

Влияние релаксации носителей заряда на спектры донорно-акцепторной рекомбинации с учетом кулоновских корреляций

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

*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе
ул. Политехническая, 26, г. Санкт-Петербург, 194021, Россия
E-mail: averkiev@les.ioffe.ru*

Статья поступила в редакцию 11 октября 2018 г., опубликована онлайн 20 декабря 2018 г.

Представлены результаты численного моделирования спектров донорно-акцепторной рекомбинации в компенсированных полупроводниках с учетом электростатических флуктуаций, связанных с наличием ионизированных примесей. Наличие кулоновских корреляций в системе частично ионизированных примесных центров приводит к возникновению особенностей в спектрах рекомбинации, зависящих от энергетической релаксации носителей заряда. Рассмотрены предельные случаи отсутствия релаксации, частичной релаксации основных и неосновных носителей заряда, а также полной релаксации системы электронов и дырок, локализованных на примесях. Интерпретация полученных методом численного моделирования результатов проведена с использованием разработанной ранее аналитической модели, в которой отдельно рассматриваются вклады в рекомбинацию равновесных и фотовозбужденных носителей заряда. Показано, что при определенных экспериментальных условиях линии излучения, соответствующие этим вкладам, могут спектрально разрешаться.

Ключевые слова: донорно-акцепторная рекомбинация, кулоновские корреляции, носители заряда.

1. Введение

Одним из основных каналов излучательной рекомбинации в полупроводниках при низких температурах является канал донорно-акцепторной рекомбинации. Излучательный переход донор–акцептор происходит в результате туннельной рекомбинации пространственно разнесенных примесных пар. При этом вероятность такого перехода экспоненциально спадает с расстоянием, а энергия излучаемого фотона увеличивается на энергию кулоновского взаимодействия ионизированных примесей в конечном состоянии:

$$\hbar\omega = E_g - E_d - E_a + \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (1)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны, E_d и E_a — энергии связи доноров и акцепторов, а $e^2 / \epsilon r$ — энергия кулоновского взаимодействия донорно-акцепторной пары на расстоянии r . Если радиус обоих примесных состояний сравним с постоянной решетки, то донорно-акцепторная рекомбинация наблюдается в виде набора

узких линий, отвечающих дискретным положениям примесей в кристаллической решетке. Если же одно из примесных состояний описывается водородоподобной волновой функцией, то легко получить выражение для спектральной зависимости вероятности перехода [1]:

$$P(E)dE = 32\pi p_0 N_d a_b^3 \left(\frac{E_d}{E}\right)^4 \exp\left(-\frac{4E_d}{E}\right) \frac{dE}{E_d}. \quad (2)$$

Здесь для краткости мы вводим обозначение $E = \hbar\omega - (E_g - E_d - E_a)$ и в дальнейшем будем называть E энергией перехода. Исходя из этих же предположений, можно получить временные характеристики донорно-акцепторной рекомбинации. При импульсной накачке первыми рекомбинируют носители на близко расположенных парах примесей, что соответствует фотонам с большей энергией. Далекие пары излучают медленнее, так что со временем линия люминесценции смещается в длинноволновую область [2–4].

Такой подход к донорно-акцепторной рекомбинации соответствует случаю бесконечно малой компенсации. При конечных компенсациях в системе случайно рас-

положенных, частично ионизированных примесей возникают флуктуирующие электрические поля, влияющие на спектральную форму линии. На то, что вклад этих флуктуаций существен, было указано еще в работе [2]. Кроме чисто фундаментальных аспектов, задача о форме линии донорно-акцепторной рекомбинации представляет и значительный прикладной интерес. В физике полупроводников постоянно появляется множество новых полупроводниковых материалов, перспективных для различных приложений оптоэлектроники и фотовольтаики. Любой новый полупроводниковый материал в начальной стадии разработки содержит большое количество структурных дефектов, а также доноры и акцепторы с неизвестной концентрацией и степенью компенсации. Поэтому теоретическая модель донорно-акцепторной рекомбинации с учетом ненулевой степени компенсации будет полезна для характеристики новейших полупроводниковых материалов [5,6].

Обычно для описания подобных систем используется модель экранированных электростатических флуктуаций, применимая для случая сильно легированных компенсированных полупроводников. Для описания флуктуаций в этих моделях используют феноменологические параметры, например такие, как радиус экранирования, оценить которые для конкретных систем не всегда просто [7]. Другим подходом, работающим для концентраций ниже перехода металл-диэлектрик, является численное моделирование, основанное на поиске минимума электростатической энергии взаимодействия ионизированных примесей. В работе [8] таким образом была произведена оценка уширения донорно-акцепторной линии для случая предельно малых интенсивностей накачки. В работе [1] этот результат был обобщен на случай произвольной интенсивности накачки. Было показано, что линия донорно-акцепторной рекомбинации состоит из двух компонент, соответствующих рекомбинации основных носителей на фотовозбужденные и фотовозбужденных между собой. В пределе малых компенсаций были построены аналитические модели, описывающие уширение каждой из этих компонент под воздействием случайных электрических полей ионизированных примесей.

