности излучения фонона I.31, I.32), и зависимость от деформации, соответственно, представляет собой фрагмент уже этой кривой (энергия перехода пересчитывается в междолинное расщепление) с учетом зависимости от давления симметричных коэффициентов (III.3).



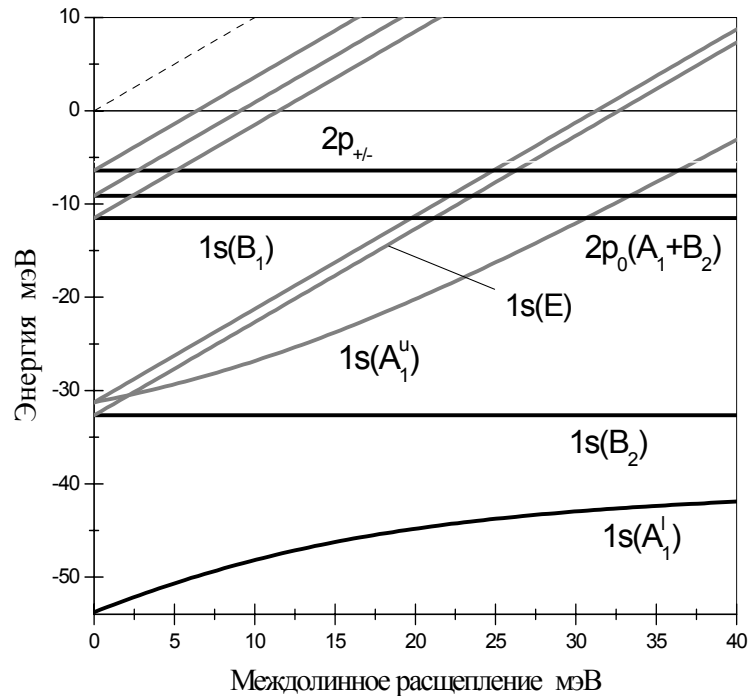
**Рис.11** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_0$  донора фосфора в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с  $TA-f$  фононами.



**Рис.12** Зависимость темпа релаксации состояния  $1s(B_2)$  донора фосфора в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с  $TA-f$  фононами.

### 3.3 Междолинная релаксация в Si:As

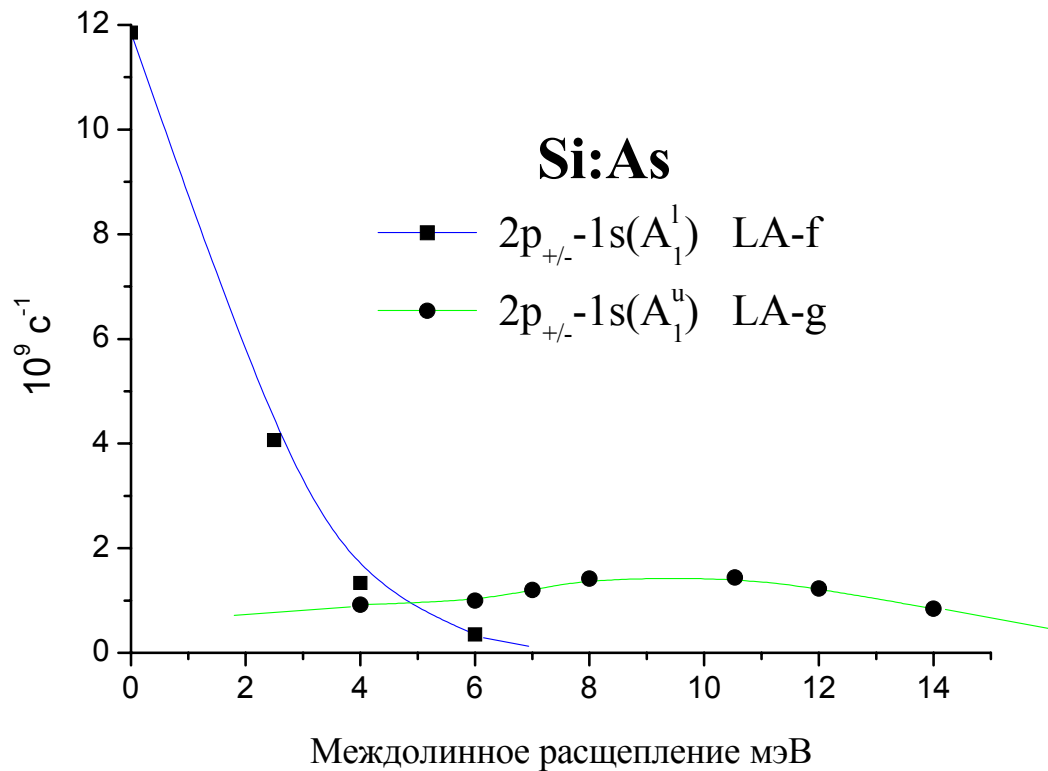
Ниже на [рис.13](#) представлена зависимость энергий состояний донора мышьяка в кремнии от междолинного расщепления (давление приложено в направлении  $\{100\}$ ).



**Рис.13** Зависимость энергии уровней донора мышьяка в кремнии от междолинного расщепления, образующегося в результате одноосного сжатия в направлении  $\{100\}$

В отсутствие деформации в кремнии легированном мышьяком при генерации стимулированного излучения верхним уровнем рабочего перехода является состояние  $2p_{\pm}$ , нижним по-прежнему является одно из состояний отщепленной группы  $1s(E, T_2)$ . Когда же к легированному образцу прикладывается давление, то приблизительно при **0,3 килобарах** излучение начинает происходить из состояния  $2p_0$  (эффект переключения частоты генерации в Si:As), нижним же уровнем рабочего перехода становится состояние  $1s(B_2)$  [46]. Поэтому рассмотрим зависимость от приложенного давления в направлении (100) скоростей релаксации состояний  $2p_0$ ,  $2p_{\pm}$  и  $1s(B_2)$ . Темпы переходов  $2p_{\pm} - 1s(B_1)$ ,  $2p_{\pm} - 1s(E)$  и  $2p_{\pm} - 1s(A_1^u)$  с излучением ТА- $f$  фононов согласно численным расчетам имеют порядок  $10^8 \text{ с}^{-1}$ , т.е. являются пренебрежимо малыми, поэтому на графиках они не отображены ([рис.14](#)). При увели-

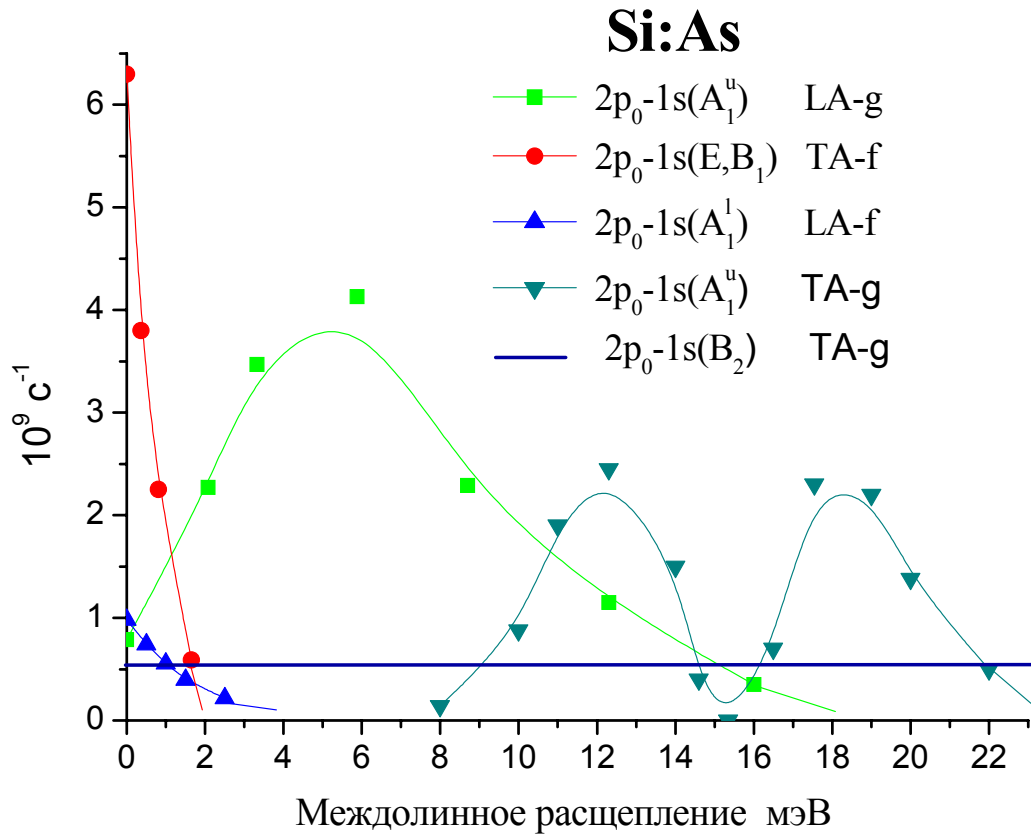
чении давления на образец взаимодействие с  $f$ -фононами подавляется, и при давлениях еще чуть меньших одного килобара, как видно из графика, начинают превалировать  $g$ -процессы взаимодействия электронов с междолинными фононами.



**Рис.14** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_{\pm}$  донора мышьяка в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с  $LA-f$  и  $LA-g$  фононами.

Ниже на графике (рис.15) представлены зависимости от деформации темпов релаксации состояния  $2p_0$  при взаимодействии с различными типами фононов. Из графиков видно, что при малой деформации время жизни состояния  $2p_0$  в основном определяется переходом в  $1s(E)$  состояние с излучением  $TA-f$  фононов, не считая внутримолиновых процессов электрон-фононного взаимодействия. При увеличении давления, как обычно, происходит быстрое подавление релаксации с излучением  $f$ -фононов, и начинают превалировать междолинные  $g$ -процессы электрон-фононного взаимодействия. Взаимодействие с  $TA-f$  фононами на переходе в состояние  $1s(B_1)$  мало

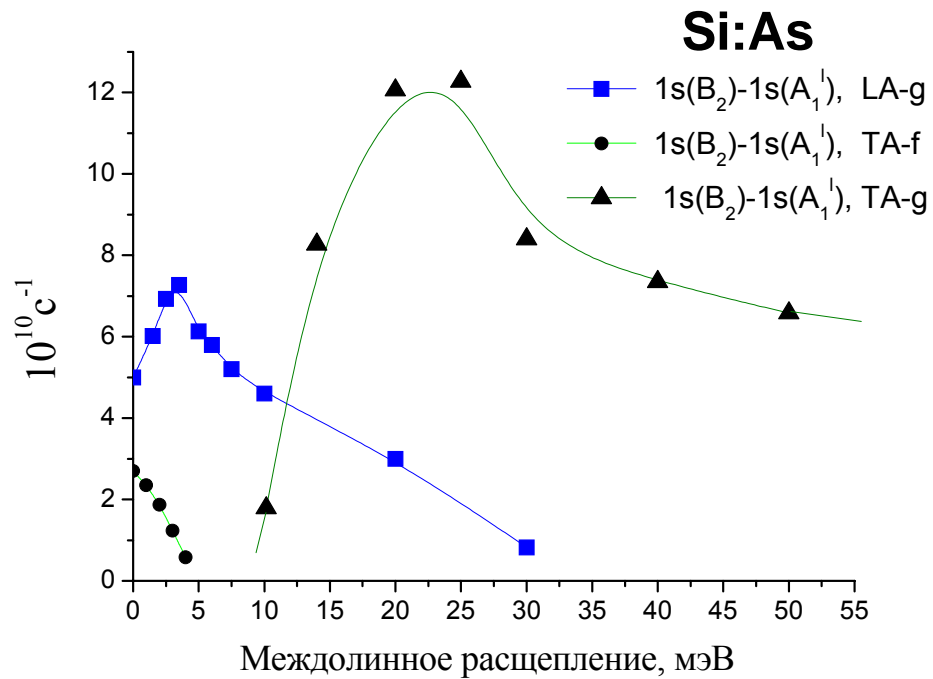
( $\sim 10^8 \text{ c}^{-1}$ ) и не оказывает существенного влияния на время жизни состояния  $2p_0$ , поэтому на графиках этот процесс не отражен.



**Рис.15** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_0$  донора мышьяка в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с LA-f, TA-f, TA-g и LA-g фононами.

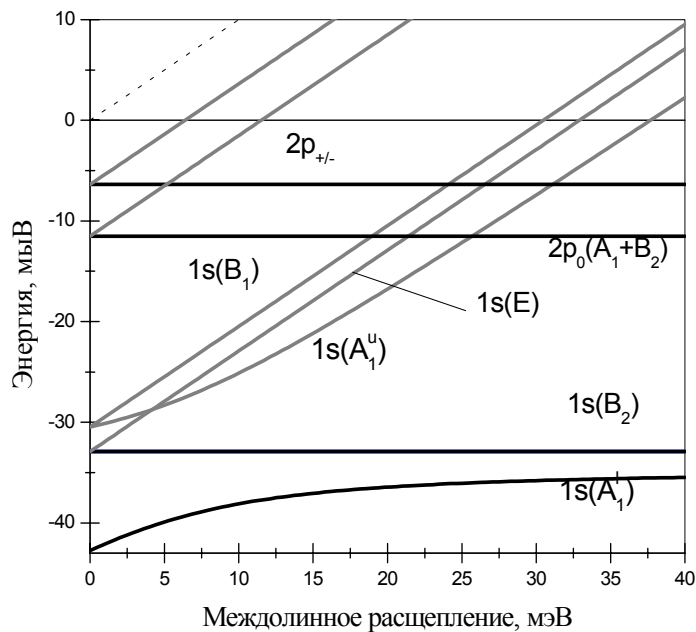
Ниже на [рис.16](#) представлена зависимость от давления релаксации состояния  $1s(B_2)$  на переходе в основное состояние  $1s(A_1^l)$ . Состояние  $1s(B_2)$ , напомним, является нижним состоянием рабочего перехода при генерации стимулированного излучения донорами мышьяка в кремнии. При малых деформациях релаксация данного состояния определяется взаимодействием с LA-g фононами, при увеличении давления, энергия перехода  $1s(B_2) - 1s(A_1^l)$  уменьшается и становится при 2-4 килобарах близкой к энергии TA-g фононов, взаимодействием с которыми в данном диапазоне давлений и определяется время жизни нижнего рабочего состояния.





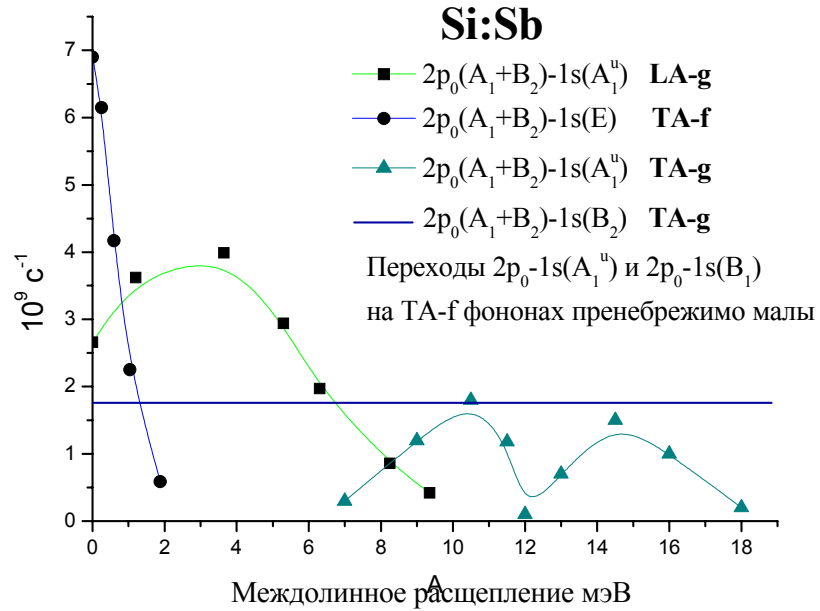
**Рис.16** Зависимость темпа релаксации состояния  $1s(B_2)$  донора мышьяка в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с TA-f и LA-g фононами.

