Глава 2. Оптические переходы примесь-зона с участием изолированного точечного дефекта

Энергетические уровни примесных ионов могут принимать участие не только в переходах, характерных для водородоподобных атомов, но и в оптических переходах других типов. Рассмотрим переходы примесь-зона, причем для определенности будем рассматривать переходы зона проводимости- акцепторный уровень (чтобы описать переходы валентная зона-донорный уровень можно использовать те же формулы, поменяв обозначения). Классический объект для изучения таких переходов — GaAs p-типа с мелким акцептором. В спектре люминесценции этого кристалла переход зона-зона проявляется значительно слабее, чем переход примесь-зона.

Рассмотрим вначале процесс поглощения света при переходе электрона с уровня акцептора в зону проводимости, сделав следующие допущения:

1. Энергетическая зона является невырожденной и параболической, поверхность Ферми сферически симметрична в точке главного экстремума, следовательно эффективная масса изотропна.

2. Полупроводник легирован одним типом акцепторов с концентрацией N_A.

Для того чтобы рассматривать примесные атомы как изолированные центры и не учитывать их взаимодействие, концентрацию примеси следует считать достаточно малой. Такое ограничение на концентрацию примеси (N_A) является жестким, так как поле ионизированного акцептора распространяется довольно далеко.

Проведем оценку величины возмущения, которое оказывает на положение уровня примесного атома другой примесный атом. Если концентрация акцепторов $N_0 \approx 10^{15}$ см⁻¹, то среднее расстояние между акцепторами $r_0 \approx 10^3$ Å. При $\varepsilon = 10$ кулоновский потенциал акцептора на расстоянии r_0 равен $\frac{e^2}{\epsilon r_a} \sim$ 1,4*10⁻³ эВ. Глубина акцепторного уровня в арсениде галлия $E_A = 68*10^{-3}$ мэВ, и, следовательно, возмущение составляет около 2% от энергии связи, а это означает, что можно не учитывать уширение уровня, обусловленное влиянием соседних примесных атомов. Оценка верна при равномерном расположении акцепторов, при случайном расположении возмущение несколько больше. Если не принимать во внимание другие факторы (влияние других дефектов, электрон-фононное взаимодействие и т. д.), то линия в спектре может рассматриваться как δ -функция: $N_A(E) = N_A \delta(E - E_0)$. При неоднородном уширении линии контур состоит из суммы элементарных контуров: $N_A(E) = \Sigma \delta(E - E_{0i})$.

Главное условие, при котором возможен переход с испусканием или поглощением фотона, состоит в том, что начальное состояние занято электроном, а конечное состояние свободно. Переход с излучением фотона (зона-акцептор) возможен при условии, что акцептор нейтрален (то есть, свободен от электрона). И, наоборот, для перехода с поглощением кванта света (акцептор-зона) требуется, чтобы акцептор был ионизирован. Таким образом, вероятность перехода, зависит от вероятности заполнения примесных уровней электронами.

Рассмотрим факторы, определяющие захват или потерю электрона акцептором. Причиной перехода дырки с акцепторного уровня в валентную зону (то есть электрона из валентной зоны на акцепторный уровень) могут быть тепловые колебания, то есть вероятность возбуждения дырки зависит от температуры. Количество ионизированных тепловыми колебаниями акцепторов может быть определено из распределения Ферми-Дирака:

$$f_A = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right)}, \quad \text{где } E_F - \text{ энергия Ферми.}$$

Если E_F большая отрицательная величина по сравнению с $k_B T$, то $f_A = A \exp\left(-\frac{E_A}{k_B T}\right)$, и при $T \to 0, f_A \to 0$. При стремлении температуры к нулю,

заселенность уровней также стремится к нулю, это означает, что на акцепторах электронов нет.