Аналитический подход не учитывает возможности энергетической релаксации фотовозбужденных носителей заряда перед рекомбинацией. Однако наличие такой релаксации изменяет спектральные свойства донорно-акцепторной рекомбинации. Кроме того, в рассматриваемой системе релаксация происходит не просто через понижение одноэлектронных энергий носителей заряда. При низких температурах существенны электростатические корреляции, а значит, релаксация происходит посредством уменьшения полной энергии системы с учетом взаимодействия носителей заряда между собой. При этом важным является различие характерного времени энергетической релаксации электронов и

дырок. В большинстве полупроводников электроны релаксируют значительно быстрее, чем дырки из-за меньшей эффективной массы.

В нашей работе проанализированы спектры донорно-акцепторной рекомбинации для различных предельных случаев релаксации носителей заряда. Отдельно рассмотрены случаи полной энергетической релаксации донорно-акцепторной системы, а также релаксации только основных и только неосновных носителей заряда. Результаты сравниваются с рекомбинацией без учета релаксации, рассмотренной в нашей работе [1].

2. Численное моделирование

В настоящей работе спектры донорно-акцепторной люминесценции рассчитывались численно с учетом флуктуаций потенциала, создаваемых случайно расположенными заряженными примесями.

Для численного моделирования рассматривался кубический объем полупроводника с циклическими граничными условиями, в котором случайным образом распределялись доноры и акцепторы. Для определенности будем в дальнейшем говорить о полупроводнике n -типа. Количество доноров в наших расчетах, как правило, было равно $N_d = 10240$, что связано с ограничениями по объему памяти. Количество акцепторов определялось в соответствии с заданной степенью компенсации $N_a = KN_d$.

Рассматривался только случай нулевой температуры. При этом основные доноры ионизованы частично, а компенсирующие акцепторы ионизованы полностью. Для того чтобы смоделировать распределение электронов по донорам, соответствующее минимальной электростатической энергии системы, использован алгоритм, описанный в 14 главе монографии [9]. Следует отметить, что этот алгоритм на самом деле позволяет получить квазиосновное энергетическое состояние с минимальной энергией по отношению только к одноэлектронным перебросам. Как правило, полученное таким образом состояние системы не является основным. Так, энергию системы можно уменьшить за счет одновременного переброса двух и более электронов. Однако в наших расчетах получалось, что учет даже парных переходов значительно увеличивает трудоемкость расчетов, но не оказывает существенного влияния на спектры оптического поглощения и люминесценции.

Опишем подробнее используемый алгоритм минимизации электростатической энергии системы. В основном состоянии все акцепторы заряжены отрицательно, N_a доноров заряжены положительно, остальные $N_d - N_a$ доноров не заряжены. Вначале мы считаем первые N_a доноров заряженными положительно и вычисляем одноэлектронные энергии доноров. Затем определяем заполненный донор с самой высокой энергией и пустой донор с самой низкой энергией. Если энергия запол-

ненного донора оказывается больше энергии пустого, электрон перемещается на пустой донор. Описанная процедура повторяется до тех пор, пока все заполненные доноры не оказываются ниже по энергии всех пустых доноров.

Следует отметить, что при перемещении электрона с донора i на донор j одноэлектронная энергия донора j уменьшается на величину кулоновской энергии взаимодействия с донором i , который становится заряженным положительно. Поэтому энергия электрона на доноре j может оказаться меньше, чем на доноре i , а суммарная электростатическая энергия системы в результате перемещения электрона изменяется на величину

$$\Delta_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i - \frac{e^2}{\epsilon r_{ij}}.$$

В этом выражении через ϵ_{ij} обозначены энергии электронов на соответствующем доноре до перемещения электрона. После совершения всех возможных перебросов электронов, уменьшающих энергию системы, получается состояние с минимальной энергией по отношению к одноэлектронным переходам.

Для расчета спектров фотолюминесценции оптическая накачка моделировалась посредством нейтрализации некоторого количества ионизированных доноров и акцепторов. Количество фотовозбужденных примесей сложным образом зависит от интенсивности накачки и кинетических параметров системы. Поэтому для простоты условно интенсивность накачки I далее будет обозначать долю нейтрализованных акцепторов.