### 3.4 Междолинная релаксация в Si:Sb

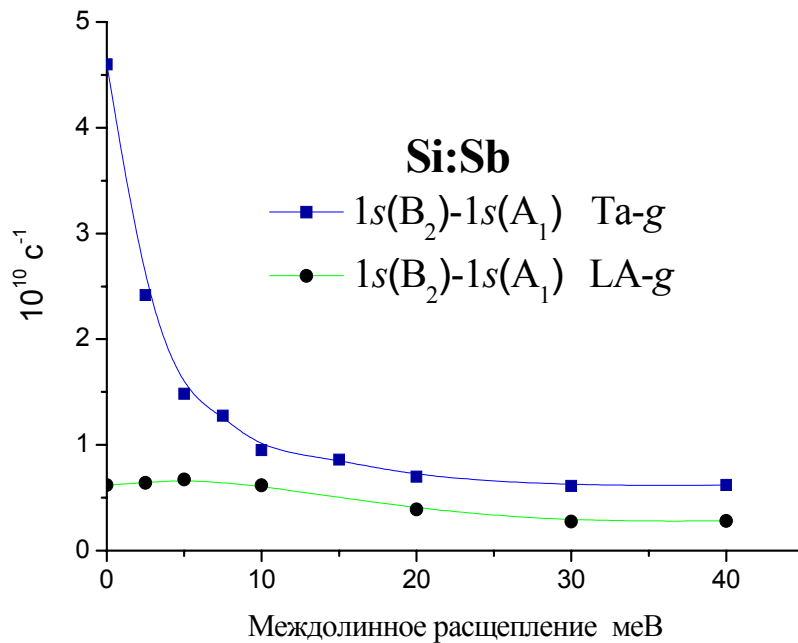


**Рис.17** Зависимость энергии уровней донора сурьмы в кремнии от междолинного расщепления, образующегося в результате одноосного сжатия в направлении  $\{100\}$

Качественно материал Si:Sb по своим свойствам очень близок к Si:P, поэтому сразу просто приведем результаты расчетов по релаксации верхнего и нижнего состояний лазерного перехода в данном материале.



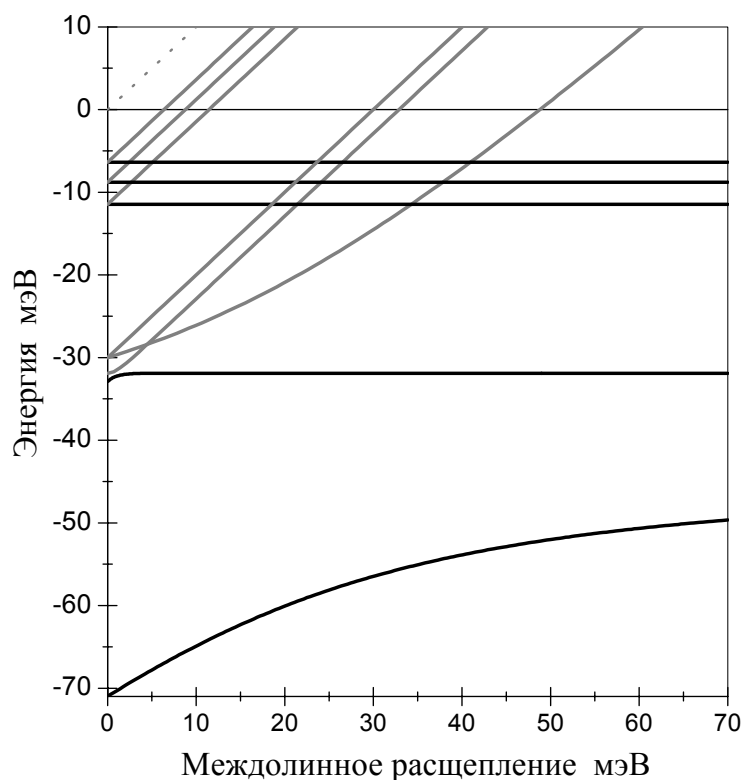
**Рис.18** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_0$  доноров сурьмы в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с TA-f, LA-g и TA-g фонами.



**Рис.19** Зависимость темпа релаксации состояния  $1s(B_2)$  донора сурьмы в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с LA-g и TA-g фонами.

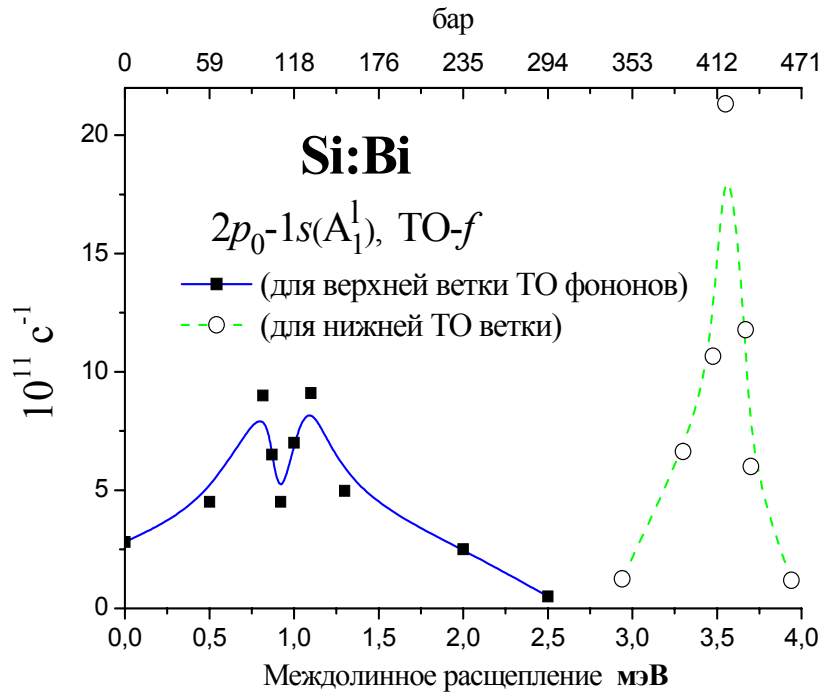
### 3.5 Междолинная релаксация в Si:Bi

Основное состояние донора Bi в кремнии имеет достаточно глубокую по сравнению с другими мелкими донорами глубину залегания, его энергия, отсчитанная от дна зоны проводимости кремния, имеет значение 70.98 мэВ. Это приводит к тому, что имеет место резонансное взаимодействие электронов в состояниях  $2p_0$  и  $2p_{\pm}$  с оптическими фононами на переходе в основное состояние. Как следствие этого, появляются особенности релаксации состояний доноров Bi по сравнению с другими мелкими донорами в кремнии, что проявляется, в частности, в экспериментах при одноосном сжатии легированных висмутом образцов. В отсутствие деформации при накачке CO<sub>2</sub>-лазером генерация происходит на переходе  $2p_{\pm} - 1s(T_2)$  [47]. Состояние  $2p_0$  не является верхним уровнем рабочего перехода, по той причине, что оно быстро релаксирует с излучением TO- $f$  фононов (см. рис. 21).

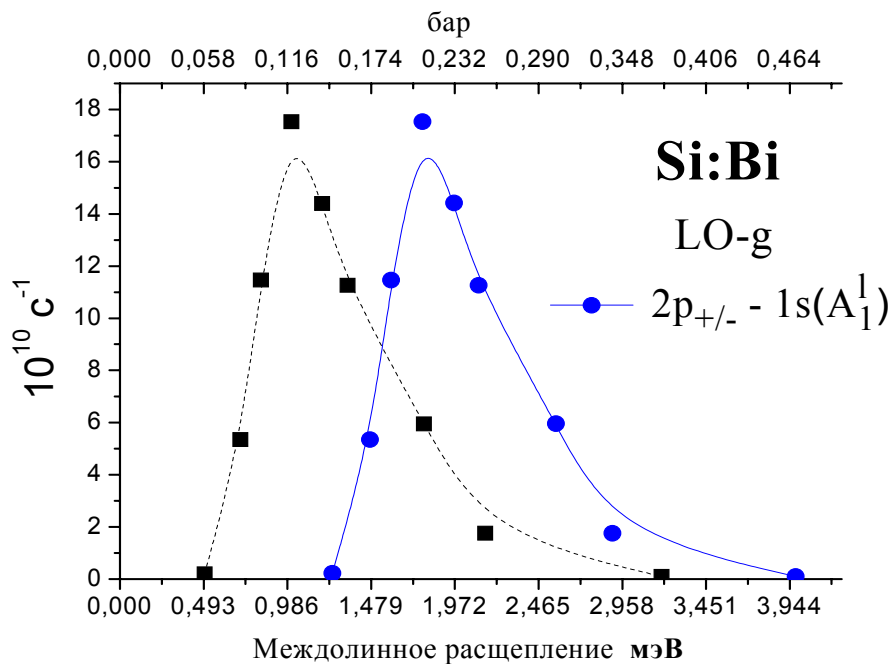


**Рис.20** Зависимость энергии уровней донора фосфора в кремнии от междолинного расщепления, образующегося в результате одноосного сжатия в направлении  $\{100\}$

При давлении  $\sim 100$  бар переход  $2p_{\pm} - 1s(A_1^1)$  вступает в резонанс с LO-g фононами. Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_{\pm}$  на LO-g фононах от приложенного в направлении (100) давления представлена на [рис.\(22\)](#).



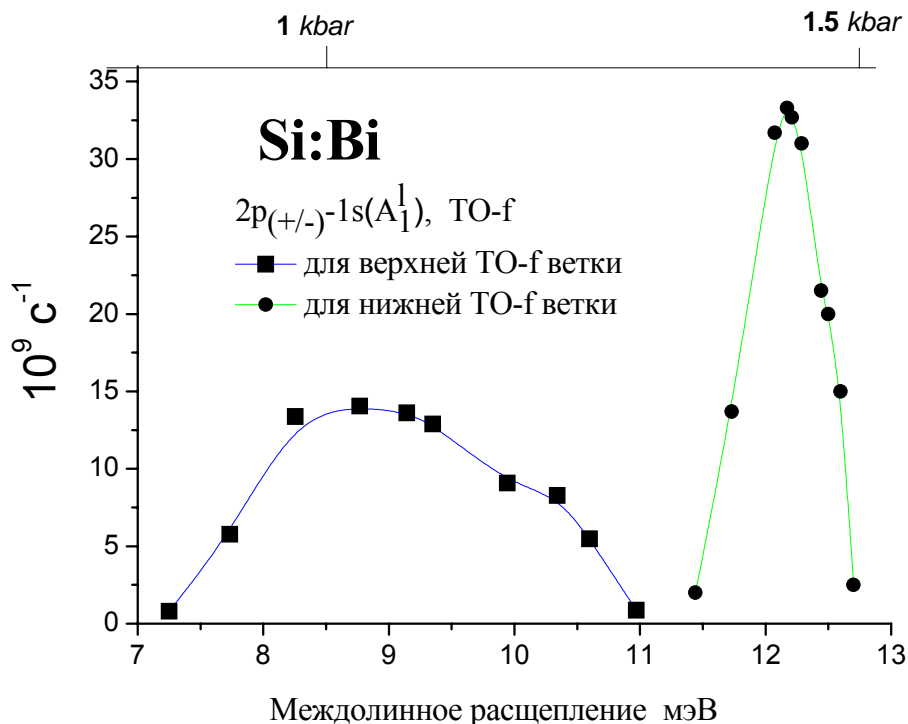
**Рис.21** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_0$  донора висмута в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с TO-f фононами; TO ветвь фононной дисперсионной характеристики в направлении  $\{110\}$  расщеплена, поэтому зависимость рассчитана для взаимодействия с обеими составляющими ветви TO фононов.



**Рис.22** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_{\pm}$  донора висмута в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с LO-g фононами.

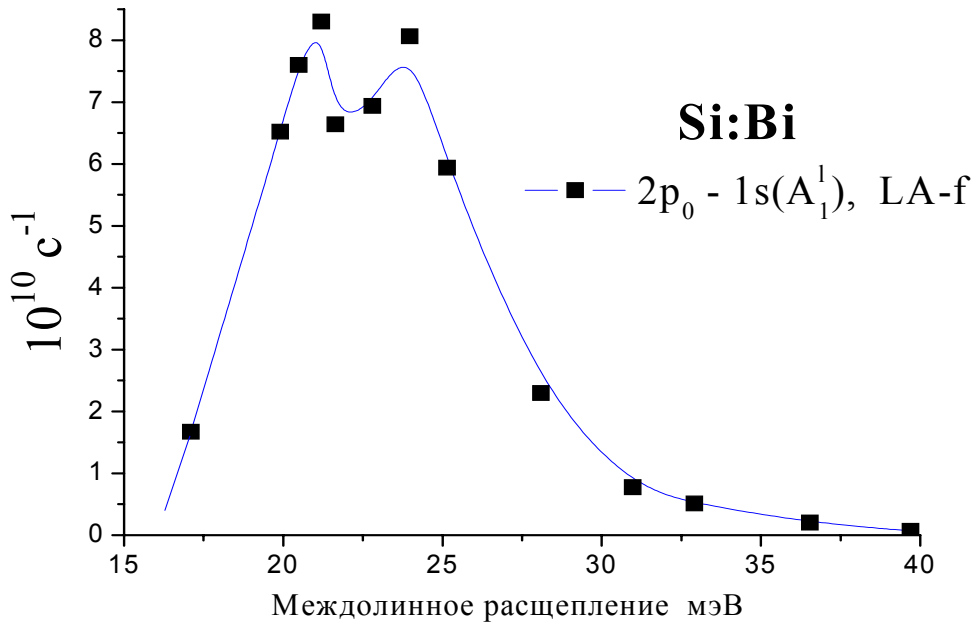
На [рис.22](#) представлены два графика, рассчитанные при различных дисперсионных зависимостях LO-g фононов. Энергия фононов зависит от температуры полупроводника, а используемая при вычислениях дисперсионная зависимость фононов рассчитана для комнатной температуры [48]. Это несущественно для акустических фононов, т.к. они имеют относительно большую групповую скорость и локализованы в достаточно большом диапазоне энергий. Другая ситуация же для оптических фононов: они сосредоточены в относительно не большой области частот, поэтому темп релаксации электронов при взаимодействии с такими фононами сильно зависит от их закона дисперсии. Известно, что при гелиевых температурах энергия фононов возрастает приблизительно на 0,5 мэВ, поэтому левая кривая на [рис.22](#) рассчитана при искусственно сдвинутой дисперсии LO фононов вверх на 0,5 мэВ. Такая кривая более хорошо соответствует экспериментальным данным.

Далее при увеличении давления до 1 кбар наступает резонанс перехода  $2p_{\pm} - 1s(A_1^1)$  с TO-f фононами, которые, согласно расчетам, эффективно оголяют состояние  $2p_{\pm}$  вплоть приблизительно до 1,5 бар ([рис.23](#)).



**Рис.23** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_{\pm}$  донора висмута в кремнии от междолинового расщепления при взаимодействии с TO-f фононами.