На заполнение акцепторных уровней влияет также степень компенсации полупроводника. Рассмотрим частично компенсированный кристалл р-типа. При низкой температуре число нейтральных акцепторов есть разность между полным числом акцепторов и полным числом доноров: $N_A - N_D$. Отсюда следует, что число ионизированных (захвативших электрон) акцепторов, способных участвовать в поглощении света $N_A^* = N_D$. Если кристалл некомпенсирован и температура низкая, то переход примесь-зона «выморожен» (в частично компенсированных кристаллах переход возможен и при низкой температуре). Если



Рис.2.1. Переход акцептор-зона проводимости.

же в кристалле есть и доноры, и акцепторы, то при ненулевой температуре произойдет наложение двух спектров поглощения: акцептор-зона проводимости и валентная зона-донор. Пороговая энергия кванта света для перехода электрона с акцептора в зону проводимости $hv = E_g - E_A$ (при $hv < E_g - E_A$ сплошного поглощения нет). Если энергия выше пороговой, то $hv = E_g - E_A + E'_C$, где E'_C энергия электрона в зоне проводимости (рис 2.1).

Сначала рассмотрим только прямые переходы, без участия третьей частицы (фонона).

Коэффициент поглощения для переходов зона-примесь и примесь-зона

Потери электромагнитной волны при ее прохождении через кристалл характеризуются коэффициентом поглощения K, при этом интенсивность света, распространяющегося в среде вдоль направления z, $I(z) = I_0 e^{-Kz}$, где I_0 интенсивность падающего света. Если энергия фотона падающего света больше ширины запрещенной зоны, то при поглощении фотона в полупроводниковом кристалле образуется пара квазичастиц – электрон проводимости и дырка в валентной зоне. Взаимодействие квазичастиц с решеткой приводит к тому, что электрон и дырка изменяют свое состояние и не успевают сразу же аннигилировать с испусканием фотона с частотой, равной частоте поглощенного фотона.

Для того чтобы связать величину коэффициента поглощения с вероятностью переходов, рассмотрим изотропный немагнитный кристалл с проводимостью σ . В таком кристалле в единицу времени в единице объема поглощается энергия, равная $U = \frac{1}{2} |\mathbf{E}|^2 \operatorname{Re} \sigma$, где \mathbf{E} – напряженность электрического поля. При этом коэффициент поглощения

$$K(\omega) = \frac{8\pi U}{\left|\mathbf{E}\right|^2}.$$
(2.1)

Будем считать, что рассеяние отсутствует и вся энергия поглощаемого света расходуется на возбуждение электронных переходов. Тогда скорость поглощения энергии падающего света U зависит от величины поглощаемого кванта света $(E_f - E_i)$, от вероятности W_{fi} перехода электрона из начального состояния в конечное состояние, а также от вероятности ρ_i того, что начальное состояние занято электроном и вероятности $(1 - \rho_f)$ того, что конечное состояние свободно. Таким образом, $U_{fi} \sim (E_f - E_i)W_{fi}\rho_i(1 - \rho_f)$. Чтобы определить спектральную зависимость коэффициента поглощения, необходимо просуммировать U_{fi} по всем начальным и конечным состояниям:

$$\frac{1}{2}\sigma E^2 \sim \frac{1}{2}\sigma \left(-\frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t}\right)^2 = \sum_{f,i} (E_f - E_i)W_{fi}[\rho(i)(1 - \rho(f))].$$
(2.2)

Конкретный вид спектральной зависимости коэффициента поглощения можно получить, если известна зависимость от энергии каждой из величин, стоящих в правой части уравнения (2.2).

Вероятность заполнения начального и конечного состояния электронами определяется вероятностью захвата электрона данным состоянием и от числа таких состояний. Первое определяется распределением электронов по энергии, второе – концентрацией примесей.

Предположим, что поглощающая система находится в квазиравновесных условиях. Для этого необходимо, чтобы поток света, падающий на кристалл, имел настолько малую интенсивность, чтобы число ионизированных акцепторов было все время близко к первоначальному (электроны зоны проводимости быстро возвращаются на уровни акцепторов). При малой концентрации доноров и низкой температуре можно считать, что $\rho_f = 0$, а ρ_i определяется температурой, энергией связи (ионизации) и степенью компенсации. В этом случае в качестве распределения электронов по энергии можно воспользоваться распределяния, тогда вероятность заполнения будет определяться только температурой.