Заметим, что в квазиосновном состоянии в спектре энергий доноров наблюдается кулоновская щель, отделяющая заполненные состояния от пустых. На рис. 1 показана численно рассчитанная плотность состояний доноров для степени компенсации $K = 0,5$ и различного уровня накачки. В квазиосновном состоянии хоро-

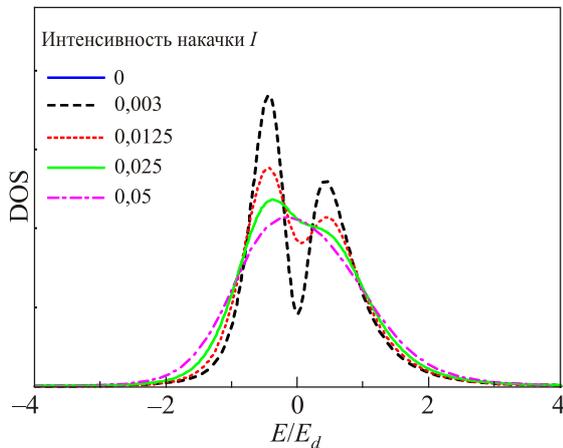


Рис. 1. (Онлайн в цвете) Плотность состояний доноров в зависимости от уровня накачки. Компенсация $K = 0,5$, концентрация $N_d a_b^3 = 0,01$.

шо видна кулоновская щель, отделяющая заполненные состояния от пустых. Этот результат хорошо согласуется с расчетами Шкловского и Эфроса [9]. При увеличении уровня накачки щель постепенно закрывается и при накачке порядка 2% провал в спектре полностью исчезает. Исчезновение кулоновской щели в плотности состояний связано с частичной нейтрализацией заряженных примесей и, как следствие, с полным изменением всех одноэлектронных энергий в системе.

Вероятность донорно-акцепторного перехода определяется интегралом перекрытия волновых функций донора и акцептора. Для относительно глубоких акцепторов волновая функция имеет маленький радиус, поэтому можно считать волновую функцию донора вблизи акцептора постоянной. Тогда вероятность перехода можно вычислить как:

$$p = p_0 \exp\left(-\frac{2r_{ij}}{a_b}\right), \quad (3)$$

где a_b — радиус донора, а p_0 — часть квадрата модуля матричного элемента, не зависящая от расстояния. Энергия соответствующего перехода будет равна:

$$\hbar\omega = E_g - E_d - E_a + \frac{e^2}{\epsilon r_{ij}} + (\epsilon_i - \epsilon_j).$$

Суммируя по всем возможным переходам с заполненных доноров на заполненные акцепторы с учетом их вероятности и энергии, можно численно получить спектр фотолюминесценции. Рассчитанная таким образом полная интенсивность люминесценции пропорциональна количеству фотовозбужденных акцепторов. Поэтому для сравнения спектров, рассчитанных при различных параметрах, а также для сравнения спектров с теоретической формулой (2) полученные спектры нормировались на один акцептор.

Для получения гладкой зависимости результирующие спектры усреднялись по большому числу реализаций различных конфигураций примесных атомов. В среднем рассчитывалось порядка 100 тысяч реализаций системы. Из-за высокой трудоемкости задачи при расчетах использовался метод параллельных вычислений на графическом процессоре CUDA. Для проверки работоспособности алгоритма был рассмотрен случай 100% накачки, при этом результаты численного моделирования совпали с теоретической формулой (2). Это связано с тем, что все примесные атомы оказываются нейтральными и не создают случайных электрических полей. Поэтому спектр рекомбинации описывается зависимостью, не учитывающей случайные поля.

Следует подчеркнуть, что в построенной таким образом модели донорно-акцепторной рекомбинации спектры излучения зависят всего лишь от трех безразмерных параметров: концентрации $N_d a_b^3$, компенсации

$K = N_a / N_d$, и интенсивности накачки I , равной отношению числа фотовозбужденных акцепторов к их полному числу N_a .

3. Результаты

Как было сказано во Введении, в настоящей работе проанализированы спектры донорно-акцепторной рекомбинации для различных предельных случаев релаксации носителей заряда. Отдельно рассмотрены случаи отсутствия энергетической релаксации донорно-акцепторной системы, релаксации только основных и только неосновных носителей заряда, а также полной энергетической релаксации обоих типов носителей заряда. Прежде, чем перейти к описанию результатов для каждого конкретного предельного случая, имеет смысл уточнить при каких физических условиях должна наблюдаться та или иная картина.

Основным каналом релаксации энергии носителей заряда, локализованных на примесях, является активационный механизм. Носители, локализованные на примесных центрах с большим одноэлектронным потенциалом ϵ_i , взаимодействуя с фононами, переходят в зону свободных состояний, откуда затем локализируются на центрах с меньшим одноэлектронным потенциалом ϵ_j . В большинстве полупроводников этот механизм работает лучше для электронов, чем для дырок в силу меньшей энергии связи доноров. Отношение характерных времен рекомбинации и энергетической релаксации служит критерием, разделяющим предельные случаи рекомбинации без релаксации и рекомбинации после полной релаксации энергии системы. Качественно этот критерий задается сравнением двух экспонент: рекомбинационной $\exp(-2N_d^{-1/3}/a_b)$ и активационной $\exp(-E_d/kT)$, т.е. при меньших концентрациях релаксация зарядов более существенна.