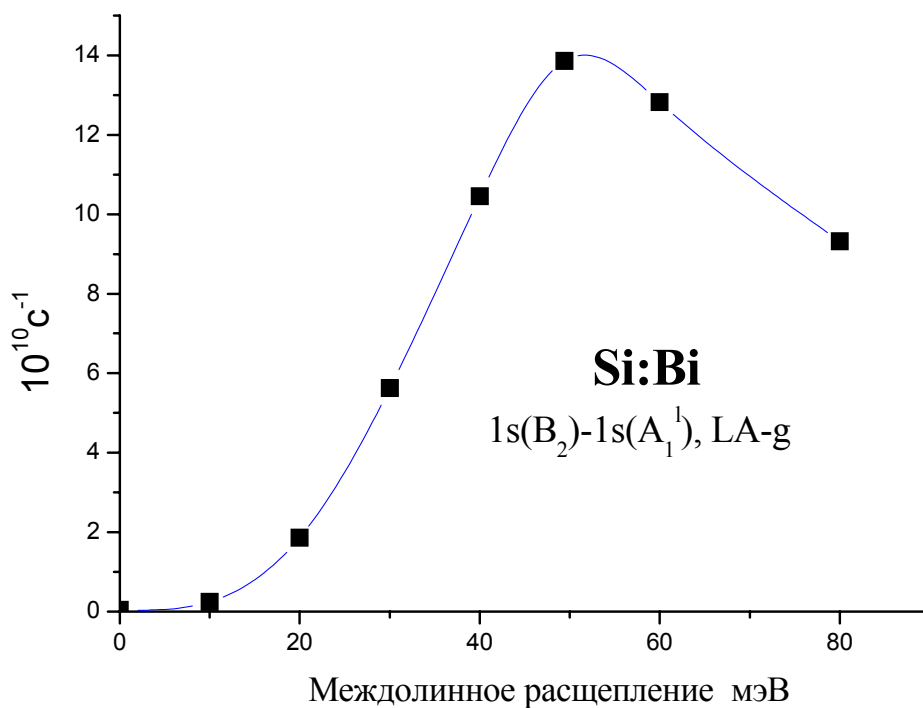
Далее на [рис.24](#) приведен график, характеризующий релаксацию состояния  $2p_0$  при взаимодействии с LA- $f$  фононами.



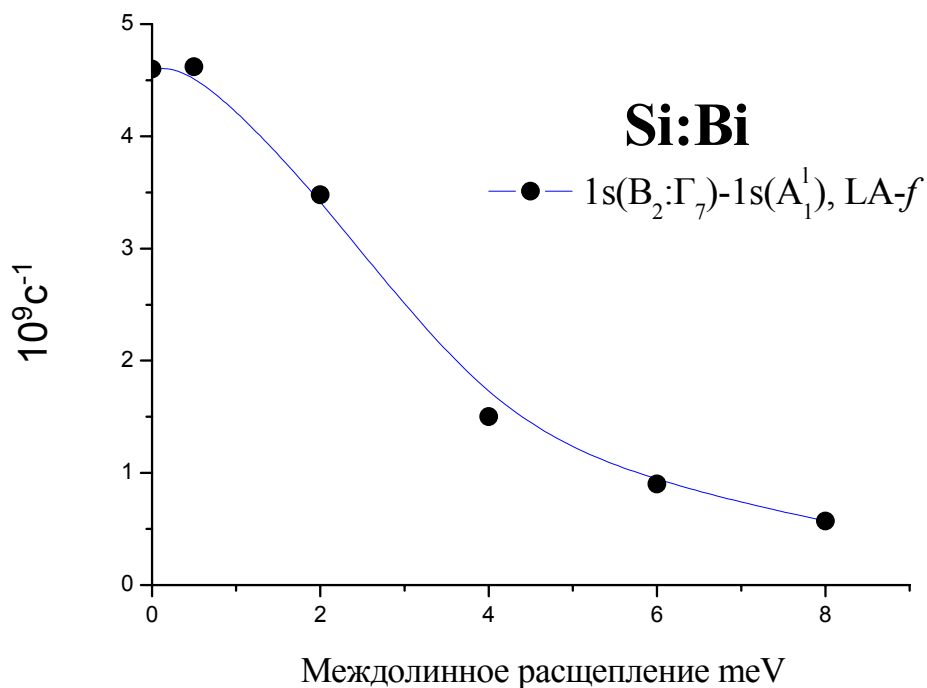
**Рис.24** Зависимость темпа релаксации состояния  $2p_0$  донора висмута в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с LA- $f$  фононами.

При дальнейшем увеличении давления (в области 4-5 килобар) на образец вступает в резонанс переход  $2p_{\pm} - 1s(A_1^1)$  с LA- $f$  фононами. Однако матричный элемент этого перехода оказывается довольно малым, кроме того, при таких давлениях симметричный коэффициент  $f$ -перехода между рассматриваемыми состояниями (см. III.3) тоже становится малым, так что взаимодействие с LA- $f$  фононами не приводит к заметному влиянию на общий темп релаксации состояния  $2p_{\pm}$ .

На [рис.25](#) и [рис.26](#) показана зависимость скорости релаксации нижнего рабочего состояния  $1s(B_2)$ . При малых деформациях время жизни определяется излучением LA- $f$  фононов, взаимодействие с которыми быстро подавляется при увеличении давления, после чего определяющим становится взаимодействие с LA- $g$  фононами. Темп излучения последних растет вплоть до труднодостижимых в эксперименте давлений, приблизительно до 6 килобар.



**Рис.25** Зависимость темпа релаксации состояния  $1s(B_2)$  донора висмута в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с LA-g фононами.



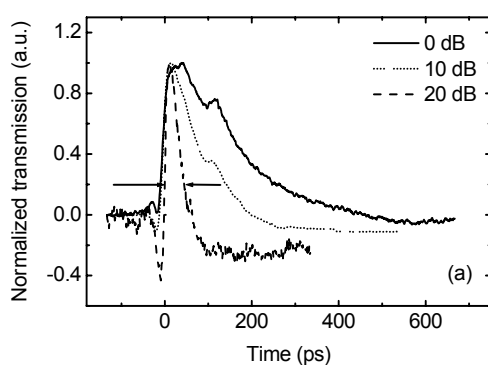
**Рис.26** Зависимость темпа релаксации состояния  $1s(B_2)$  донора висмута в кремнии от междолинного расщепления при взаимодействии с LA-f фононами.

## ГЛАВА IV. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

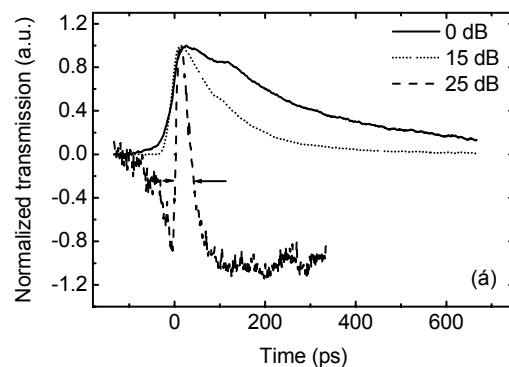
### 4.1 Pump-probe измерения в Si:P и Si:As.

Ниже приведены данные измерений времен жизни состояния  $2p_0$  для доноров P, As и Sb (времена указаны в пикосекундах) [49] (*Шастин и др.*). Измерения проводились оптическим методом пробного импульса с использованием ИК лазера на свободных электронах (FELIX) с импульсом излучения длительностью  $\sim 6$  пс. В основе данного метода лежит измерение зависимости коэффициента прохождения сравнительно слабого пробного импульса излучения от его времени задержки относительно мощного импульса накачки. Излучение накачки и пробного импульса имеют одну и ту же частоту, которая совпадает с частотой перехода из основного состояния кулоновского центра в исследуемое.

На [рис.27](#) представлены результаты измерений времен релаксации доноров P и As при возбуждении оптически разрешенных переходов  $2p_0-1s(A_1)$  и  $2p_{\pm}-1s(A_1)$ . Величина времени жизни определялась на уровне  $1/e$  от максимума положительного отклика при минимально доступном из-за ограничения по чувствительности уровне мощности накачки  $\approx 10^{25}$  квант/см<sup>2</sup>с (ослабление  $\geq 20$  дБ).

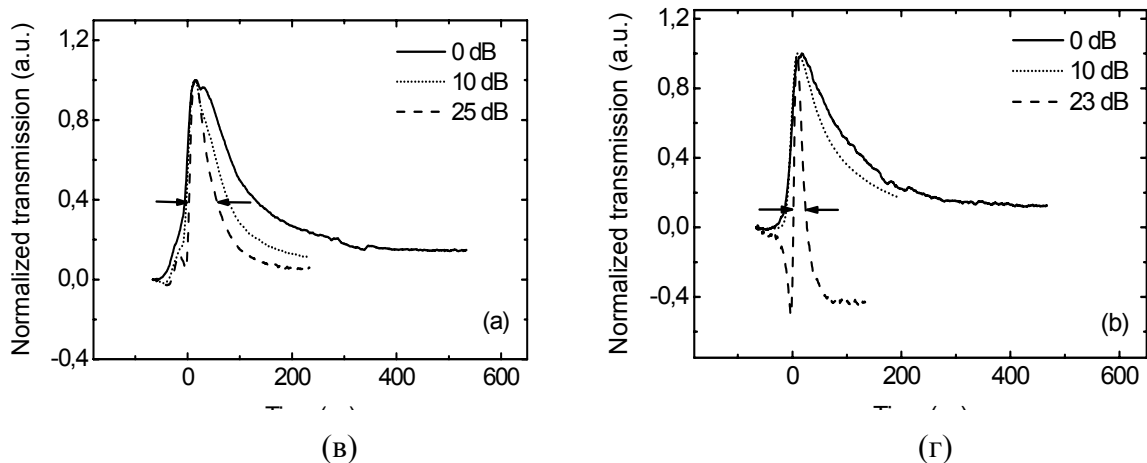


(a)



(б)





**Рис. 27** Сигнал «pump-probe» для Si:P при различных уровнях интенсивности FELIX при накачке: (а) –  $2p_0$ , (б) –  $2p_{\pm}$  и Si:As: (в) –  $2p_0$ , (г) –  $2p_{\pm}$

Таблица 5		
	Si:P	Si:As
Время жизни состояния $2p_0$ (пкс)	$46 \pm 6$	$53 \pm 3$
Время жизни состояния $2p_{\pm}$ (пкс)	$41 \pm 6$	$23 \pm 3$

Существуют Pump-probe измерения времен жизни состояний доноров V группы в кремнии, выполненные другим коллективом [50] (*N. Q. Vinh и др.*). Результаты в последней работе сильно отличаются от результатов [49]. Согласно им время жизни состояния  $2p_0$  в донорах фосфора  $205 \pm 18$  пкс, состояния  $2p_{\pm}$  – 170 пкс, в донорах мышьяка эти времена равняются приблизительно 100 и 120 пкс соответственно. Такое сильное расхождение связано, по-видимому, со сложностью интерпретации экспериментальных данных, т.к. в многоуровневых системах во временных откликах содержатся времена еще каких-то дополнительных процессов, не связанных со временем жизни исследуемого состояния.

Состояние  $2p_0$  мелких доноров в кремнии согласно методу эффективных масс шестикратно вырождено, оно состоит из синглета  $2p_0(A_1)$ , дублета  $2p_0(E)$  и триплета  $2p_0(T_2)$  (см. например [11]). Оптические переходы из синг-

летного ( $A_1$ ) состояния могут приводить к переходам только в синглетные ( $A_1$ ) и дублетные ( $E$ ) состояния, следовательно при накачке системы лазером на свободных электронах возбуждаются состояния  $2p_0(A_1)$  и  $2p_0(E)$ . Приведем ниже расчетные значения времен жизни состояния  $2p_0$  доноров фосфора, сурьмы и мышьяка в кремнии для двух симметрий  $A_1$  и  $E$  (при расчете времени жизни, темп внутривалидных переходов из состояния  $2p_0$  в  $1s$ -состояния с излучением фононов для всех симметрий считался равным  $2 \cdot 10^9$  с<sup>-1</sup>, а для перехода из состояния  $2p_{\pm}$  во все нижележащие состояния –  $1,9 \cdot 10^{10}$  с<sup>-1</sup> [43])

<b>Таблица 6</b> Расчетные времена жизни состояний $2p_0$ и $2p_{\pm}$				
		<b>Si:P</b>	<b>Si:As</b>	<b>Si:Sb</b>
Расчетное время жизни состояния $2p_0$ (пкс)	$A_1$	40	50	50
	$E$	32	56	50
Расчетное время жизни состояния $2p_{\pm}$ (пкс)		52	47	52

Как видно, сравнение в целом показывает достаточно хорошее согласие данных измерений в работе [49] и расчетов. Хотя здесь есть один неприятный момент: согласно расчетам, время жизни состояния  $2p_{\pm}$  получается больше, чем состояния  $2p_0$ , следовательно инверсия на переходе  $2p_0-1s(B_2)$  должна быть меньше чем на переходе  $2p_{\pm}-1s(B_2)$ , а значит последний переход должен был бы быть рабочим при генерации стимулированного излучения, что не соответствует эксперименту. Для объяснения этого несоответствие естественно предположить, что значения междолинных деформационных потенциалов, используемых в расчетах, несколько завышены. Это скажется лишь на времени жизни состояния  $2p_0$ , т.к. его темп релаксации определяется междолинными переходами при взаимодействии с фононами, а релаксация состояния  $2p_{\pm}$  для доноров фосфора – лишь внутривалидными процессами электрон-фононного взаимодействия. Это предположение вполне оправдано, т.к. процедура вычисления междолинных деформационных потенциалов

сложна. Как было отмечено в первой главе, их значения обычно определяются методом подгонки результатов моделирования транспортных свойств полупроводника под экспериментальные результаты. Но так как в рассеянии носителей принимают участие сразу несколько фононных мод, имеющих разные константы связи с электронами, то значения данных констант сложно определить однозначным образом. Действительно, как обсуждалось выше, существует много работ, в которых производилось вычисление междолинных деформационных потенциалов, и их значения в этих работах отличаются довольно сильно (см. *таблицу 1*).

## 4.2 Сравнение со спектральными измерениями

Ниже в *таблице 7* приведены данные спектральных измерений ширины линий поглощения на полувывсоте для донора фосфора в моноизотопном  $^{28}\text{Si}$  и натуральном кремнии со смешанным составом изотопов [51] (*M. Steger и др.*). Данные расчетов времен жизни  $2p$ -состояний донора фосфора более хорошо соответствуют ширинам линий в натуральном кремнии, чем в моноизотопном. Этот факт довольно странен, т.к. отличие ширины линий поглощения в натуральном и моноизотопном кремнии может быть объяснено неоднородным уширением в последнем, что вроде бы не должно сказываться на временах жизни. Это опять приводит к мысли о «завышенности» междолинных деформационных потенциалов. Хотя можно предположить так же, что большие ширины линий в натуральном по отношению к моноизотопному кремнию являются следствием не только неоднородности уширения, но и все же отличия времен жизни состояний доноров. Последнее может быть объяснено рассеянием электронов на изотопах кремния, что приводит к потере симметрии распределения состояния донора по долинам зоны проводимости кремния. А так как спектральные измерения в моноизотопном кремнии отражают времена жизни лишь  $2p_0(E)$  и  $2p_0(A_1)$  состояний (оптический переход  $1s(A_1) - 2p_0(T_2)$  запрещен правилами отбора), то их рассеяние в состояние  $2p_0(T_2)$

приведет к меньшему их эффективному времени жизни, а следовательно и большей ширине линии оптического поглощения.

**Таблица 7.** Частоты линий оптического поглощения на переходах между уровнями донора фосфора в натуральном и моноизотопном кремнии и их ширины на полувысоте ( $\text{см}^{-1}$ ). В скобках указано значение времени жизни в пикосекундах, соответствующее данной ширине линии.