Найдем спектральную зависимость вероятности перехода акцептор-зона проводимости. Матричный элемент перехода дается выражением

$$M_{fi} = \langle \psi_f | H_{ep} | \psi_i \rangle$$

Вычислить вероятность можно, если известны волновые функции электрона в начальном и конечном состоянии и вид оператора возмущения.

<u>Начальное состояние системы</u>: электрон находиться на акцепторном уровне, волновая функция электрона на акцепторе выражается через волновые функции электрона в валентной зоне:

$$\psi_i = \psi_A = \sum C_n(k)\varphi_{nk}(r),$$

где $\varphi_{nk}(r)$ — волновая функция электрона в *n*-ной валентной зоне; $C_n(k)$ — весовой коэффициент, определяемый степенью локализации ψ_A в *k*-пространстве.

<u>Конечное состояние системы</u>: электрон находится в зоне проводимости и описывается функцией Блоха:

$$\psi_f = \psi_c = \varphi_{ck}(r) = U_{ck} \exp(ik_c r).$$

Электромагнитная волна при слабом возбуждении рассматривается как слабое возмущение;

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \exp(i(\omega t - qr))$$
 — векторный потенциал;
 $\hat{H}_{ep} = \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p}$ — гамильтониан возмущения, где $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ — оператор им-

пульса, с — скорость света.

В соответствии с теорией возмущений вероятность перехода

$$W_{if}(v) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{V} \psi_c^*(k,r) \hat{H}_{ep} \psi_A(r) dr \right|^2 \delta(hv - E_f + E_i).$$
(2.3)

Объем кристалла V полагаем единичным, множитель $\delta(hv - E_f + E_i)$ выражает закон сохранения энергии. При подстановке конкретных волновых функций начального и конечного состояний в выражение (2.3) получаем:

$$W_{CA}(\nu) \sim \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{V} U_c^*(r) e^{-ik_f r} \frac{e}{mc} A_0 \vec{e} e^{iqr} \hat{p} \sum_{n,k} C_n(k) U_n(r) e^{ik_i r} dV \right|^2 \delta(h\nu - E_f + E_i) = \\ = \frac{\hbar^2 e^2 A_0^2}{\hbar^2 m^2 c^2} \left| \sum_{n,k} C_n(k) \int_{V} U_c^*(r) \vec{e} e^{-ik_f r} e^{iqr} e^{ik_i r} [\nabla U_\nu(r) + ik_i U_\nu(r)] dV \right|^2 \delta(h\nu - E_f + E_i)$$

$$(2.4)$$

Здесь $U_c(r)$ и $U_v(r)$ имеют период элементарной ячейки, поэтому интеграл по всему объему кристалла V можно преобразовать в интеграл по объему одной элементарной ячейки V_0 и суммирование проводить по ячейкам кристаллической решетки, \vec{e} — единичный вектор.

Подынтегральное выражение (2.4) содержит два слагаемых: <u>первое слагаемое</u> $\int_{V_0} U_c^*(r) U_v(r) dV$ равно нулю, так как волновые функции зоны проводимости и валентной зоны ортогональны;

второе слагаемое

$$\int_{V_0} U_c^*(r) \frac{\partial}{\partial r} U_v(r) dV$$
(2.5)

определяет величину $P_{cv}(\vec{k})$ матричного элемента перехода зона-зона. При $P_{cv}(\vec{k}) \neq 0$ межзонный переход разрешен в дипольном приближении и одновременно разрешен переход зона-примесь. Этот результат является следствием модели, где примесь считается мелкой и ее волновая функция строиться из волновых функций одной ближайшей зоны. В случае глубокой примеси или двух близких валентных зон различной симметрии результат может быть иным.