В силу описанных причин предельный случай рекомбинации без релаксации зарядов подходит для описания полупроводников n -типа с концентрацией примесей, близкой к переходу металл-диэлектрик. Случай полной релаксации основных носителей заряда будет описывать донорно-акцепторную рекомбинацию для полупроводников n -типа с малой концентрацией. Релаксация неосновных носителей заряда задает общий вид спектров в полупроводниках p -типа. Случай полной релаксации электростатической энергии в системе может реализовываться только в материалах с очень большим временем оптической рекомбинации, например в непрямозонных полупроводниках.

3.1. Рекомбинация без релаксации зарядов

Ионизованным донорам и акцепторам энергетически выгодно находиться близко друг к другу. Поэтому в основном состоянии при малой степени компенсации ионизованные примеси будут в основном располагаться в виде пар из близко расположенных донора и ак-

цептора. Такие пары принято называть 1-комплексами по числу ионизованных доноров рядом с акцептором. Кроме того, небольшое количество акцепторов, рядом с которыми отсутствуют заряженные доноры, будут образовывать 0-комплексы. Часть акцепторов будет удерживать около себя два ионизованных донора и образовывать 2-комплекс.

В нашей работе [1] показано, что в пределе малой степени компенсации влияние кулоновских флуктуаций на спектры люминесценции может быть описано аналитически. В спектре люминесценции выделяются две линии, соответствующие рекомбинации равновесных основных носителей с фотовозбужденными и фотовозбужденными между собой. В первом случае 1-комплекс захватывает из валентной зоны дырку, а донор остается ионизованным. После этого происходит рекомбинация дырки с равновесным электроном, а ионизованный донор значительно влияет на энергию перехода. Соответствующий спектр можно рассчитать по формуле

$$P(E) = 8\pi p_0(1-I)N_d^2 \left(\frac{e^2}{\epsilon}\right)^2 \times \int_0^{+\infty} r_1 \exp\left(-\frac{2r_1}{a_B}\right) dr_1 \int_0^{r_2} \frac{r_2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3}r_2^3 N_d\right)}{\left(\frac{e^2}{\epsilon r_1} + \frac{e^2}{\epsilon r_2} - E\right)^3} dr_2. \quad (4)$$

Вычисление должно производиться при следующих ограничениях для r_1 и r_2 :

$$E \leq \frac{e^2}{\epsilon r_1} + \frac{e^2}{\epsilon r_2} - \frac{e^2}{\epsilon(r_1 + r_2)},$$

$$E \geq \frac{e^2}{\epsilon r_1} + \frac{e^2}{\epsilon r_2} - \frac{e^2}{\epsilon(r_1 - r_2)}.$$

При увеличении накачки возрастает вероятность одновременного захвата электрона и дырки одним 1-комплексом. В таком случае размытие линии в основном связано с влиянием других 1-комплексов, а спектр фотолюминесценции может быть рассчитан согласно выражению

$$P(E) = 4p_0 I N_d \int_0^{+\infty} r dr \exp\left(-\frac{2r}{a_B} - \frac{4\pi}{3}r^3 N_d\right) \times \frac{eF_{md}r^2}{e^2 F_{md}^2 r^2 + \left(E - \frac{e^2}{\epsilon r}\right)^2}. \quad (5)$$

Здесь $F_{md} = 2,515KeN_d^{2/3}/\epsilon$ — наиболее вероятное электрическое поле, создаваемое системой 1-комплексов, рассматриваемых как совокупность случайно ориентированных диполей [1].

На рис. 2 показаны численно рассчитанные спектры фотолюминесценции для случая медленной энергетической релаксации при различных уровнях накачки. Для сравнения спектры с различной накачкой нормированы на количество фотовозбужденных акцепторов. Отдельно показаны спектры излучения равновесных и фотовозбужденных доноров. Интенсивность люминесценции равновесных доноров при увеличении накачки практически не изменяется, а соответствующая линия сужается вследствие уменьшения количества ионизованных примесей, отвечающих за размытие линии. Интенсивность излучения фотовозбужденных доноров с увеличением накачки возрастает пропорционально вероятности одновременного заполнения пары ионизованных донора и акцептора. Поскольку линия неравновесных фотовозбужденных доноров расположена выше по энергии, при увеличении накачки наблюдается сдвиг максимума спектра фотолюминесценции в сторону больших энергий.

Следует отметить, что при накачке $I = 0,25$ интенсивность люминесценции фотовозбужденных доноров уже превышает интенсивность равновесных доноров, несмотря на то, что количество фотовозбужденных доноров практически в 40 раз меньше. Это связано с тем, что в равновесии ионизованные акцепторы образуют пары с близко расположенными ионизованными донорами, при этом нейтральные доноры оказываются достаточно далеко от акцепторов. Поэтому фотовозбужденные доноры, как правило, являются ближайшими к акцепторам, и вероятность перехода для них выше.