	$^{28}\text{Si}$		$^{\text{nat}}\text{Si}$	
	Energy	FWHM	Energy	FWHM
$2p_0$	275.090	$0.033 \text{ см}^{-1}$ (160,9 пкс)	275.108	$0.082 \text{ см}^{-1}$ (64,75 пкс)
$2p_{\pm}$	315.948	$0.061 \text{ см}^{-1}$ (87 пкс)	315.966	$0.123 \text{ см}^{-1}$ (43,17 пкс)

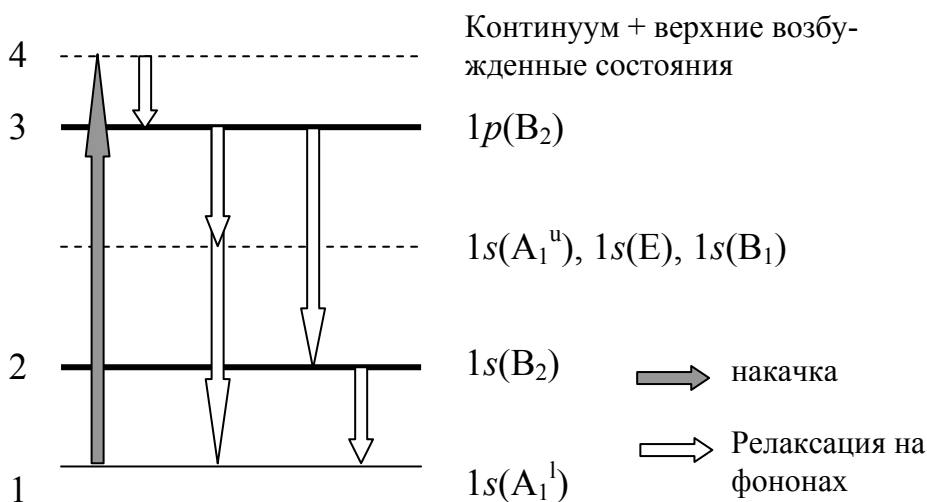
### 4.3 Обсуждение данных измерений в деформированном кремнии

В данном разделе представлены экспериментальные зависимости от приложенного давления в направлении (100) излучения Si:P, Si:Sb, Si:As и Si:Bi – лазеров при различных интенсивностях накачки [45, 46, 52]. Также приведены результаты расчетов зависимостей от деформации полных темпов релаксации для верхнего и нижнего рабочих состояний рассматриваемых мелких доноров в кремнии и разницы населенностей данных состояний при возбуждении донорных центров.

Расчет населенностей состояний проводился в рамках балансных уравнений. Основное различие с точки зрения лазерных характеристик кремниевых образцов, легированных различными мелкими донорами V группы, связано с энергией основного состояния донорного центра. В Si:P и Si:Sb эти энергии достаточно близки, 45,59 мэВ в донорах фосфора и 42,74 мэВ в донорах сурьмы. Следовательно, материалы Si:P и Si:Sb обладают схожими характеристиками, что и наблюдается в эксперименте [45]. Поэтому для данных доноров для построения системы балансных уравнений будем использовать одну и ту же модельную схему релаксации. В случае легирования донорами висмута и мышьяка характеристики образцов различны, но балансные

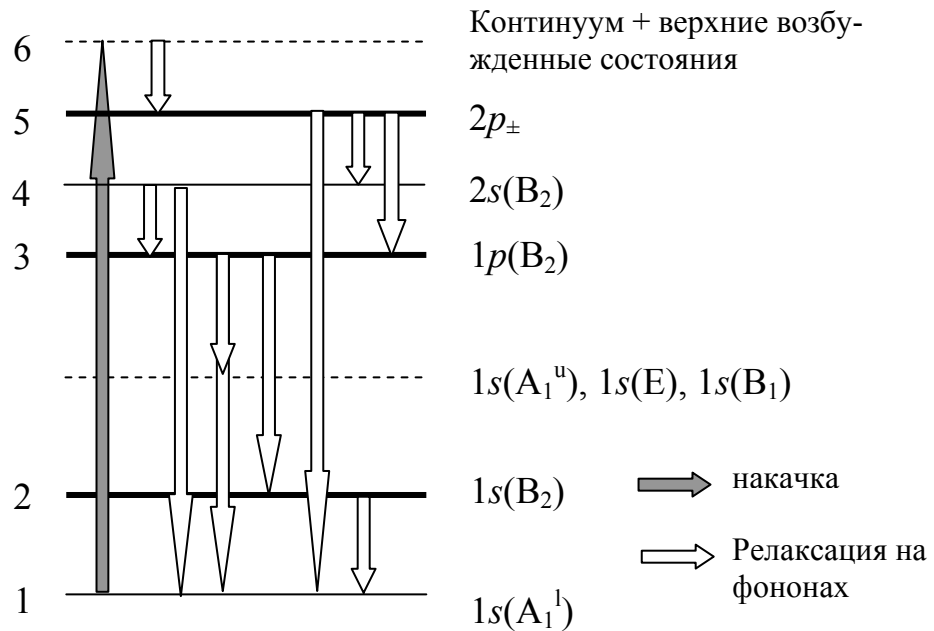
уравнения для них, согласно используемой модели, включают одни и те же уровни энергий и одинаковые характерные переходы между ними.

Для всех рассматриваемых доноров будем считать, что до появления электрона в верхнем состоянии, включенном в систему балансных уравнений (для примесей фосфора и сурьмы это состояние  $2p_0$ , для висмута и мышьяка –  $2p_{\pm}$ ), релаксация происходила каскадным образом, и можно считать, что все электроны, перешедшие под действием оптической накачки в зону проводимости, неизбежно в процессе релаксации проходят через этот верхний уровень. Для примесей фосфора и сурьмы в балансные уравнения были включены 4 уровня:  $1s(A_1^1)$ ,  $1s(T_2)$ ,  $2p_0(B_2)$  и еще эффективный уровень, отвечающий за континуум и верхние возбужденные состояния. Скорость релаксации состояния  $2p_0$  на переходе в состояния  $1s(A_1^u)$ ,  $1s(E)$  и  $1s(B_1)$  всегда, по крайней мере, в несколько раз меньше, чем скорость релаксации последних на переходе в основное состояние  $1s(A_1^1)$ . Поэтому можно считать, что эффективно состояние  $2p_0$  релаксирует сразу на переходе в основное состояние с темпом, равным сумме вероятностей перехода в группу состояний  $1s(A_1^u)$ ,  $1s(E)$  и  $1s(B_1)$ . Наглядно схема релаксации фотовозбуждаемых доноров, используемая при расчете населенностей состояний, для доноров фосфора и сурьмы представлена на [рис. \(28\)](#).



**Рис.28** Схема релаксации носителей в донорах фосфора и сурьмы в кремнии при их оптическом возбуждении

Для доноров мышьяка и висмута в балансные уравнения включены также состояния  $2s$  и  $2p_{\pm}$ , так что всего рассматривается шесть уровней. Схема релаксации для этих доноров выглядит следующим образом:



**Рис.29** Схема релаксации носителей в донорах висмута и мышьяка в кремнии при их оптическом возбуждении

Хотя для доноров висмута время жизни состояния  $2p_0$  определяется в основном переходами в основное состояние  $1s(A_1^1)$  с излучением оптических фононов, и роль эффективного энергетического уровня, связанного с группой состояний  $1s(A_1^u)$ ,  $1s(E)$ ,  $1s(B_1)$ , в процессе релаксации пренебрежимо мала.

### Si:P и Si:Sb

На [рис.30\(а\)](#) и [рис.31\(а\)](#) представлены зависимости от приложенного давления в направлении (100) излучения Si:P и Si:Sb лазеров при различных интенсивностях накачки [45]. Видно, что при деформации происходит сильное уменьшение порога накачки (почти в 100 раз) и увеличение мощности лазерного излучения. На [рис.30\(б\)](#) и [рис.31\(б\)](#) представлены зависимости от деформации полных темпов релаксации верхнего и нижнего рабочих состояний для доноров фосфора и сурьмы соответственно. Анализируя результаты

расчетов, уменьшение при деформации порога генерации в эксперименте можно связать с выключением  $f$ -переходов на фонах из процесса релаксации верхнего рабочего состояния доноров фосфора и сурьмы (см. рис.11). Минимальное значение порога накачки согласно экспериментальным данным для кремния, легированного фосфором, достигается приблизительно при 700 барах (рис.30(а)). Согласно же результатам расчетов максимум инверсии населенностей рабочих состояний находится в области давлений около 450 бар, что совпадает с минимумом темпа релаксации состояния  $2p_0$  (рис.30(б, в)). Дальнейшее увеличение порога и уменьшение интенсивности лазерного излучения при давлениях свыше, чем 1 кбар, связано с увеличением времени жизни нижнего рабочего состояния  $1s(B_2)$  (см. рис. 12, 30(б)). В случае легирования сурьмой экспериментальный минимум порога накачки имеет место при давлении около 750 бар (рис.31(а)). Расчетный же максимум инверсии населенностей находится в районе одного килобара.

Как видно из рисунков расчетная зависимость инверсии от одноосной деформации, вычисленная в простой модели, хорошо согласуется с экспериментальным фактом уменьшения порога накачки и увеличения интенсивности ТГц излучения при одноосной деформации кремния, легированного фосфором и сурьмой. Однако согласно эксперименту при давлениях свыше одного килобара интенсивность излучения должна начать падать и вскоре при дальнейшем увеличении давления стимулированный эффект должен пропасть вовсе, что в недостаточно хорошей степени отражается в результатах расчета. Одной из причин такого расхождения является недостаток теоретической модели, в рамках которой производились вычисления, связанный с используемыми деформационными потенциалами. Считается, что междолинные деформационные потенциалы не зависят от волнового вектора фона. Хотя даже интуитивно понятно, что так можно считать лишь в относительно небольшой области волновых векторов. В то время как при расчете зависимости скорости релаксации состояния  $1s(B_2)$  на переходе

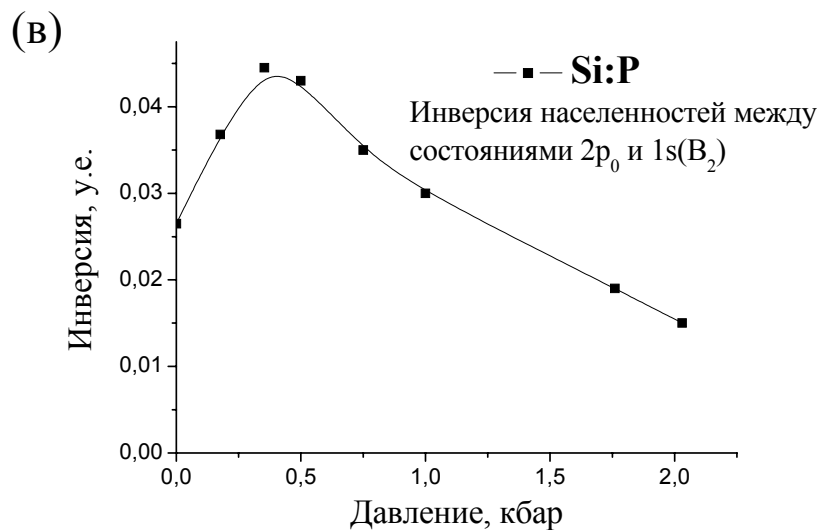
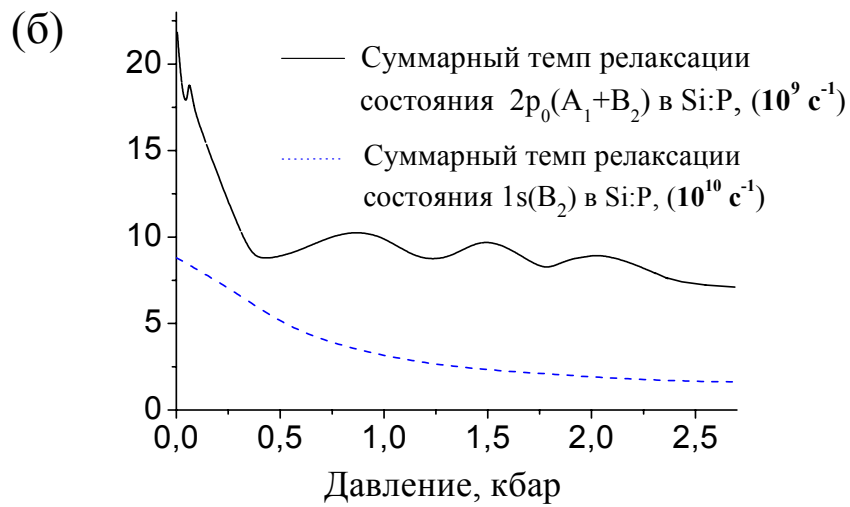
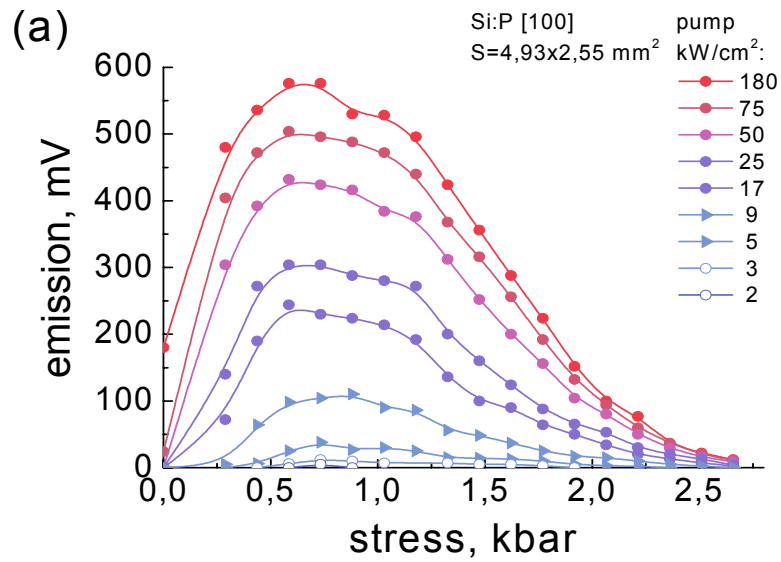


Рис.30 Экспериментальная зависимость излучения Si:P образца в зависимости от деформации в направлении (100) при различных интенсивностях накачки – (а); зависимость от деформации полного темпа релаксации состояний  $2p_0$  и  $1s(B_2)$  – верхнего и нижнего рабочих состояний – (б); зависимость от деформации инверсии населенностей на рабочем переходе – (в).