Итак,

$$W_{CA} \sim \left| eP_{cv} \right|^2 \left\{ \sum_k C_k \sum_r \exp(i(k_v - k_c + q)r) \right\}^2 \times \delta(hv - E_f + E_i), \qquad (2.6)$$

где *r* — координаты ячеек.

В кубическом (изотропном) кристалле величина $\left| \vec{e} \vec{P}_{cv} \right|^2$ может быть усреднена, в анизотропном кристалле её усреднять нельзя, при этом переходы примесь-зона будут поляризованы, как и межзонные переходы. Сумма по координатам ячеек в выражении (2.6) представляет собой Фурье-образ δ -функции, которая равна нулю, если $k_v - k_c + q \neq 0$, и равна числу ячеек, если $k_v - k_c + q = 0$. Это говорит о том, что переходы примесь-зона являются прямыми переходами, для которых $k_v \cong k_c$.

Нас интересует спектральная зависимость коэффициента поглощения, поэтому в выражении (2.6) существенен явный вид только тех членов, которые зависят от величины волнового вектора, остальные могут быть включены в ко-эффициент пропорциональности, после чего (2.6) приобретает вид:

$$W_{CA} \sim \left| \sum_{k} C_{k} \right|^{2} \times \delta(h\nu - E_{f} + E_{i}) \,. \tag{2.7}$$

Спектральную зависимость вероятности W_{fi} от частоты в явном виде можно получить, выразив через энергию весовые коэффициенты C_k . Ввиду квазинепрерывности волнового вектора электрона в зоне проводимости набор весовых коэффициентов C_k можно рассматривать как функцию C(k). Для водородоподобного центра (мелкой примеси) C(k) дается выражением:

$$C(k) \sim \frac{a^{5/2}}{\left(k^2 + a^{2}\right)^2},$$
(2.8)

где *а'* — обратный радиус Бора.

Вспомним, что
$$E_{kin} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*}$$
, и, следовательно,
 $k^2 = \frac{2m_c^*}{\hbar^2} E_{kin} = \frac{2m_c^*}{\hbar^2} (h\nu - E_g + E_A).$ (2.9)

Из (1.14) получим зависимость обратного радиуса Бора от энергии:

$$a'^{2} = \frac{e^{4}m_{h}^{*}}{\hbar^{2}\varepsilon^{2}}\frac{m_{h}^{*}}{\hbar^{2}} = \frac{2m_{h}^{*}}{\hbar^{2}}E_{A}.$$
(2.10)

Подставив (2.8) и (2.9) в выражение (2.7), получим:

$$C(k) = C(h\nu) = 8\sqrt{\frac{\pi}{V_0}} \frac{\left(2m_h^* E_A\right)^{5/4}}{\hbar^{5/2} \left[\frac{2m_h^* E_A}{\hbar^2} + \frac{2m_c^*}{\hbar^2} \left(h\nu - E_g - E_A\right)\right]^2},$$
 (2.11)

где *V*₀ — объем элементарной ячейки.

Учитывая, что $\delta = 1$ лишь при $hv = E_f - E_i$, а в остальных случаях $\delta = 0$, можно утверждать, что только один член суммы, для которого выполняется условие $hv = E_f - E_i = E_g - E_A - E_{\kappa u H}$, вносит вклад в вероятность перехода на частоте *v*. Таким образом, получив спектральную зависимость величины энергии *U*, поглощаемой кристаллом в единицу времени в единице объема, можно найти спектральную зависимость коэффициента поглощения. Для этого надо воспользоваться выражениями (2.2) и (2.1) и просуммировать U_{fi} по всем начальным и конечным состояниям. Получим

$$K \sim \frac{e^2}{m^2 cn} \left| \vec{e} \vec{P}_{CV} \right|^2 \left| C(hv) \right|^2 \sum_{f,i} \delta(hv - E_f + E_i).$$
(2.12)

При этом должно быть принято во внимание, что из определения векторного потенциала для монохроматической волны следует соотношение $-\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\frac{i\omega}{c}\vec{A}$.