Уширение вследствие наличия случайных электрических полей заряженных примесей главным образом сказывается на низкоэнергетическом краю спектра

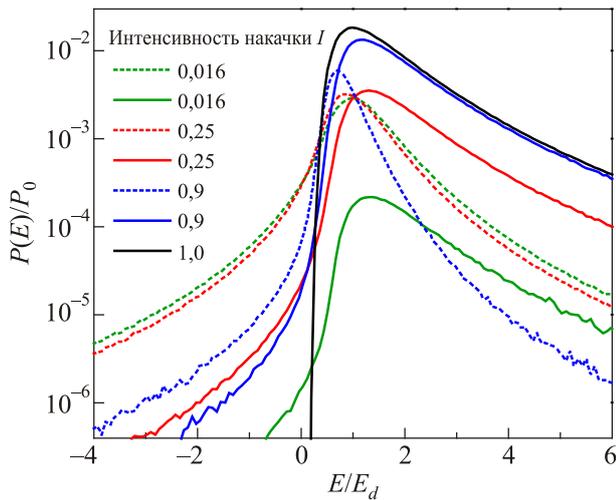


Рис. 2. (Онлайн в цвете) Спектры фотолюминесценции равновесных (пунктир) и фотовозбужденных (сплошная линия) центров при различном уровне накачки. Черной сплошной линией показан спектр при полной накачке, рассчитанный по формуле (2). Концентрация доноров $N_d a_b^3 = 0,01$, компенсация $N_a / N_d = 0,1$, $P_0 = 32\pi p_0 N_d a_b^3 / E_d$.

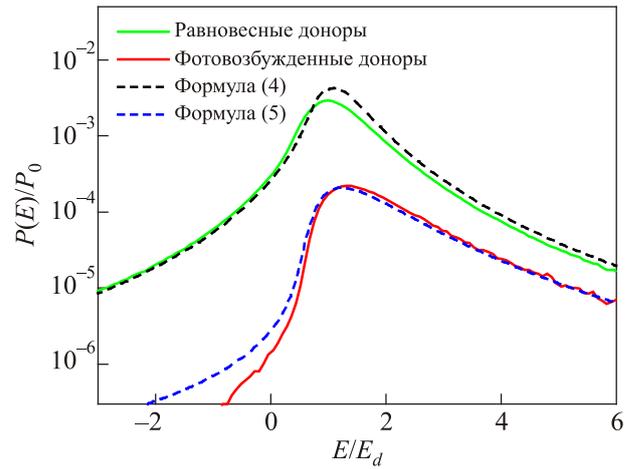


Рис. 3. (Онлайн в цвете) Сравнение расчетных спектров с теоретическими, рассчитанными по формулам (4) и (5). Концентрация доноров $N_d a_b^3 = 0,01$, компенсация $N_a / N_d = 0,1$, интенсивность накачки $I = 0,016$, $P_0 = 32\pi p_0 N_d a_b^3 / E_d$.

рекомбинации. При высоком уровне накачки количество заряженных примесей значительно уменьшается, а низкоэнергетический хвост спектра вырождается. На рекомбинацию близко расположенных примесных центров случайные поля влияют слабо, вследствие чего высокоэнергетический край имеет степенной вид $\sim E^{-4}$ аналогично зависимости (2).

На рис. 3 спектры, рассчитанные при интенсивности накачки $I = 0,016$, сравниваются с теоретическими спектрами, рассчитанными по формулам (4) и (5). Хорошее совпадение спектров подтверждает правильность наших предположений о механизмах уширения линии донорно-акцепторной люминесценции под влиянием случайных полей. Следует также подчеркнуть, что хорошее соответствие наблюдается не только в пределе малых степеней компенсации, но и при компенсациях порядка $K = 0,5$ [1].

3.2. Релаксация основных носителей заряда

На рис. 4 показан спектр люминесценции для случая энергетической релаксации основных носителей. В этом случае основные и фотовозбужденные электроны неразличимы, поэтому не имеет смысла выделять в спектре фотолюминесценции два отдельных вклада. Энергетически выгодно, чтобы ионизованные донор и акцептор были расположены близко друг к другу. Поэтому в процессе энергетической релаксации электроны переходят на ионизованные доноры, расположенные рядом с акцепторами, захватившими дырку в процессе накачки. В результате все доноры, расположенные рядом с нейтральными акцепторами, также оказываются нейтральными. Поэтому после релаксации интенсивность люминесценции значительно увеличивается, а форма спектра люминесценции становится близкой к спектру при полной накачке.