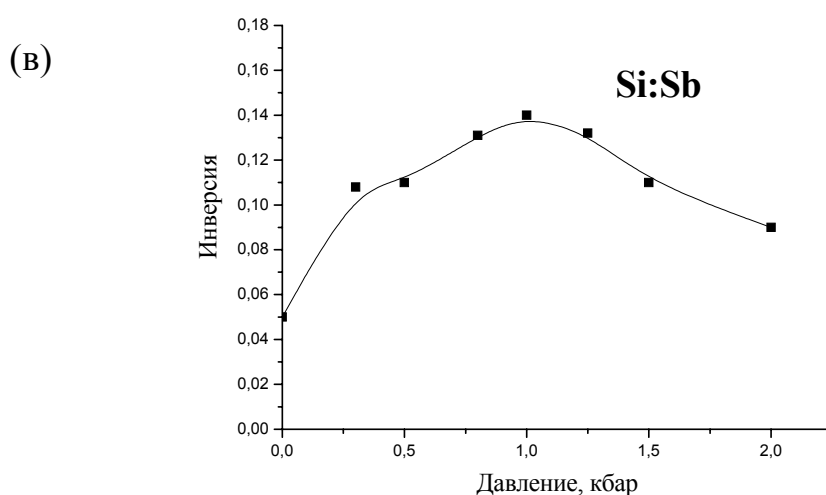
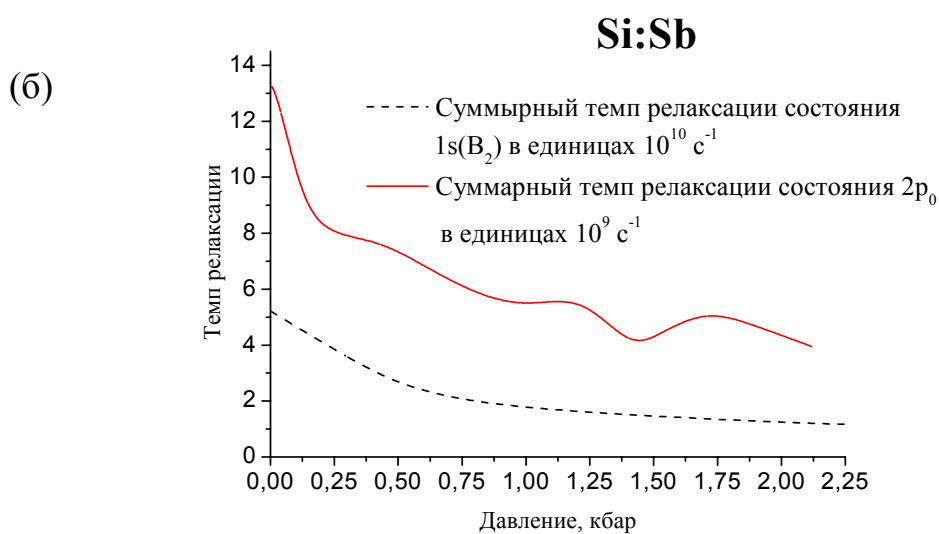
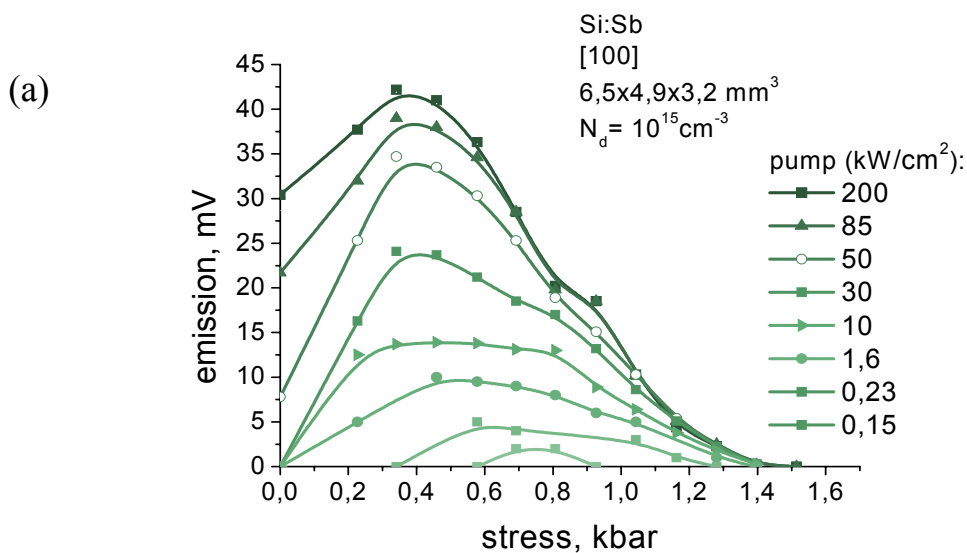


Рис.31 Экспериментальная зависимость излучения Si:Sb образца в зависимости от деформации в направлении (100) при различных интенсивностях накачки – (а); зависимость от деформации полного темпа релаксации состояний  $2p_0$  и  $1s(B_2)$  – верхнего и нижнего рабочих состояний – (б); зависимость от деформации инверсии населенностей на рабочем переходе – (в).

в состояние  $1s(A_1^1)$  от деформации при давлении около двух килобар энергия перехода изменяется приблизительно в два раза, следовательно, длина волнового вектора акустического фонона, участвующего в переходе тоже. Очевидно, в этом случае значение междолинного деформационного потенциала должно заметно измениться, что не учтено в теории. Данный недостаток в теоретическом описании сказывается в основном при расчете переходов между  $1s$ -состояниями, т.к. данные состояния имеют большую локализацию в обратном пространстве, и поэтому значение темпа перехода между ними затухает медленно при уменьшении энергии перехода, а, следовательно, и при увеличении приложенного давления (см. рис.12, 19). Все это приводит, в конечном счете, к тому, что согласно расчетам инверсия населенностей долго не исчезает при увеличении давления даже до значений, при которых в эксперименте никакой генерации уже нет. В Si:P сказанное проявляется не столь сильно, в Si:Sb в заметно большей степени.

С помощью оценки можно показать, что при относительно малых энергиях перехода между состояниями  $1s(B_2)$  и  $1s(A_1^1)$ , что достигается при давлениях больших одного килобара, значение деформационного потенциала взаимодействия с  $g$ -фононами будет меньше, чем используемое, что уменьшит расхождение расчетов и эксперимента. Если энергия фононов, участвующих в междолинном переходе, становится такой, что длина его волнового вектора становится много меньше размера зоны Бриллюэна, то значения деформационных потенциалов будут ближе не к  $D_k$ , используемым в настоящей работе, а к обычным деформационным потенциалам  $E_D$ , с которыми производят расчеты внутримолиновых переходов. Согласно [36] данные потенциалы  $E_D$  для случая взаимодействия с длинноволновыми акустическими фононами даются выражениями:

*Для взаимодействия электронов с продольными акустическими фононами:*

$$E_D = \Xi_d + \Xi_u \cos^2 \theta$$

Для взаимодействия электронов с поперечными акустическими фононами: (IV.1)

$$E_D = \frac{1}{4} \Xi_u \sin 2\theta$$

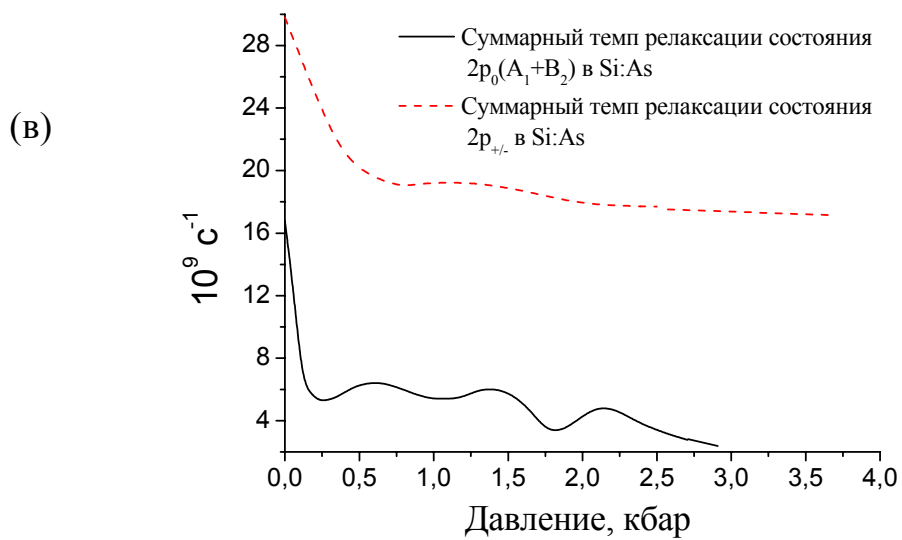
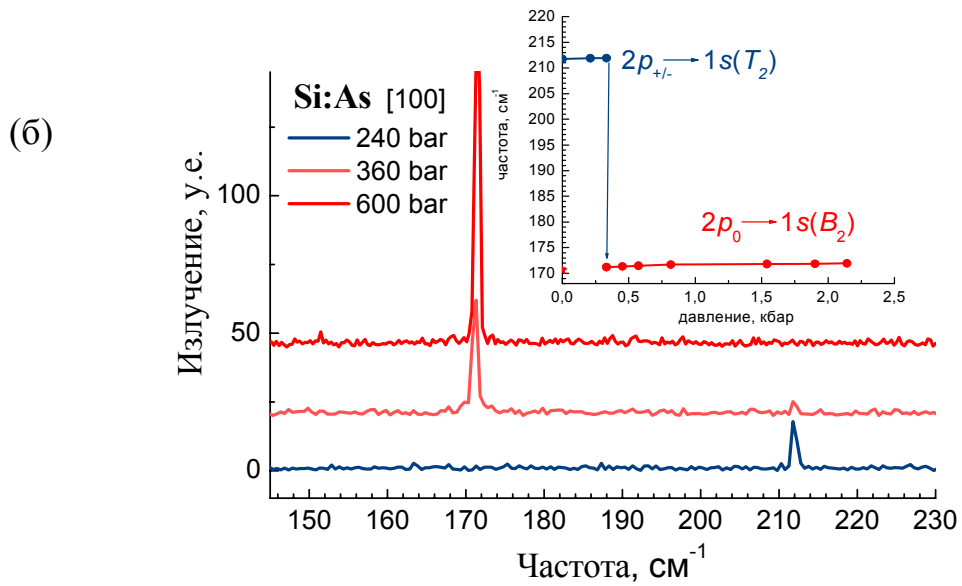
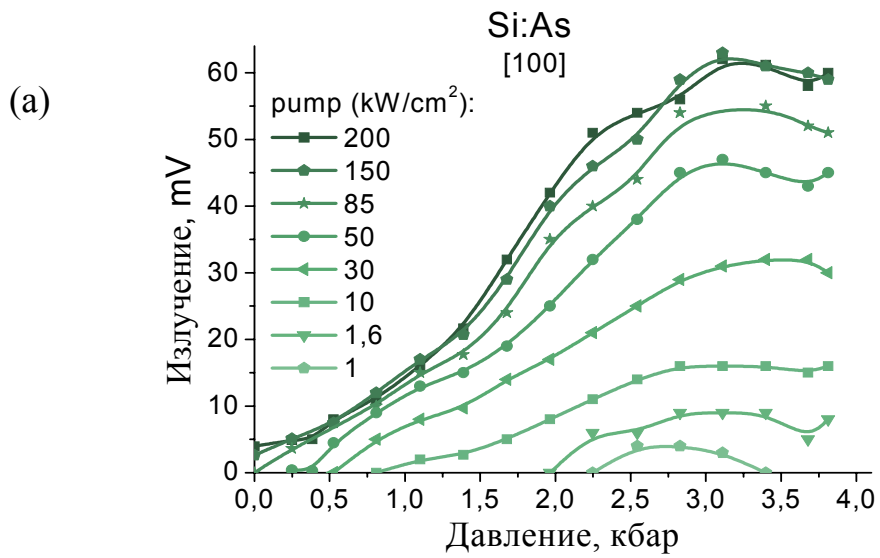
где  $\Xi_u$  и  $\Xi_d$  – константы деформационного потенциала (в кремнии  $\Xi_u=8,77$  эВ,  $\Xi_d=5$  эВ),  $\theta$  – угол между волновым вектором фонона и осью симметрии долины. Как видно потенциалы  $E_D$  в отличие от  $D_i k$  измеряются в эВ, а не в эВ/см, поэтому в формулу (I.16) для матричного элемента междолинного перехода, при взаимодействии с длинноволновыми фононами вместо  $D_i k$  нужно поставлять не  $E_D$ , а произведение  $E_D \cdot q$ , где  $q$  - модуль волнового вектора фонона. Так как в выражение для  $E_D$  входит угол  $\theta$ , то нет возможности вычислить темп релаксации с другим потенциалом, просто сравнив деформационные потенциалы  $E_D$  и  $D_i k$ . Поэтому вычислим новый темп, используя деформационный потенциал  $E_D$ , при определенном значении междолинного расщепления (давления), при котором энергия перехода между состояниями  $1s(B_2)$  и  $1s(A_1^1)$  достаточно мала, чтобы длина волны фонона была много больше постоянной решетки, например, для 40 мэВ (соответствует приблизительно 4,7 кбар) и посмотрим как это скажется на инверсии населенностей при возбуждении донорных центров. Получается так, что при использовании другого деформационного потенциала, время жизни состояния  $1s(B_2)$  в доноре фосфора в кремнии при междолинном расщеплении 40 мэВ возрастает примерно в 1,5 раза, а в доноре сурьмы – в 4 раза. Для кремния, легированного фосфором расчет инверсии в этом случае не дает результата, существенно отличающегося от старого, в случае же легирования сурьмой темп релаксации состояния  $1s(B_2)$  уменьшается как минимум в два раза, что приводит к уменьшению инверсии приблизительно тоже в два раза.

Проделанные оценки показывают, что учет зависимости деформационного потенциала от волнового вектора фонона привел бы к более хорошему согласию с экспериментом. Другим фактором, приводящим к неправильной зависимости времени жизни состояния  $1s(B_2)$ , а, следовательно, и инвер-

сии населенностей, от приложенного давления является то, что короткодействующий потенциал центральной ячейки не учитывался явно при расчете волновых функций  $1s$ -состояний. Он, как описано выше, был учтен лишь косвенно через локализацию волновых функций, используя известное значение энергии состояний. Возможно, истинная волновая функция более плавно зависит от координат, что привело бы к меньшей её локализации в обратном пространстве, а, следовательно, к более быстрому уменьшению темпа релаксации в условиях взаимодействия с междолинными фононами при уменьшении энергии перехода между  $1s(B_2)$  и  $1s(A_1^1)$  состояниями, которое происходит при увеличении давления на образец.

### Si:As

Как было отмечено ранее, в отсутствии деформации в легированном мышьяком кремнии при генерации стимулированного излучения верхним уровнем рабочего перехода является состояние  $2p_{\pm}$ , нижним по-прежнему является одно из состояний отщепленной группы  $1s(E, T_2)$  (при накачке в состояние  $2p_{\pm}$  и выше, нижним состоянием рабочего перехода является  $1s(T_2)$ , в противном случае –  $1s(E)$ ). Когда же к легированному мышьяком кремниевому образцу прикладывается давление в кристаллографическом направлении (100), то уже приблизительно при 300 барах излучение начинает происходить из состояния  $2p_0$  (эффект переключения частоты генерации в Si:As) [46], нижним же уровнем рабочего перехода при деформации является состояние  $1s(B_2)$ , которое образуется из триплетного состояния  $1s(T_2)$  и состоит из вкладов двух долин, лежащих на оси, вдоль которой приложено давление. Согласно расчетам (рис.32(д)) при нулевой деформации образца инверсия на переходе  $2p_{\pm} - 1s(T_2)$  чуть-чуть превышает инверсию на переходе  $2p_0 - 1s(T_2)$ , а переключение происходит почти сразу, при давлениях меньших наблюдаемых в эксперименте 300 бар.



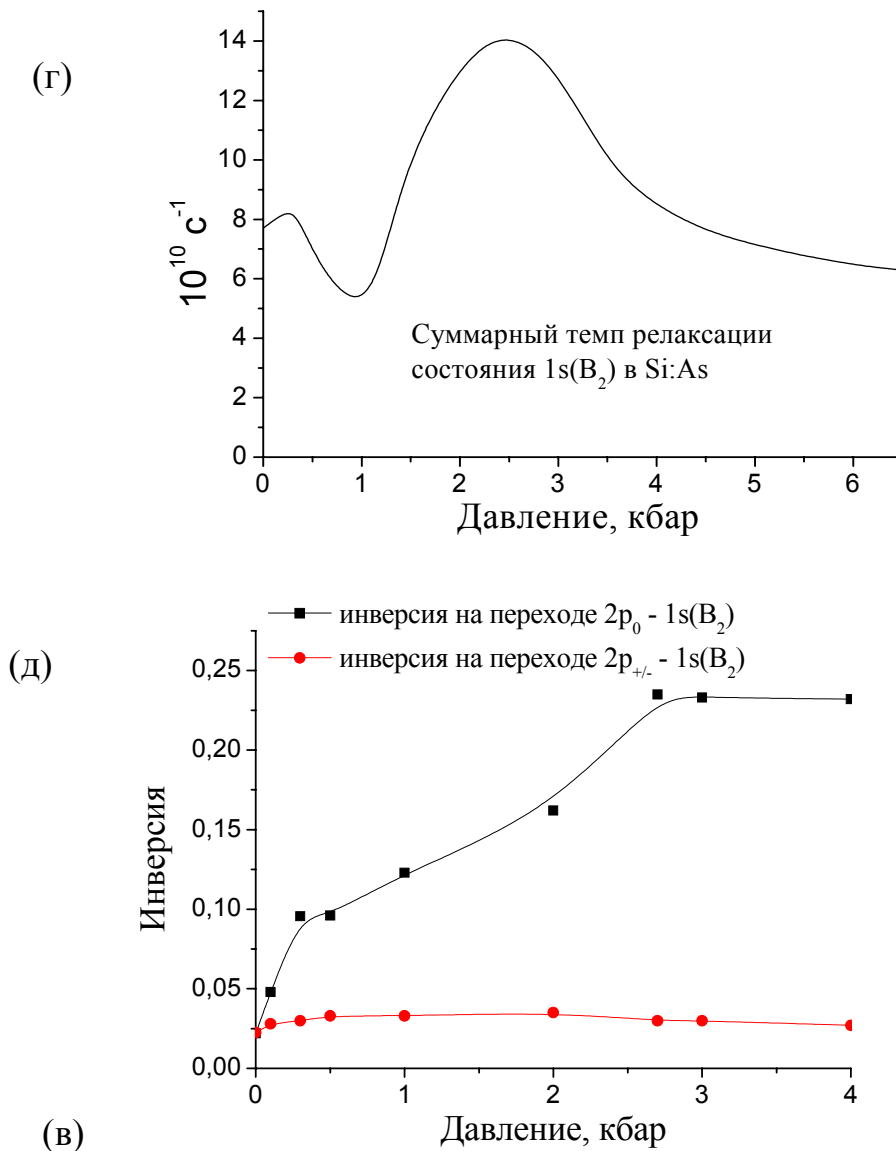


Рис.32 Экспериментальная зависимость излучения Si:As образца в зависимости от деформации в направлении (100) при различных интенсивностях накачки – (а); зависимость частоты генерации от приложенного давления – (б); зависимость от деформации полного темпа релаксации состояний  $2p_0$  и  $2p_{\pm}$ ; зависимость от деформации полного темпа релаксации состояния  $1s(B_2)$  – (г); зависимость от деформации инверсии населенностей на рабочих переходах – (д).