Для коэффициента поглощения можно получить более компактное выражение. Во-первых, нужно отметить, что сумма по всем индексам начальных и конечных состояний может быть преобразована, так как δ -функция равна единице при $k_{\nu} \cong k_c$, а энергия начального состояния E_i фиксирована (это энергия уровня акцептора). Отсюда следует, что эта сумма дает полное число состояний зоны проводимости. Плотность состояний в зоне пропорциональна квадратному корню из энергии, поэтому

$$\sum_{f,i} \delta(h\nu - E_f + E_i) \sim E^{1/2} \sim (h\nu - E_g + E_A)^{1/2}.$$
(2.13)

Во-вторых, можно ввести новую переменную *x*, которая для переходов донорный уровень-валентная зона определяется как

$$x = \frac{m_e}{m_h} \frac{h\nu - E_g + E_A}{E_A}.$$
 (2.13 a)

Для переходов валентная зона-донорный уровень переменная *x* имеет следующий вид:

$$x = \frac{m_h}{m_e} \frac{hv - E_g + E_D}{E_D}$$

Положим $K_n = \frac{\sigma}{nc}$, тогда коэффициент поглощения запишется в виде:

$$K_n = B \frac{\sqrt{x}}{(1+x)^4},$$
 (2.14)

где коэффициент В включает в себя все константы, в том числе концентрацию



Рис.2.2. Полоса поглощения перехода акцептор-зона проводимости.

ионизованных акцепторов и межзонный матричный элемент. Если же эта концентрация зависит от температуры, то *В* тоже является функцией температуры.

Как следует из (2.13), форма полосы поглощения акцептор-зона проводимости и донор-валентная зона выражаются одинаковой функцией. Определим положение максимума поглощения. Оно может быть получено с помощью соотношения $\frac{d}{dx} \frac{\sqrt{x}}{(1+x)^4} = 0$, из которого следует, что максимум функции (2.13) достигается при значении $x = x_{\text{max}} = 1/7 = 0,143$ (рис 2.2).

Полоса поглощения для переходов зона-примесь и примесь-зона

Важно также определить положение спектра поглощения перехода примесьзона относительно края фундаментального поглощения. Поскольку

 $x_{\text{max}} = \frac{m_{_{1}}^{*}}{m_{_{2}}^{*}} \frac{hv - E_{g} + E_{A,D}}{E_{A,D}} = \frac{1}{7}$, а кинетическая энергия электрона в зоне да-

ется выражением $hv - E_g + E_{A,D} = E_{\kappa u \mu}$, имеем $hv_{\max} = E_g - E_{A,D} + \frac{1}{7} \frac{m_2^*}{m_1^*} E_{A,D}$.

Таким образом, соотношение эффективных масс электрона и дырки определит положения максимума и полуширину полосы поглощения в области перехода примесь-зона. На рис. 2.3 приведены примеры положения и формы полосы поглощения для пяти различных соотношений эффективных масс для перехода акцептор-зона проводимости. Если эффективная масса электрона много меньше массы дырки (рис. 2.3 а), положение максимума близко энергии Eg – EA и полоса поглощения является узкой. При увеличении параметра me/mh максимум полосы поглощения сдвигается в сторону фундаментального края поглощения, а полуширина полосы увеличивается (рис. 2.3 b, c). При достижении значения $m_e/m_h = 7$ максимум совпадает с положением края фундаментального положения (рис. 2.3 d) полоса поглощения примесь-зона проявляется в спектре в виде ступени. При дальнейшем увеличении величины m_e/m_h полоса поглощения становится все более размытой. Характер зависимости положения максимума и формы полосы поглощения от величины m_e/m_h позволяет сделать вывод, что в одном и том же кристалле нельзя наблюдать узких полос поглощения и для донора и для акцептора.