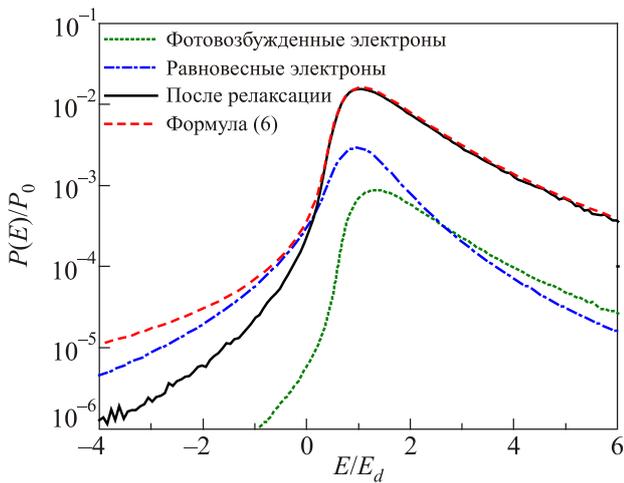


Рис. 4. (Онлайн в цвете) Спектр с релаксацией основных носителей заряда по энергии. Для сравнения показаны также спектры, рассчитанные без учета релаксации. Концентрация доноров $N_d a_b^3 = 0,01$, компенсация $N_a / N_d = 0,1$, интенсивность накачки $I = 0,0625$, $P_0 = 32\pi p_0 N_d a_b^3 / E_d$.

Низкоэнергетический хвост спектра связан с уширением электрическими полями. После релаксации заряженные доноры и акцепторы образуют близко расположенные пары и компенсируют кулоновские поля друг друга. Поэтому после релаксации интенсивность рекомбинации на низкоэнергетическом хвосте спектра значительно уменьшается.

Аналитически спектр рекомбинации с учетом релаксации основных носителей хорошо описывается следующей формулой:

$$P(E) = 4p_0 I N_d \int_0^{+\infty} r dr \exp\left(-\frac{2r}{a_B}\right) \frac{e F_{md} r^2}{e^2 F_{md}^2 r^2 + \left(E - \frac{e^2}{\epsilon r}\right)^2}. \quad (6)$$

Эта формула получена аналогично формуле (5) в модели случайно ориентированных диполей, но, в отличие от формулы (5), в ней рассматриваются переходы на все доноры, а не только на ближайший.

3.3. Релаксация неосновных носителей заряда

На рис. 5 представлены спектры люминесценции для случая релаксации неосновных носителей. Показан наиболее интересный случай с интенсивностью накачки $I = 0,01$. Поскольку наиболее вероятной представляется релаксация более легких электронов, случай релаксации неосновных носителей разберем на примере материала *p*-типа. В процессе релаксации электроны перемещаются на наиболее глубоко расположенные по энергии доноры. Поэтому линия, соответствующая переходам между равновесными дырками и фотовозбужденными электронами, значительно смещается в сторону меньших энергий, а интенсивность линии значительно

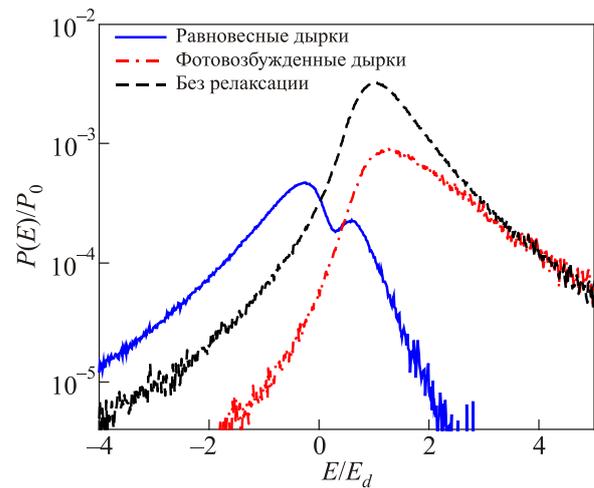


Рис. 5. (Онлайн в цвете) Релаксация неосновных носителей. Концентрация доноров $N_d a_b^3 = 0,01$, компенсация $N_a / N_d = 0,1$, интенсивность накачки $I = 0,01$, $P_0 = 32\pi p_0 N_d a_b^3 / E_d$.

уменьшается по сравнению со случаем без релаксации. При этом линия, соответствующая люминесценции фотовозбужденных дырок и электронов, не испытывает заметного смещения. В результате спектр фотолюминесценции разделяется на две хорошо различимые линии. При увеличении накачки интенсивность линии фотовозбужденных дырок возрастает, и при уровне накачки более 2% она перекрывается с линией равновесных дырок.

Легко понять, почему линия, соответствующая рекомбинации фотовозбужденных дырок и электронов, почти не изменяется при энергетической релаксации. Рассмотрим две донорно-акцепторные пары, нейтральную и ионизированную, удаленные друг от друга на расстояние много большее, чем расстояние между примесями в парах. Пусть расстояние между примесями нейтральной пары меньше, чем тоже расстояние для ионизированной пары. Энергетически выгоднее, чтобы ионизированной была та пара, в которой межпримесное расстояние меньше. Однако переход в такое состояние посредством переброса носителей заряда по одному происходит через состояние с большей электростатической энергией системы. Таким образом, есть фото-нейтрализованные накачкой донорно-акцепторные пары, которые не затрагиваются при релаксации зарядов только одного знака. Для приведения такой системы в состояние с минимальной энергией необходимо рассматривать попарный перебор дырок и электронов одновременно. Этот случай рассматривается в следующем разделе.

