Кулоновские корреляции и форма линии донорно-акцепторной рекомбинации в компенсированных полупроводниках

Богословский Н.А., Петров П.В., Аверкиев Н.С.

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26

DOI 10.34077/Semicond2019-335

Как известно, в компенсированных полупроводниках присутствуют ионизированные доноры и акцепторы. Ещё в классической работе [1] опубликованной более 50 лет назад указывалось, что случайные электростатические поля должны значительно влиять на форму линии донорно-акцепторной рекомбинации. Однако, с тех пор, теоретическая модель, которая бы учитывала влияние этих электростатических полей на форму линии, так и не была построена. В настоящей работе мы представляем результаты численных и аналитических расчётов спектров донорно-акцепторной рекомбинации в компенсированных полупроводниках. Методика численного моделирования спектров основывалась на поиске состояния с минимальной энергией системы заряженных и нейтральных примесей достижимого посредством одноэлектронных прыжков [2]. После этого моделировалась оптическая накачка системы посредством нейтрализации части доноров и акцепторов, при этом доля нейтрализованных примесей соответствовала интенсивности накачки. Спектры получались посредством суммирования всех возможных в системе оптических переходов с учетом вероятности каждого перехода и энергии соответствующего кванта излучения с усреднением по 10^6 случайных реализаций расположения доноров и акцепторов. Для интерпретации спектров полученных методом численного моделирования нами была разработана аналитическая модель в приближении бесконечно малой компенсации. В модели отдельно рассматриваются две компоненты донорно-акцепторной рекомбинации, линейная и квадратичная. Линейная компонента соответствует рекомбинации фотовозбужденного носителя заряда на равновесный основной носитель. Квадратичная компонента соответствует рекомбинации фотовозбужденных носителей заряда между собой и проявляется при высоких интенсивностях накачки. Рассмотрение двух вкладов по отдельности позволило построить аналитические модели для спектров. Линейная компонента описывается так называемой моделью троек, в которой рассматривается рекомбинация дырки с электроном находящемся на следующем за ближайшим доноре. При этом ближайший к акцептору донор ионизирован и его поле влияет на энергию перехода. Для описания спектра квадратичной компоненты компенсированный полупроводник рассматривается как система случайных диполей состоящих из ионизированных донорно-акцепторных пар. Вычислив плотность вероятности интенсивности электростатических полей такой системы можно рассчитать форму линии квадратичной рекомбинации. Сравнение аналитических расчётов с результатами численного моделирования показало, что аналитическая модель количественно описывает спектры рекомбинации при малых степенях компенсации. При умеренных степенях компенсации ≤ 0.5 качественное соответствие сохраняется [3]. В вышеописанном подходе предполагалось, что фотовозбужденные носители заряда рекомбинируют быстро по сравнению со временем энергетической релаксации в системе. Для общности нами были рассмотрены также случаи, когда энергетическая релаксация основных либо неосновных носителей происходит быстрее, чем оптическая рекомбинация. Было показано, что при определенных экспериментальных условиях возможно раздельное наблюдение обеих компонент.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-02-00283.

[1] D. G. Thomas, J. J. Hopfield, W. M. Augustyniak, *Phys. Rev.* **140**, A202, (1965).[2] B. I. Shklovskii, A. L. Efros, *Electronic properties of doped semiconductors*, Berlin, Springer (1984).[3] N. A. Bogoslovskiy, P. V. Petrov, Yu. L. Iv'anov, K. D. Tsendin, N. S. Averkiev, *Phys. Rev., B* **98**, 075209 (2018).[4] N. A. Bogoslovskiy, P. V. Petrov, N. S. Averkiev, *Low Temp. Phys.* **45**, 2 (2019).