Общая формула для спектра поглощения примесь-зона имеет вид:

$$K(h\nu) \sim \frac{1}{n_0(h\nu)} \frac{\varepsilon_{eff}}{\varepsilon} \frac{2^5 \pi e^2 \hbar^2}{m_0} \left| \vec{e} \vec{P}_{c\nu} \right|^2 \frac{m_2^*}{m_r R^*} \eta \frac{S(\nu, x)}{h\nu} N_i F_{AB}, \quad (2.15)$$

где $n_0(h\nu)$ — показатель преломления; $\mathcal{E}_{eff}/\mathcal{E}$ — поправка на эффективное поле, учитывающая зависимость поля в кристалле от его поляризации; m_2^* —

эффективная масса в «противоположной» зоне; m_r — приведенная масса электрона и дырки; R^* — эффективная постоянная Ридберга или энергия ионизации примеси; $\eta = (2\pi)^3 \frac{g(m_r)}{(2m_r/\hbar^2)^{3/2}}$ — множитель, учитывающий отклонение зоны

от параболического закона дисперсии (для параболической зоны $\eta = 1$); $\frac{S(v, z)}{hv}$

— поток фотонов с энергией *hv*, распространяющийся в кристалле в направлении *z*; *N_i* — концентрация примесей; *F_{AB}* — вероятность того, что исходное



Рис.2.3. Форма полосы поглощения и положение ее максимума при переходе акцептор-зона проводимости в зависимости от величины m_e/m_h : a — $m_2/m_1 = 1/3$ $hv_{max} = E_g - 20/21E_{A,D}$; b — $m_2/m_1 = 1$ $hv_{max} = E_g - 6/7E_{A,D}$; c — $m_2/m_1 = 3$ $hv_{max} = E_g - 4/7E_{A,D}$; d — $m_2/m_1 = 7$ $hv_{max} = E_g$; e — $m_2/m_1 = 11$ $hv_{max} > E_g$.

состояние занято, а конечное свободно.

$$F_{AB} \sim \begin{cases} g_c g_A f_A (1 - f_c) \\ g_v g_D f_D (1 - f_v) \end{cases}, \quad \text{где:}$$

 f_A, f_D — концентрации ионизированных акцепторов или доноров;

g_i — кратность вырождения соответствующих состояний;

 $(1 - f_{c(v)})$ — вероятность того, что состояние занято электроном (зона проводимости) или дыркой (валентная зона).

Поскольку плотность состояний в зонах высока, а термализация происходит быстро, можно считать $(1 - f_c) = (1 - f_v) \approx 1$. Тогда вероятность определяется величинами $N_A^* = N_A f_A$ (доля ионизированных акцепторов, в полупроводнике ртипа) и $N_D^* = N_D f_D$ (доля ионизированных доноров в полупроводнике n-типа).

Если полупроводниковый кристалл содержит только один тип примеси (донор или акцептор), доля ионизированных и нейтральных доноров и акцепторов определяется энергией ионизации примеси ($E_{A,D}$) и температурой. При $T \rightarrow 0$, N_A^* и N_D^* , тоже стремятся к нулю, и поглощения примесь-зона нет. В случае частичной компенсации, например, полупроводника р-типа при рассмотрении переходов акцептор-зона проводимости вместо $N_i F_{AB}$ следует использовать выражение:

$$N_A^* = [N_A - (N_A - N_D)(1 - f_A)],$$

где $(1 - f_A)$ — доля термически ионизированных акцепторов. При низкой температуре $f_A = 0$ и $N_A^* = N_D$ (полное число доноров), при высокой температуре $f_A = 1$ и $N_A^* = N_A$ (полное число акцепторов). Таким образом, в компенсированном образце примесное поглощение не исчезает даже при нулевой температуре.

Если примесь описывается по методу квантового дефекта, выражение (2.13) усложняется:

$$K = C \frac{\sin^2 \left[(w+1) \arctan x^{1/2} \right]}{x^{1/2} (1+x)^{w+1}},$$
(2.16)

где $w = (n - \mu), \mu$ — квантовый дефект, изменяющийся от 0 до 1. В крайних случаях при w = 1 зависимость *K* от *x* соответствует водородоподобной примеси, а при w = 0 — δ -образному потенциалу (рис.2.4.).