Линия оптических переходов на основные носители заряда имеет специфический вид с двумя максимумами. Слабая линия, максимум которой соответствует большей энергии фотона, связана с рекомбинацией фотовозбужденных электронов полностью нейтрализованных 1-комплексов с равновесными дырками на удаленных

акцепторах. Линия излучения с наименьшей энергией перехода соответствует рекомбинации электронов, локализованных в самых глубоких минимумах одноэлектронного потенциала, например на редких парах ионизированных доноров. Количество таких пар невелико, поэтому при увеличении интенсивности накачки интенсивность этой линии быстро насыщается.

Заметим, что две линии в спектре донорно-акцепторной люминесценции часто наблюдаются в эксперименте [10,11]. Как правило, это связывают с наличием нескольких типов примеси. Однако наш анализ показывает, что при определенных экспериментальных условиях возможно появление двух хорошо разрешаемых линий в спектре с одним типом доноров и акцепторов.

3.4. Полная релаксация носителей заряда

Наконец рассмотрим случай полной энергетической релаксации. Существенной особенностью его является то, что такая релаксация происходит только при одновременном перебросе и электрона, и дырки. Если пытаться перебрасывать носители заряда по одному, то системе, как и в предыдущем разделе, приходится переходить через состояние с более высокой энергией, что при нулевой температуре невозможно. Поэтому для численного моделирования случая полной релаксации минимизацию полной энергии приходилось производить посредством одновременного переброса электрона и дырки, несмотря на значительное увеличение объема вычислений.

Результаты вычислений представлены на рис. 6, при этом отдельно показаны спектры донорно-акцепторной рекомбинации до и после энергетической релаксации носителей заряда. Спектр рекомбинации после релаксации представляет собой длинноволновый хвост спектра, полученного посредством одночастичных перебросов,

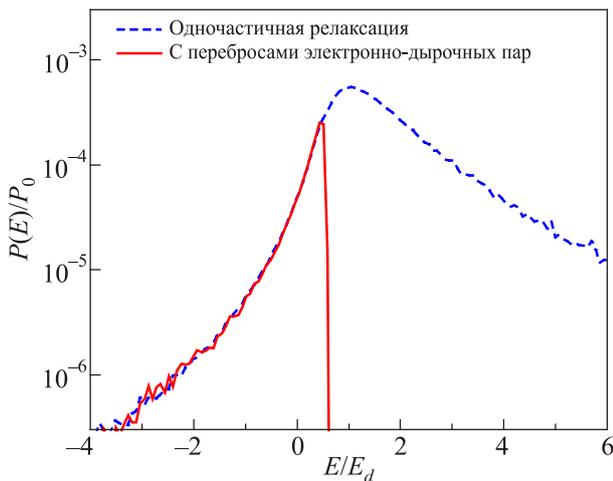


Рис. 6. (Онлайн в цвете) Спектр люминесценции при одночастичной релаксации (пунктир) и с учетом перебросов электронно-дырочных пар (сплошная линия). Концентрация доноров $N_d a_b^3 = 0,01$, компенсация $N_a / N_d = 0,1$, интенсивность накачки $I = 0,01$, $P_0 = 32\pi p_0 N_d a_b^3 / E_d$.

резко обрывающийся со стороны высоких энергий. Вид этого спектра легко объяснить, если представить себе процесс релаксации энергии как сочетание испускания и поглощения примесной системой фотона, при этом поглощаемый фотон имеет несколько меньшую энергию, чем испускаемый. Действительно, энергия фотона с учетом электростатических флуктуаций при таких переходах равна:

$$\hbar\omega = E_g - E_d - E_a + \frac{e^2}{\epsilon r_{ij}} + (\epsilon_i - \epsilon_j).$$

При релаксации энергии через парные перебросы электроны и дырки будут располагаться на все более удаленных друг от друга примесных центрах, имеющих минимальную для электронов и максимальную для дырок одноэлектронные энергии. При этом будут эффективно подавляться оптические переходы с энергией выше некоторой пороговой энергии, которая определяется интенсивностью накачки.