Как видно результаты расчета в целом хорошо соответствуют эксперименту. Отражено уменьшение порога генерации, и экспериментально измеренный минимум порога совпадает с расчетным максимумом инверсии населенностей между состояниями  $2p_0$  и  $1s(B_2)$ . Так же экспериментальный факт переключения частоты генерации при деформации образца тоже отражен в результатах расчета, правда, с небольшим количественным отклонением. Со-

гласно эксперименту изменение рабочего перехода при генерации с  $2p_{\pm} - 1s(B_2)$  на  $2p_0 - 1s(B_2)$  должно происходить приблизительно при 300 барах [46], а в расчетах инверсия на переходе  $2p_{\pm} - 1s(B_2)$  при нулевой деформации преобладает над инверсией на переходе  $2p_0 - 1s(B_2)$  очень незначительно. И при приложении очень маленького давления (~50 бар) населенность состояния  $2p_0$  уже становится выше населенности состояния  $2p_{\pm}$ .

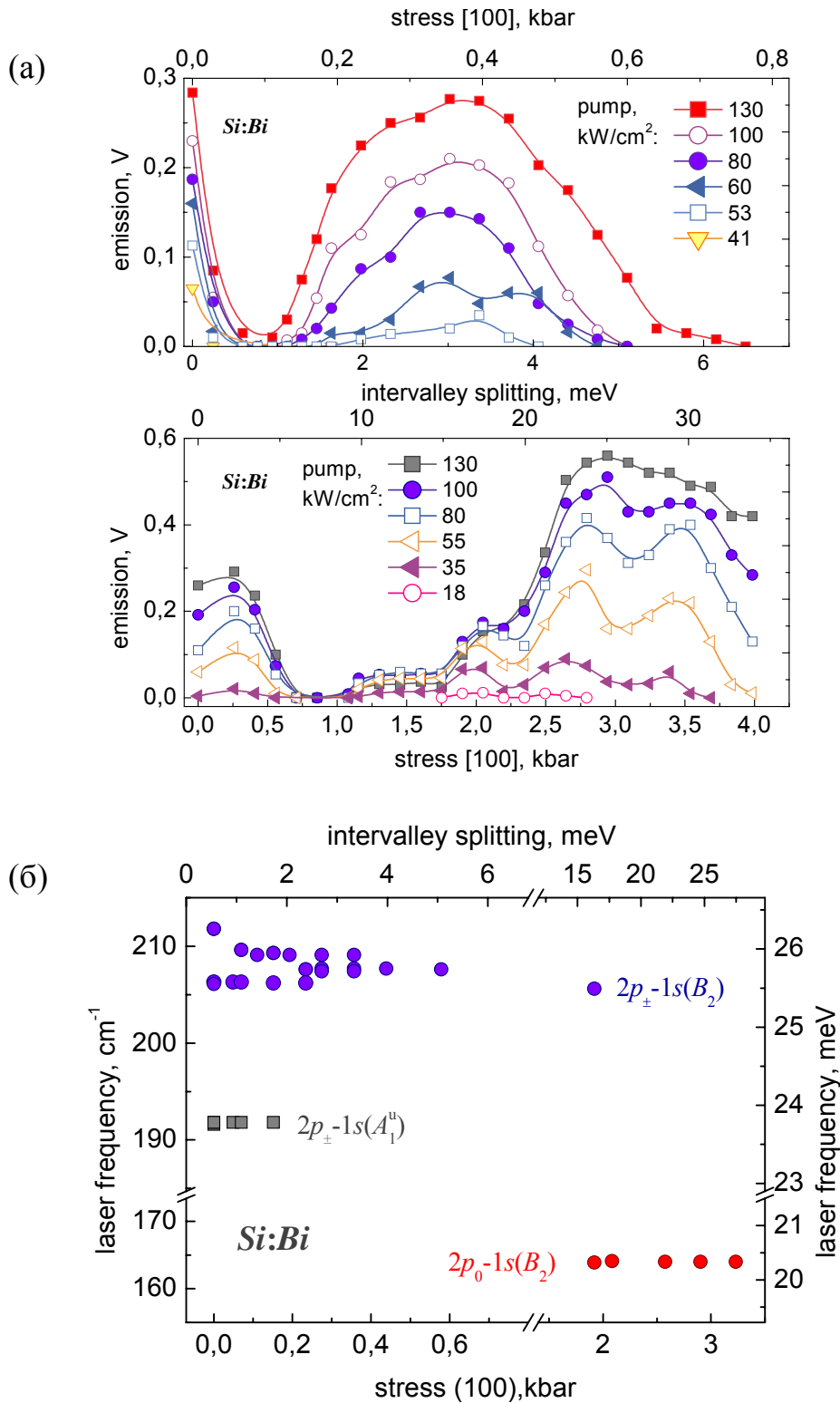
### Si:Bi

На рисунке 33(а) изображена экспериментальная зависимость от давления в направлении (100) интенсивности излучения Si:Bi-лазера при различных значениях интенсивности накачки. Верхний рисунок – лишь фрагмент нижнего, снятый более детально для маленьких давлений [52]. Рис.33(б) показывает зависимость спектра стимулированного излучения в зависимости от деформации, связанной с переключением рабочих состояний Si:Bi-лазера при изменении давления на образец. На рис.33(в), 33(д), показаны расчетные зависимости полных темпов релаксации состояний  $2p_0$  и  $2p_{\pm}$  и зависимость инверсии населенностей на переходах  $2p_{\pm} - 1s(B_2)$  и  $2p_0 - 1s(B_2)$  от одноосного сжатия.

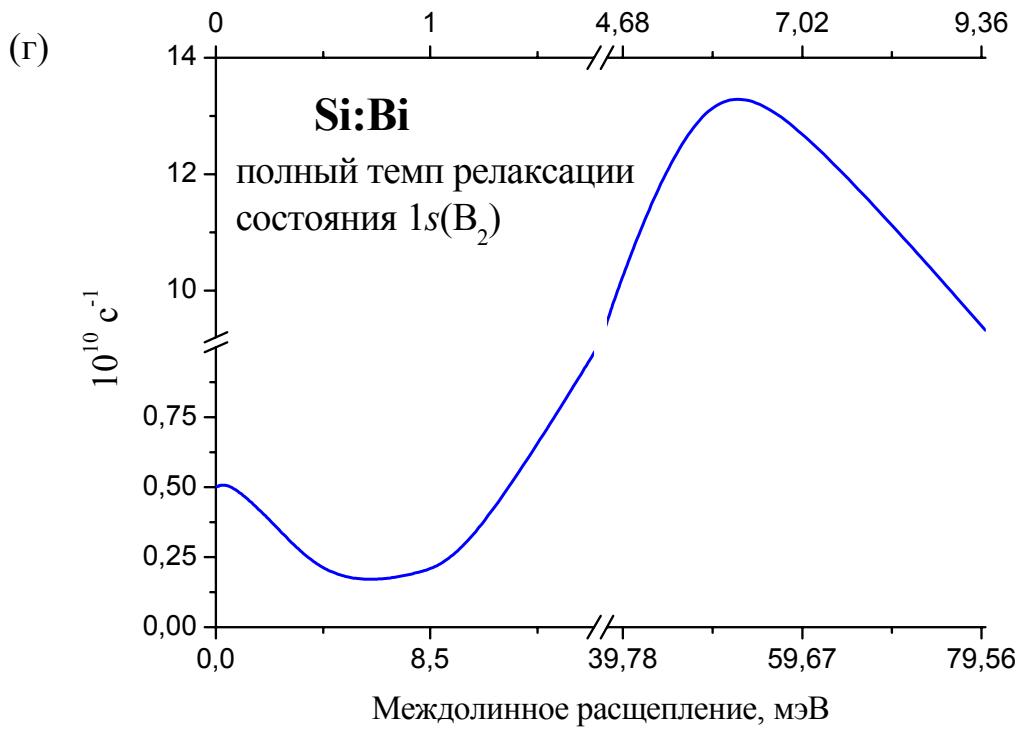
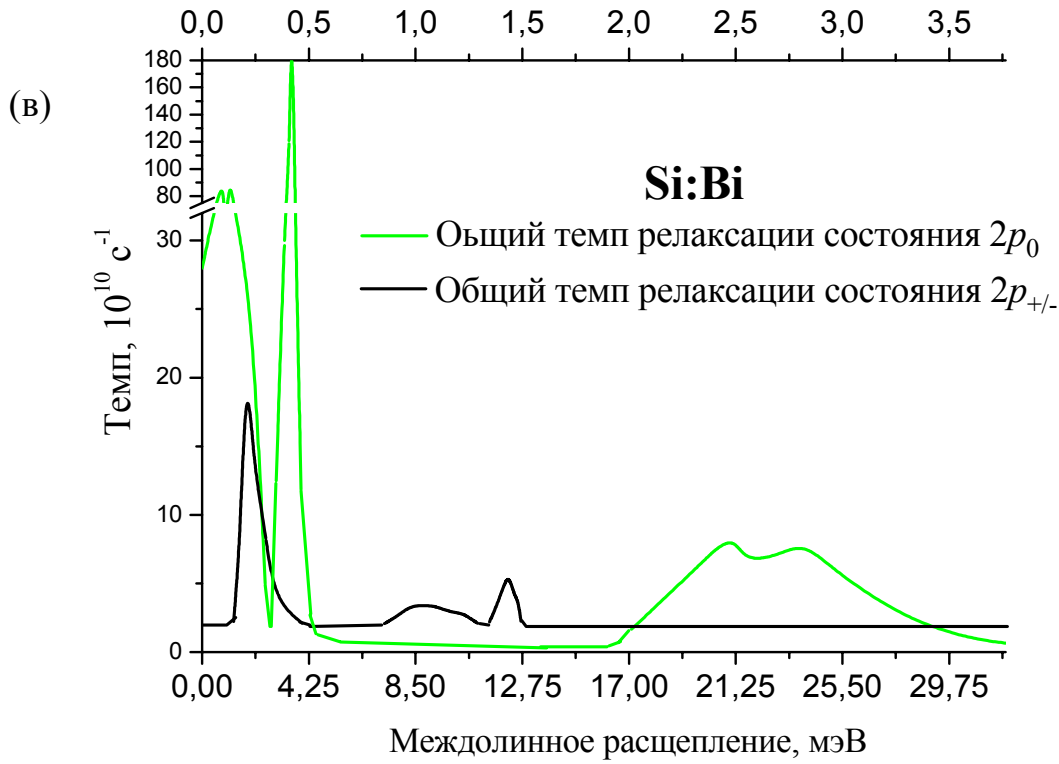
Как было отмечено выше, доноры висмута в кремнии имеют относительно глубокую энергию залегания основного состояния  $1s(A_1^1) - 70,98$  мэВ. Это с одной стороны приводит к тому, что имеет место сильное взаимодействие с оптическими фононами на переходах из возбужденных состояний в основное, с другой – из-за большого энергетического зазора между отщепленными  $1s$  и основным состоянием время жизни нижнего рабочего состояния  $1s(B_2)$  достаточно большое, что сильно определяет зависимость инверсии от деформации кристалла.

На зависимости спектра излучения от давления (рис.33(б)) видно, что при малых деформациях в небольшом диапазоне, приблизительно от 0 до 170 бар, имеет место так же генерация стимулированного излучения на переходе  $2p_{\pm} - 1s(A_1^u)$ . Из соображений симметрии можно сделать вывод, что в этом

случае излучательный переход происходит из  $4\Delta$ -долин состояния  $2p_{\pm}$ , а не из  $2\Delta$ , как всегда полагалось ранее. Здесь мы проигнорируем этот факт, и по-прежнему будем рассматривать только состояния, принадлежащие  $2\Delta$ -долинам кремния.







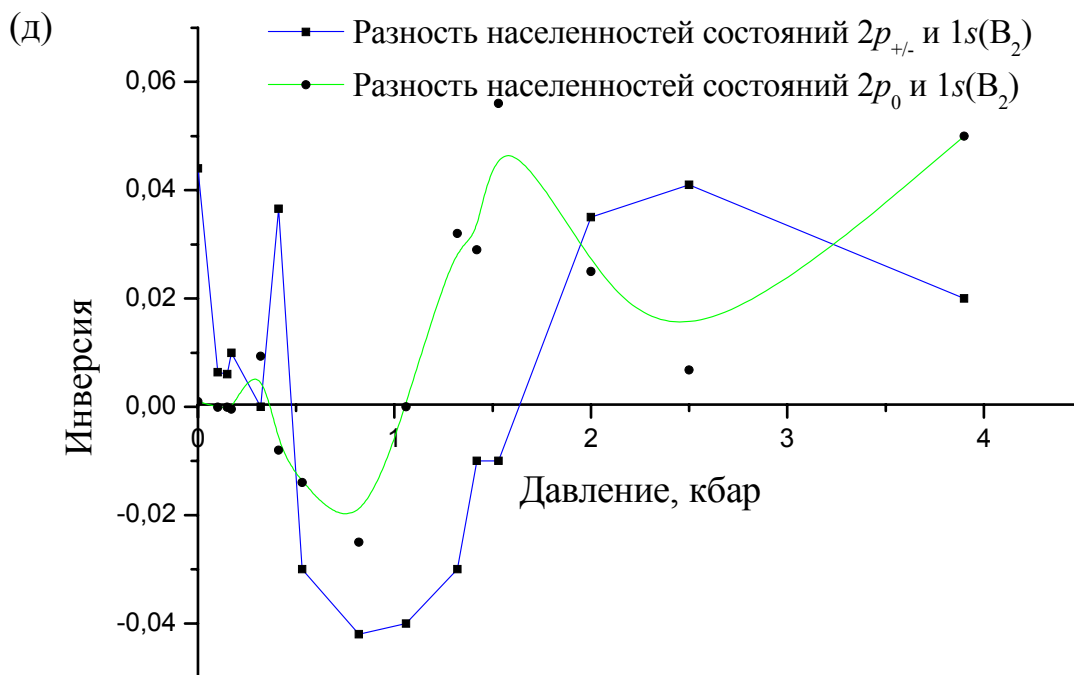


Рис.33 Экспериментальная зависимость излучения Si:Bi образца в зависимости от деформации в направлении (100) при различных интенсивностях накачки (нижний рисунок более детально для маленьких давлений)– (а); зависимость частоты генерации от приложенного давления – (б); зависимость от деформации полного темпа релаксации состояний  $2p_0$  и  $2p_{\pm}$ ; зависимость от деформации полного темпа релаксации состояния  $1s(B_2)$  – (г); зависимость от деформации инверсии населенностей на рабочих переходах – (д).

