Многофононная релаксация состояний двойных доноров серы и селена в кремнии

Бекин Н.А.

ИФМ РАН, 603950, Нижний Новгород, ГСП-105

DOI 10.34077/Semicond2019-317

Работа посвящена теоретическим оценкам вероятности многофононной релаксации в двойных донорах серы, S, и селена, Se. Рассматривается случай как нейтральных, так и однократно ионизованных доноров. Для расчетов используются простые модельные представления, игнорирующие многодолинный характер волновых функций. Таким образом, речь идет о получении грубых качественных оценок, исходя, главным образом, из энергетического зазора между вовлеченными в переход состояниями и локализации их волновых функций. Кроме того, для нейтральных доноров S^0 и Se^0 используется одноэлектронное приближение. А именно, используется модельное представление, что один из двух локализованных на доноре электронов находится на глубокой орбите, частично экранируя заряд иона. Таким образом, движение второго электрона, совершающего безызлучательные переходы, рассматривается в поле однократно заряженного остова. Для основного состояния нейтрального донора также использовалась одноэлектронная волновая функция, хотя это грубое приближение.

Рассматривается переход между триплетным уровнем $1s(T_2)$ и основным состоянием $1s(A_1)$. Для расчетов волновых функций обоих уровней использовался метод квантового дефекта, а вид волновой функции соответствовал симметрии $1s$ водородоподобного центра с изотропной эффективной массой. Вероятности переходов рассчитывались в адиабатическом приближении. Использовался приближенный метод суммирования вкладов в вероятность перехода с учетом дисперсии фононов [1]. Предполагалось, что релаксация происходит при испускании оптических фононов одного типа – LO или TO. Закон дисперсии фононов считался изотропным параболическим, $\omega(q) = \omega_{\max} (1 - q^2/q_0^2)$, где $\hbar\omega_{\max} = 64$ мэВ, величина q_0 выбиралась из условия, что минимальная частота, достигаемая на границе зоны Бриллюэна, соответствует частоте LO- или TO-фононов в точке X зоны Бриллюэна [2]. Зона Бриллюэна предполагалась сферически симметричной. Значение деформационного потенциала, $D = 2.6 \cdot 10^8$ эВ/см, выбрано для всех доноров путем подгонки к экспериментальным данным по времени жизни уровня $1s(T_2)$ в Se^+ : $\tau \approx 5.5$ нс [3]. Такая процедура подгонки эквивалентна введению усредненной по зоне Бриллюэна константы электрон-фононной связи, приближенно учитывая сильную локализацию вовлеченных в переход состояний.

Таблица 1. Темп многофононной релаксации

	Энергия связи, мэВ		LO		TO	
	$1s(A_1)$	$1s(T_2)$	ν, c^{-1}	S_{HR}	ν, c^{-1}	S_{HR}
S^0	318	35	$1.6 \cdot 10^{10}$	0.35	$1.7 \cdot 10^{10}$	0.31
S^+	612	184	$2.2 \cdot 10^8$	0.33	$2.4 \cdot 10^8$	0.29
Se^0	307	35	$2 \cdot 10^{10}$	0.32	$2 \cdot 10^{10}$	0.29
Se^+	589	161	$1.8 \cdot 10^8$	0.33	$2 \cdot 10^8$	0.29

В таблице 1 приведены энергии уровней доноров [2] и результаты расчетов — темп релаксации, ν , и фактор Хуанга — Риса, S_{HR} .

Работа поддержана в рамках совместного российско-германского проекта РФФИ-ННИО (No. 389056032 и 18-502-12077-ННИО).

[1] D. Goguenheim, M. Lannoo, J. Appl. Phys., **68**, 1059 (1990).

[2] A. Dargys, J. Kundrotas, Handbook on physical properties of Ge, Si, GaAs and InP, Vilnius (1994).

[3] K. J. Morse et al., Sci. Adv. **3**, e1700930 (2017).