4. Заключение

Численно рассчитаны спектры донорно-акцепторной люминесценции в полупроводниках с учетом случайных электрических полей, создаваемых заряженными примесями. Рассмотрены предельные случаи быстрой и медленной релаксации фотовозбужденных носителей. Показаны различия спектров люминесценции в этих случаях. Как нами было показано ранее, спектр донорно-акцепторной рекомбинации можно представить как сумму двух компонент, соответствующих рекомбинации равновесных и фотовозбужденных электронов [1]. Уширение этих линий случайными полями хорошо описывается теоретическими формулами (4) и (5). Посредством численного моделирования показано, что в случае релаксации неосновных носителей при низкой накачке эти две компоненты могут быть спектрально разрешены. В случае релаксации основных носителей спектр состоит из одной линии, уширение которой хорошо описывается моделью случайных диполей (6), а полная интенсивность спектра значительно возрастает. Показано, что полная релаксация носителей заряда возможна только посредством попарного переброса электронов и дырок, а спектр донорно-акцепторной рекомбинации в этом случае состоит из одной линии, резко обрывающейся со стороны высоких энергий.

Работа выполнена при поддержке фонда РФФИ, проект №17-02-00539, и частичной поддержке в рамках программы Президиума РАН № 8 «Физика конденсированных сред и материалы нового поколения».

1. N.A. Bogoslovskiy, P.V. Petrov, Y.L. Ivánov, K.D. Tsendin, and N.S. Averkiev, *Phys. Rev. B* **98**, 075209 (2018).
2. D.G. Thomas, J.J. Hopfield, and W.M. Augustyniak, *Phys. Rev.* **140**, A202 (1965).

3. F. Williams, *Phys. Status Solidi B* **25**, 493 (1968).
4. A.P. Levanyuk and V.V. Osipov, *Usp. Phys. Nauk* **133**, 427 (1981) [*Sov. Phys. Usp.* **24**, 187 (1981)].
5. M. Lang, C. Zimmermann, C. Krämer, T. Renz, C. Huber, H. Kalt, and M. Hetterich, *Phys. Rev. B* **95**, 155202 (2017).
6. J. Sendler, M. Thevenin, F. Werner, A. Redinger, S. Li, C. Hägglund, C. Platzer-Björkman, and S. Siebentritt, *J. Appl. Phys.* **120**, 125701 (2016).
7. I. Kuskovsky, G.F. Neumark, V.N. Bondarev, and P.V. Pikhitsa, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2413 (1998).
8. P. Bäume, M. Behringer, J. Gutowski, and D. Hommel, *Phys. Rev. B* **62**, 8023 (2000).
9. A.L. Efros and B.I. Shklovskii, *Electronic Properties Doped Semiconductors*, Springer, Berlin (1984).
10. J.A. Rossi, C.M. Wolfe, and J.O. Dimmock, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1614 (1970).
11. N.A. Bogoslovskiy, P.V. Petrov, Y.L. Ivánov, N.S. Averkiev, and K.D. Tsendin, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **50**, 905 (2016) [*Semiconductors* **50**, 888 (2016)].

Вплив релаксації носіїв заряду на спектри
донорно-акцепторної рекомбінації з урахуванням
кулонівських кореляцій

Н.А. Богословський, П.В. Петров, Н.С. Аверкієв

Представлено результати чисельного моделювання спектрів донорно-акцепторної рекомбінації у компенсованих напівпровідниках з урахуванням електростатичних флуктуацій, які пов'язані з наявністю іонізованих домішок. Наявність кулонівських кореляцій в системі частково іонізованих домішкових центрів призводить до виникнення особливостей в спектрах рекомбінації, що залежать від енергетичної релаксації носіїв заряду. Розглянуто граничні випадки відсутності релаксації, часткової релаксації основних та неосновних но-

сіїв заряду, а також повної релаксації системи електронів та дірок, які локалізовані на домішках. Інтерпретацію отриманих методом чисельного моделювання результатів проведено з використанням розробленої раніше аналітичної моделі, в якій окремо розглядаються внески в рекомбінацію рівноважних та фотозбуджених носіїв заряду. Показано, що при певних експериментальних умовах лінії випромінювання, які відповідні цим внескам, можуть спектрально розділятися.

Ключові слова: донорно-акцепторна рекомбінація, кулонівські кореляції, носії заряду.

The influence of charge carrier relaxation on spectra
of donor-acceptor recombination taking into account
Coulomb correlations

N.A. Bogoslovskiy, P.V. Petrov, and N.S. Averkiev

In the article we present results of numerical simulation of donor-acceptor recombination spectra in compensated semiconductors taking into account electrostatic fluctuations due to presence of ionized impurities. A presence of Coulomb correlations in the system of partly ionized impurities leads to appearance of peculiarities in recombination spectra depending on energy relaxation of charge carriers. We consider limiting cases of an absence of the relaxation, a partly relaxation of majority or minority carriers and a full relaxation of the system of electrons and holes which localized on impurities. We carry out an interpretation of obtained results using a developed earlier analytical model in which we consider separately a contribution of equilibrium and photo-excited charge carriers. We show that under certain experimental conditions two spectral lines due to these contributions can be resolved in spectra.

Keywords: donor-acceptor recombination, Coulomb correlations, charge carriers.