Расчет инверсии при всех упомянутых договоренностях и допущениях хорошо объясняет отсутствие генерации в узком диапазоне давлений в окрестности 100 кбар. Это связано с быстрой релаксацией состояния  $2p_{\pm}$  в данной области давлений при взаимодействии с LO-g фононами (излучательный переход не осуществляется из состояния  $2p_0$ , т.к. населенность данного состояния подавляется сильным взаимодействием донорных электронов с TO-f фононами на переходе в основное состояние  $1s(A_1^1)$ ). Далее при давлениях от 0,7 до 1 килобара согласно зависимости на [рис.33\(а\)](#) генерация вообще отсутствует. Хотя по расчетам в этой области давлений взаимодействия с оптическими фононами нет, т.к. переход  $2p_0 - 1s(A_1^1)$  уже вышел из резонанса с TO-f фононами, а  $2p_{\pm} - 1s(A_1^1)$  – с LO-g, а резонанс последнего перехода с TO-f

фононами еще не наступил. Казалось бы такая ситуация должна привести к увеличению населенностей  $2p$  состояний, а следовательно и инверсии, но большое время жизни нижнего рабочего состояния  $1s(B_2)$  и отсутствие быстрого прямого канала релаксации  $2p$  состояний при взаимодействии с оптическими фононами с переходом сразу в основное состояние, минуя нижнее рабочее состояние, приводит к сильному заселению последнего, и инверсия пропадает. Сказанное отражено на расчетной зависимости инверсии от приложенного давления [рис.33\(д\)](#) и полностью соответствует эксперименту.

При увеличении давления приблизительно от 0,8 килобар начинается взаимодействие электронов в состоянии  $2p_{\pm}$  с  $TO-f$  фононами на переходе в основное  $1s(A_1^1)$  состояние. Это ведет к тому, что меньше электронов в процессе релаксации попадают в  $1s(B_2)$  состояние, в результате чего его населенность начинает уменьшаться, и около одного килобара появляется инверсия населенностей на переходе между  $2p_0$  и  $1s(B_2)$  состояниями (населенность состояния  $2p_0$  больше населенности состояния  $2p_{\pm}$  при данных давлениях, т.к. полный темп релаксации последнего больше). Далее до давлений примерно 1,5 килобара инверсия на данном переходе продолжает расти за счет того, что уменьшается время жизни состояния  $1s(B_2)$  из-за взаимодействия с  $LA-g$  фононами на переходе в основное состояние донора. По той же причине растет и инверсия на переходе  $2p_{\pm} - 1s(B_2)$ . В области давлений приблизительно от 2 до 3,2 килобар согласно вычислениям электроны в состоянии  $2p_0$  начинают эффективно взаимодействовать с  $LA-f$  фононами на переходе в состояние  $1s(A_1^1)$ . Это приводит в расчетах к превалированию инверсии на переходе  $2p_{\pm} - 1s(B_2)$ . В эксперименте же связанное с этим явное переключение частоты генерации в данном интервале давлений не наблюдается, хотя в спектральных измерениях на [рис.33\(б\)](#) можно видеть, что приблизительно при двух килобарах наряду с генерацией на переходе  $2p_0 - 1s(B_2)$  присутствует так же генерация на переходе  $2p_{\pm} - 1s(B_2)$ , поэтому, если честно, трудно сказать насколько хорошо расчеты инверсной населенности состояний донора в данном диапазоне давлений согласуются с действительностью.

В данном разделе проведена попытка объяснить экспериментальные зависимости интенсивности лазерного излучения мелкими донорами в кремнии от приложенного одноосного сжатия в направлении (100), опираясь исключительно только на времена жизни примесных состояний. Но справедливости ради стоит сказать, что существуют другие факторы, определяющие вид данных зависимостей. Это могут быть, например  $D^-$  – центры, энергия которых изменяется в зависимости от деформации, следовательно, изменяется и поглощение ими лазерного излучения. Потом в расчетах рассматривались лишь спонтанные процессы излучения фононов на переходах между состояниями мелких доноров. Хотя времена жизни некоторых неравновесных фононных мод могут быть довольно большими (неравновесные фононы имеют конечное время жизни вследствие распада из-за ангармонизма колебаний кристаллической решетки) (см. например [53, 54]), что должно привести к большому населению данных мод и возникновению индуцированных процессов электрон-фононного взаимодействия. Так же следует сказать несколько слов по поводу захвата возбужденных в зону проводимости носителей заряда на ионизированный центр. В расчетах полагалось, что захват вначале происходит каскадным образом, т.е. каждый фотовозбужденный электрон неизбежно оказывается в процессе релаксации на верхнем рабочем уровне лазерного перехода. Хотя при некоторых условиях возможны так же процессы прямого захвата с переходом сразу в основное состояние мелкого донора с излучением оптического фонона. При изменении давления на образец изменяется и энергия основного состояния, а, следовательно, и вероятность такого прямого захвата. Такие процессы могут сильно изменить вид рассматриваемых зависимостей лазерного излучения от деформации образца.

## Заключение

### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Проведены теоретические расчеты и дана сравнительная оценка времен низкотемпературного распада всех тех состояний доноров V группы в кремнии (фосфор, сурьма, мышьяк, висмут), которые определяют стимулированное излучение указанных центров замещения при их оптическом возбуждении. Показано, что доминирующим механизмом такого распада является междолинное рассеяние связанных электронов, сопровождаемое излучением фононов.

2. Показано, что  $f$ -процессы электрон-фононного взаимодействия дают значительный вклад в общий темп релаксации состояний мелких доноров в кремнии. Во многих случаях взаимодействие с междолинными  $f$ -фононами является определяющим в релаксации возбужденных состояний доноров.

3. Показано, что химический сдвиг энергии основного состояния, связанный с потенциалом центральной ячейки, определяет тип фононов ответственных за распад состояний  $1s(E, T_2)$ , являющихся нижними состояниями рабочего перехода лазера на мелких донорах в недеформированном кремнии.

4. Показано, что энергетический сдвиг  $1s(E, T_2)$  – состояний, обусловленного влиянием потенциала центральной ячейки, ведет к сильному отличию скорости релаксации состояния  $2p_0$  доноров V группы в кремнии при излучении TA- $f$  и LA- $g$  фононов.

5. Получены теоретические зависимости темпов низкотемпературной релаксации возбужденных состояний доноров V группы в кремнии от одноосной деформации сжатия кристалла в кристаллографическом направлении  $\{100\}$ . Показано, каким образом и почему связанное с деформацией смещение долин зоны проводимости и соответствующее изменение энергий и волновых функций связанных состояний электронов изменяет внутрицентровые процессы распада возбужденных состояний мелких доноров.

6. Полученные данные расчетов по временам распада возбужденных состояний доноров позволили дать количественную оценку населенностей состояний рабочих переходов в кремниевом лазере на донорах V группы и объяснить большинство наблюдаемых особенностей в экспериментальных зависимостях частоты и интенсивности стимулированного излучения от деформации кристалла.

В заключение хочется выразить благодарность научному руководителю В.Н. Шастину за предложенную тему исследований, помощь в решении поставленных задач, а так же навыки научных исследований, приобретенные в течение совместной работы. Так же хочется поблагодарить Р.Х. Жукавина, К.А. Ковалевского за совместные обсуждения физики мелких доноров. Выражается благодарность В.И. Гавриленко за чтение диссертации и критические замечания, позволившие улучшить содержание диссертации.

## ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мурашов, М.С.. О временных задержках генерации излучения в лазерных диодах на основе халькогенидов свинца. // М.С. Мурашов, А.П. Шотов. // Квантовая электроника. – 1995. Т.22, №12. – С. 1255-1256.
- [2] V.I. Gavrilenko. Negative mass cyclotron resonance maser / V.I. Gavrilenko and Z.F. Krasil'nik. // Optical and Quantum Electronics – 1991. V.23. – S323-S329.
- [3] Андронов, А.А. Стимулированное излучение в длинноволновом ИК диапазоне на горячих дырках Ge в скрещенных электрическом и магнитном полях. / Андронов А.А. Зверев И.В., Козлов В.А., Ноздрин Ю.Н., Павлов С.А., Шастин В.Н. // ЖЭТФ – 1984. Т.40(2) – С.69-71.
- [4] Vorobjev, L.E. Generation of far-infrared radiation by hot holes in germanium and silicon in  $E \perp H$  fields. / L.E. Vorobjev, S.N. Danilov, V.I. Stafeev. // Optical and Quantum Electronics – 1991. V.23. – P221-229.
- [5] Yu. P. Gousev. Widely tunable continuous-wave THz laser. / Yu. P., Gousev. I. V., Altukhov, K. A. Korolev, V. P. Sinis, and M. S. Kagan. // Applied Physics Letters – 1999. V. 75. – P.757-759.
- [6] Kohler, R. Terahertz semiconductor-heterostructure laser. / Kohler, R., Tredicucci, A., Beltram, F., Beere, H., Linfield, E., Davies, G., Ritchie, D., Iotti, R.C., and Rossi, F. // Nature. – 2002. V. 417. – P. 156–159.
- [7] Rochat, M. Low-threshold terahertz quantum-cascade lasers. / Rochat, M., Ajili, L., Willenberg, H., Faist, J., Beere, H., Davies, G., Linfield, E., and Ritchie, D. // Applied Physics Letters – 2002. V. 81. – P. 1381–1383.
- [8] Dargys A. Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP / Dargys A. and J. Kundrotas. // Science and Encyclopedia Publishers – Vilnius – 1994. – 187 p.



- [9] M. Ikezawa. Far-infrared absorption due to the two-phonon difference process in Si. / M. Ikezawa and M. Ishigame. // Journal of Physical Society of Japan. – 1981. V. 50. – P. 3734-3738.
- [10] Ю, П. Основы физики полупроводников / Ю П., Кардона М.// Физматлит, М. 2002. 560 С.
- [11] Kohn, W. Theory of donor states in silicon / W. Kohn, J.M. Luttinger // Phys. Rev.– 1955.– v. **90** (4).– P. 915
- [12] Pantelides, S.T. The electronic structure of impurities and other point defects in semiconductors// Rev. Mod. Phys.– 1978.– v. **50**, № 4.– P. 797
- [13] Lipari, N.O. Central cell effects on acceptor spectra in Si and Ge / N.O. Lipari, A. Baldereschi, M.I.W. Thewalt // Solid State Comm.– 1980. – v. **33**.– P. 277
- [14] Lax, M. Broadening of impurity levels in silicon / M. Lax, E. Burstein// Phys.Rev.– 1955.– v. **100**.– P. 592
- [15] Barrie, R. Phonon broadening of impurity spectral lines/ R.Barrie, R.Nishikawa, II Application to silicon// Canadian Journal of Physics.– 1963, v. 41.– P. 1823
- [16] Bardeen, J. Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals/ J. Bardeen, W. Shockley// Phys. Rev.– 1950.– v.**80**.– P. 72
- [17] Herring, C. Transport and Deformation-Potential Theory for Many-Valley Semiconductors with Anisotropic Scattering/ C. Herring, E. Vogt// Phys.Rev.– 1956.– v.101.– P. 944
- [18] Wilson, D.K. Electron spin resonance experiments on donor in silicon. III. Investigation of excited states by the application of uniaxial stress and their importance in relaxation processes/ D.K.Wilson, G.Feher†// Phys.Rev.– 1961.– v. **124**(4).– P. 1068

- [19] Castner, T. G. Raman spin-lattice relaxation of shallow donors in silicon// Phys.Rev.– 1963.– v.**130**.– P. 58
- [20] Harris, S.M. Line broadening of impurity states by resonant phonon interactions/ S.M. Harris, E.W. Prohofskey// Phys.Rev.– 1968.– v. **170**.– P. 749
- [21] Rodriguez, S. Effects of resonant phonon interaction on shapes of impurity absorption lines/ S. Rodriguez, T. Shultz// Phys. Rev.– 1969.– v. **178** (3).– P. 1252
- [22] Jacoboni, C. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials/ C. Jacoboni, L. Reggiani// Rev. Mod. Phys.– 1983.– v. **55** (3).– P. 645
- [23] Lax, M. Selection rules connecting different points in the Brillouin zone/ M. Lax, J.J. Hopfield// Phys. Rev.– 1961.– v.**124**.– P. 115
- [24] Birman, J.L. Intervalley-Scattering Selection Rules in III-V Semiconductors/ J.L.Birman, M. Lax, R. London// Phys.Rev.– 1966.– v.145.– P. 620
- [25] Portal, J.C. A study of intervalley scattering in n-Si by the magnetophonon effect/ J.C. Portal, L. Eaves, S. Askenazy, R.A. Stradling// Solid State Communications.– 1974.– v.14, Issue 11.– P. 1241-1245
- [26] Ferry, D.K. First-order optical and intervalley scattering in semiconductors/ Phys. Rev. B.– 1976.– v. 14.– P. 1605
- [27] Canali, C. Electron drift velocity in silicon/ C. Canali, C. Jacoboni, F. Nava, G. Ottaviany, A. Alberigi-Quaranta// Phys. Rev. B.– 1975.– v. **12**.– 2265
- [28] Joergensen, M.H. Electron-phonon scattering and high-field transport in n-type Si// Phys. Rev. B.– 1978.– v. **18**.– P. 5657
- [29] Brunetti, R. Diffusion coefficient of electrons in silicon/ R. Brunetti, C. Jacoboni, F. Nava, L. Reggiani// J. Appl. Phys.– 1981.– v. **52**.– P. 6713

- [30] Pop, E. Analytic band Monte Carlo model for electron transport in Si including acoustic and optical phonon dispersion/ E. Pop, W. Dutton и K. Goodson// J. Appl. Phys.– 2004.– v. **96**, 9.– P. 4998
- [31] Tyuterev, V. Theoretical intrinsic lifetime limit of shallow donor states in silicon / V. Tyuterev, J. Sjakste, N. Vast // Phys. Rev. B – 2010.– v. 81.– 245212
- [32] Bell, R.J. Surface and bulk impurity eigenvalues in the shallow donor impurity theory/ R.J.Bell, W.T.Bousman, G.M.Goldman, D.G.Rathbun// Surf. Sci.– 1967.– v. **7**.– P. 293
- [33] Orlova, E.E. Longliving shallow donor states in silicon-life time calculation // 26<sup>th</sup> international conference on physics of semiconductors: 29 july-2 august, 2002, Cambridge, Great Britain, in J.H. Davies and A.R. Long (eds), Publisher: Institute of Physics Publishing ISBN: – 7503 - 0924 - 5, Conference Proceeding. – V. 3. – P. 123.
- Орлова, Е.Е. Неравновесная населенность мелких примесных состояний в полупроводниках и усиление излучения длинноволнового инфракрасного диапазона: дис. ... канд. физ.-мат. наук : защищена 27.06.2002 / Е.Е. Орлова. – Нижний Новгород. : Институт физики микроструктур РАН, 2002. – 124 с.
- [34] Бир, Г.Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках/ Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус// Наука, М. 1972.– 584 С.
- [35] Шкловский, Б.И. Электронные свойства легированных полупроводников/ Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос// Наука, М. 1979.– 416 С.
- [36] Абакумов, В.Н. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках/ В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясиевич//: Петербургский институт ядерной физики Б.П. Константинова РАН, СПб. 1997.– 376 С.
- [37] Ramdas, A. K. Spectroscopy of the solid-state analogues of the hydrogen atom: donors and acceptors in semiconductors/ A. K. Ramdas and S. Rodriguez// Rep. Prog. Phys.– 1981.– v. **44**, **12**.– P. 1297-1387

- [38] Pavlov, S.G. Stimulated Emission from Donor Transitions in Silicon/ S.G. Pavlov, R.Kh. Zhukavin, E.E. Orlova, V.N. Shastin, A.V. Kirsanov, H.-W. Hübers, K. Auen, H. Riemann// *Phys. Rev. Lett.*– 2000, v. **84**.– P. 5220
- [39] Pavlov, S.G. Terahertz optically pumped Si:Sb laser/ S.G. Pavlov, H.-W. Hübers, H. Riemann, R.Kh. Zhukavin, E.E. Orlova, V.N. Shastin// *J. Appl. Phys.*– 2002.– v. **92**. P. 5632
- [40] Pavlov, S.G. Far-infrared stimulated emission from optically excited bismuth donors in silicon/ S.G. Pavlov, H.-W. Hübers, M.H. Rummeli, R.Kh. Zhukavin, E.E. Orlova, V.N. Shastin, and H. Riemann// *Appl. Phys. Lett.*– 2002.– v. **80**.– P. 4717
- [41] Hübers, H.-W. Stimulated terahertz emission from arsenic donors in silicon/ H.-W. Hübers, S.G. Pavlov, H. Riemann, N.V. Abrosimov, R.Kh. Zhukavin, and V.N. Shastin// *Appl. Phys. Lett.*– 2004.– v. **84**.– P. 3600
- [42] Демидов, Е.В. Переходы между уровнями донорного центра в Si со спонтанным излучением длинноволновых акустических фононов/ Е.В.Демидов, М.С.Кузнецов, В.В.Цыпленков, В.Н.Шастин// *Материалы X Симпозиума по Нанозифике и нанозлектронике.*– 13-17 марта 2006г.– Нижний Новгород: ИФМ РАН. 2006.– т.2.– С. 320
- [43] Jagannath, C. Piezospectroscopy of isolated lithium donors and lithium-oxygen donor complexes in silicon/ C. Jagannath, A.K. Ramdas// *Phys. Rev. B.*– 1981.– v. **23**.– P. 4426
- [44] R.Kh. Zhukavin, Laser transitions under resonant optical pumping of donor centres in Si:P / R.Kh. Zhukavin, D.M. Gaponova, A.V. Muravjov, E.E. Orlova, V.N. Shastin, S.G. Pavlov, H.-W. Hübers, J.N. Hovenier, T.O. Klaassen, H. Riemann, A.F.G. van der Meer. // *Applied Physics B, rapid communication* – 2003. v.76 – P. 613-616
- [45] Zhukavin, R. Kh. Influence of uniaxial stress on stimulated terahertz emission from phosphor and antimony donors in silicon/ R. Kh. Zhukavin, K. A.

- Kovalevsky, V. V. Tsyplenkov, V. N. Shastin, S. G. Pavlov, U. Böttger, H.-W. Hübers, N. V. Abrosimov, H. Riemann, N. Nötzel// *Appl. Phys. Lett.*– 2007.– v. **90**.– P. 051101
- [46] Pavlov, S. G. Low-threshold terahertz Si:As laser/ S. G. Pavlov, U. Böttger, H.-W. Hübers, R. Kh. Zhukavin, K. A. Kovalevsky, V. V. Tsyplenkov, V. N. Shastin, N. V. Abrosimov, H.// *Appl. Phys. Lett.*– 2007.– v. **90**.– P. 141109
- [47] S. G. Pavlov, Far-infrared stimulated emission from optically excited bismuth donors in silicon / S. G. Pavlov, H.-W. Hübers, and M. H. Rummeli, R. Kh. Zhukavin, E. E. Orlova, V. N. Shastin, H. Riemann. // *Applied Physics Letters* – 2002. V. 80. – P. 4717-4719.
- [48] G. Dolling in *Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids*// IAEA, Vienna.– 1963.– v. **11**.– P. 37
- [49] Шастин, В.Н. Времена жизни локализованных состояний мелких доноров в кремнии/ В.Н. Шастин, Р.Х. Жукавин, В.В. Цыпленков, S.G. Pavlov, H.-W. Hubers, P.J. Phillips// XII Международный симпозиум «Нанопизика и наноэлектроника».– 2008.– т. 1.– С. 182
- [50] Vinh, N. Q. Silicon as a model ion trap: Time domain measurements of donor Rydberg states/ N. Q. Vinh, P. T. Greenland, K. Litvinenko, B. Redlich, A. F. G. van der Meer, S. A. Lynch, M. Warner, A. M. Stoneham, G. Aeppli, D. J. Paul, C. R. Pidgeon, B. N. Murdin// *Appl. Phys. Lett.*– 2008.– v. **105**, 31.– P. 10649-10653
- [51] Steger, M. Shallow impurity absorption spectroscopy in isotopically enriched silicon/ M. Steger, A. Yang, D. Karaiskaj, M. L. W. Thewalt, E. E. Haller, J. W. Ager III, M. Cardona, H. Riemann, N. V. Abrosimov, A. V. Gusev, A. D. Bulanov, A. K. Kaliteevskii, O. N. Godisov, P. Becker, and H.-J. Pohl// *Phys. Rev. B.*– 2009.– v. **79**.– P. 205210
- [52] Shastin V N, Advanced THz laser performance of shallow donors in axially stressed silicon crystal / V N Shastin, R Kh Zhukavin, K A Kovalevsky, V V

Tsyplenkov, S G Pavlov, H-W Hübers // Journal of Physics: Conference Series.- 2009.-193.- 012086.- C.1-4.

[53] Debernardi, A. Anharmonic phonon lifetime in semiconductors from density-functional perturbation theory/ A. Debernardi, S. Baroni, E. Molinari// Phys. Rev. Let.- 1995.- v. **75**, 9.- P. 1819

[54] Tamura, S. Lattice dynamics and elastic phonon scattering in silicon/ S. Tamura, J.A. Shields, J.P. Wolfe// Phys. Rev. B.- 1991.- v.44, 7.- P. 3001

#### СПИСОК РАБОТ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

[A1] Цыпленков, В.В. Междолинная релаксация возбужденных донорных состояний на оптических фононах в кремнии/ Цыпленков В.В., Демидов Е.В., Ковалевский К.А., Шастин В.Н.// Вестник Нижегородского государственного университета им. Н.И.Лобачевского.- 2006.- серия Радиофизика, Выпуск 1(3).- С.13

[A2] Pavlov, S.G. Low-threshold terahertz Si:As laser// S.G. Pavlov, U. Boettger, H.-W. Huebers, R.Kh.Zhukavin, K.A.Kovalevsky, V.V. Tsyplenkov, V.N.Shastin, N. V. Abrosimov, H. Riemann// Appl. Phys. Lett.- 2007.- v.90.- P. 141109-(1-2)

[A3] Zhukavin, R. Kh. Influence of uniaxial stress on stimulated terahertz phosphor and antimony donors in silicon/ R. Kh. Zhukavin, V. V. Tsyplenkov, K. A. Kovalevsky, V. N. Shastin, S. G. Pavlov, U. Böttger, H.-W. Hübers, H. Riemann, N. V. Abrosimov, and N. Nötzel// Appl. Phys. Lett.-2007.- v.90.- P. 051101-(1-3)

[A4] Цыпленков, В.В. Релаксация возбужденных состояний доноров в кремнии с излучением междолинных фононов/ Цыпленков В.В., Ковалевский К.А., Шастин В.Н.// Физика и техника полупроводников.- 2008,- том 42, вып. 9.- С. 1032

[A5] Цыпленков, В.В. Влияние одноосной деформации на релаксацию возбужденных состояний мелких доноров в кремнии при взаимодействии с междолинными фононами/ Цыпленков В.В., Ковалевский К.А., Шастин В.Н.// Физика и техника полупроводников.– 2009.– том 43, вып. 11, С.1450

[A6] Pavlov, Sergey G Optimizing the Operation of Terahertz Silicon Lasers/ Sergey G. Pavlov, Heinz-Wilhelm Hübers, Ute Böttger, Roman Kh. Zhukavin, Veniamin V. Tsyplenkov, Konstantin A. Kovalevsky and Valery N. Shastin// Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal.– 2009.– V. 15, № 3.– P. 925

[A7] Shastin, V.N Advanced THz laser performance of shallow donors in axially stressed silicon crystal/ V.N. Shastin, R.Kh. Zhukavin, K.A. Kovalevsky, V.V. Tsyplenkov, S.G. Pavlov and H.-W. Hübers// J. of Physics: Conference Series.– 2009.– v.193, № 012086.– P.1-4

[A8] Ковалевский, К.А Расчет вероятностей переходов между нижними возбужденными состояниями мелких примесных центров Р и Ві в кремнии/ Ковалевский К.А., Цыпленков В.В.// тезисы научной конференции по радиофизике, 7 мая 2003 г., Н.Новгород: ННГУ.– С. 86.

[A9] Ковалевский, К.А. Время жизни возбужденных примесных состояний в условиях резонансного взаимодействия с оптическими фононами/ Ковалевский К.А., Цыпленков В.В.// тезисы научной конференции по радиофизике, 7 мая 2003 г., Н.Новгород: ННГУ.– С. 66.

[A10] Цыпленков, В.В., Время жизни возбужденного состояния  $2p_0$  донора Ві в кремнии в условиях резонансного взаимодействия с оптическими фононами// тезисы пятой Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике, 1-5 декабря 2003 г., СПб.: СПбГПУ.– С. 90

[A11] Жукавин, Р.Х. Влияние одноосной деформации на стимулированное излучение доноров в кремнии при оптическом возбуждении/ Р.Х.Жукавин, В.Н.Шастин, С.Г.Павлов, Н.А.Бекин, В.В. Цыпленков, Н.-W.Hubers,

H.Riemann, H.A.Абросимов// тезисы XII Российской конференции по физике полупроводников, 2005, М.: Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН.– С.350

[A12] Цыпленков, В.В. Междолинная релаксация возбужденных донорных состояний на оптических фононах в кремнии, тезисы к седьмой всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике// 1-5 декабря 2005 г., СПб.: СПбГПУ.– С. 63

[A13] Shastin, V.N. THz silicon laser based on arsenic donor transitions/ V.N. Shastin, R.H. Zhukavin, E.V. Demidov, S.G. Pavlov, V.V. Tsyplenkov, H.-W. Hubers, J.N. Hovenier, T.O.Klaasen// 28th international conference of the physics of Semiconductors, july 24-28, Vienna, Austria, 2006.– Abstract ID FrM2g.28

[A14] Демидов, Е.В. Переходы между уровнями донорного центра в Si со спонтанным излучением длинноволновых акустических фононов/ Е.В.Демидов, М.С.Кузнецов, Цыпленков В.В., В.Н.Шастин// Материалы X Симпозиума по нанофизике и наноэлектронике, 13-17 марта 2006г. Н.Новгород: ИФМ РАН, 2006, том 2.– С. 320

[A15] Цыпленков, В.В. Расчет скоростей релаксации возбужденных состояний мелких доноров кремния при взаимодействии с междолинными фононами/ Цыпленков В.В., Шастин В.В.// тезисы VIII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике, 4-8 декабря 2006г, СПб.: СПбГПУ.– С. 113

[A16] Zhukavin, R.Kh. Silicon THz Lasers Performance Under Uniaxial Stress/ R.Kh. Zhukavin, S.G. Pavlov, H.-W. Hübbers, K.A. Kovalevsky, V.V. Tsyplenkov, V.N. Shastin// The joint 31st International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 14th International Conference on Terahertz Electronics, 18th to 22nd 2006 Shanghai, China.– P.393

[A17] Pavlov, S.G. Stress-controlled impurity-phonon resonances in terahertz silicon lasers/ S.G.Pavlov, H.-W.Huebers, U. Bottger, R.Kh. Zhukavin, V.V. Tsy-



plenkov, K.A.Kovalevsky, V.N.Shastin, N.V.Abrosimov, N. Notzel, H. Riemann// Phonons 2007: Book of abstracts of the 12<sup>th</sup> Int. Conf. on Phonon scattering in condensed matter, Conservatoire National des Arts et Metiers, Paris, 15-20 July 2007. – P. 132-133

[A18] Shastin, Valery N. THz lasing of shallow donors in stressed silicon crystal/ Valery N.Shastin, Roman Kh.Zhukavin, Konstantin A. Kovalevsky, Veniamin V.Tsyplenkov, Sergey G.Pavlov, Heinz-Wilhelm Hubers // CAOL 2008: 4th International Conference on Advanced Optoelectronics and lasers, Alushta, Crimea, Ukraine, 2008, IEEE Catalog No CFP08814-PRT.– P.254-256

[A19] Shastin, Valery N THz amplification based on impurity-band transitions in Si/GeSi heterostructures/ Valery N.Shastin, Roman Kh.Zhukavin, Nikolay A.Bekin, Veniamin V.Tsyplenkov, Henry H.Radomson, Sergey G.Pavlov, Heinz-Wilhelm Hubers // CAOL 2008: 4th International Conference on Advanced Optoelectronics and lasers, 2008, Alushta, Crimea, Ukraine, IEEE Catalog No CFP08814-PRT.– P.422-424

[A20] Цыпленков, В.В Междолинная релаксация на фононах возбужденных состояний мелких доноров в деформированном кремнии/ Цыпленков В.В., Шастин В.Н.// Всероссийский семинар по терагерцовой оптике и спектроскопии.– Санкт-Петербург, 20-24 октября 2008.– С.314

[A21] Шастин, В.Н. Усиление терагерцового излучения на примесно-зонных оптических переходах в селективно-легированных гетероструктурах Si/GeSi N-типа/ Шастин В.Н., Жукавин Р.Х., Бекин Н.А., Цыпленков В.В., Radamson Н.Н.,Pavlov S.G., Hübers Н.-W// Всероссийский семинар по терагерцовой оптике и спектроскопии.– Санкт-Петербург, 20-24 октября 2008.– С.319

[A22] Шастин, В.Н. Терагерцовое стимулированное излучение мелких доноров в SiGe/Si гетероструктурах/ В.Н. Шастин, Р.Х. Жукавин, Н.А. Бенкин, В.В. Цыпленков, S.G.Pavlov, Н.-W. Huebers// Материалы XII международного симпозиума «Нанопизика и наноэлектроника», Нижний Новгород, 2008 г.: ИФМ РАН.– С. 364

[A23] Shastin, V.N. Advanced THz laser performance of shallow donors in axially stressed silicon crystal/ V.N. Shastin, R.Kh. Zhukavin, K.A. Kovalevsky and V.V.Tsyplenkov, S.G.Pavlov and H.-W. Hübers// Optoelectronics and Nanostructures: 16th International conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Montpellier, France, August 23-28, 2009.– P. 173

[A24] Цыпленков, В.В., Релаксация состояний мелких доноров в деформированном кремнии при взаимодействии с междолинными фононами/ В.В. Цыпленков, В.Н. Шастин// IX Российская конференция по физике полупроводников, Новосибирск-Томск, 28 сентября - 3 октября 2009 г..– С.239

[A25] Tsyplenkov, V.V. Lifetimes of operating states in terahertz intracenter silicon lasers/ V.V. Tsyplenkov, R.Kh. Zhukavin, K.A. Kovalevsky, V.N. Shastin, H.-W. Huebers, S.G.Pavlov, N.V. Abrosimov, P.J. Phillips, D.A., Carder// NATO Advanced Research Workshop on Terahertz and Mid Infrared Radiation: Basic Research and Applications TERA - MIR 2009, 3-6 November 2009: Institute of Theoretical and Applied Physics, Turunç-Marmaris, Turkey.– P.85.

[A26] Шастин, В.Н Стимулированное излучение доноров в одноосно деформированном кремнии/ В.Н. Шастин, Р.Х. Жукавин, К.А. Ковалевский, В.В. Цыпленков, С.Г. Павлов, Н.-W. Hübers// Труды II симпозиума по когерентному оптическому излучению полупроводниковых соединений и структур: М.: ФИАН, 2010.– С.49-58