Рис.2.4. Коэффициент поглощения для перехода примесь-зона при разных значениях w: водородоподобная модель (w = 1); модель квантового дефекта (w = 0,5); модель δ -образного потенциала (w = 0).

При переходах примесь-зона наряду с поглощением происходит излучение квантов света с энергией: $hv_{_{изл}} = E_g - E_A + E'_{_{кин}}$, при этом энергия $E'_{_{кин}}$ оказывается близкой к нулю (поскольку температура низкая, электроны при слабом возбуждении успевают термализоваться, их энергия мало отличается от энергии дна зоны). В направлении поглощающегося пучка интенсивность этого излучения мала, и её можно не учитывать при обработке экспериментального спектра пропускания. Малость интенсивности излучения в определенном направлении обусловлена тем, что оно спонтанно и с равной вероятностью направлено во все стороны.

Переходы зона-примесь и примесь-зона в излучении

Рассмотрим процесс, обратный поглощению — переход с излучением кванта света. Основной характеристикой процесса излучения является скорость излучательной рекомбинации $R(h\nu)$, пропорциональная числу квантов энергии в интервале $\Delta \nu$, испущенных в единицу времени в единице объема. $R(h\nu)$ пропорциональна также числу примесных центров (для акцепторов — числу нейтральных, то есть не занятых электронами, акцепторов N_A^0) и числу электронов в зоне проводимости N_c , которое в свою очередь зависит от коэффициента поглощения. Таким образом, для скорости излучательной рекомбинации имеем выражение:

$$R(h\nu) = N_A^0 \nu(E) \sigma_r(e) N_c(E), \qquad (2.17)$$

где $\sigma_r(E)$ — сечение захвата; $N_c(E)$ — заполнение зоны проводимости электронами; N_A^0 — концентрация акцепторов; v(E) – тепловая скорость электрона.

При рассмотрении примесного поглощения можно было считать, что в зоне все уровни свободны, а уровни примеси заполнены, т. е. существенна только плотность состояний. Напротив, для процесса излучения важно учитывать, как распределены электроны по состояниям зоны проводимости. Определяющей становится функция $N_c(E) = g(E)f_c(E)$, где g(E) — плотность состояний в зоне.

В случае если зона параболическая, а энергия отсчитывается от дна зоны, плотность состояний $g(E) \sim E_{\kappa u \mu}^{1/2}$, где $E_{\kappa u \mu}$ — кинетическая энергия электрона. Вероятность заполнения уровней в зоне проводимости

$$f_c(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{\kappa u \mu} - E_F}{k_B T}\right)}.$$

В отсутствие вырождения и при слабом возбуждении $\exp\left(-\frac{E_{\kappa u H}}{k_B T}\right) >> 1$, $(E_F - C_F)$

большая отрицательная величина), и функцию $f_c(E)$ можно заменить более про-

стым выражением: $f_c(E) = A \exp\left(-\frac{E_{\kappa u \mu}}{k_B T}\right)$. Следовательно, $N_c(E) = g(E) \exp\left(-\frac{E_{\kappa u \mu}}{k_B T}\right)$.

Тепловую скорость электрона в зоне v(E) можно выразить через кинетическую

энергию:
$$v(E) = \sqrt{\frac{2E_{\kappa u h}}{m_e}}$$
, тогда $g(E_{\kappa u h}) v(E_{\kappa u h}) \sim E_{\kappa u h}$.

В результате для скорости излучательной рекомбинации получаем выражение:

$$R(h\nu) = BN_A^0 E_{\kappa u \mu} \exp\left(-\frac{E_{\kappa u \mu}}{k_B T}\right) \sigma_r(E) . \qquad (2.18)$$

Чтобы получить зависимость скорости излучательной рекомбинации от энергии кванта света, нужно найти величину сечения излучательного захвата. Непосредственное вычисление этой величины является сложной задачей, однако, воспользовавшись принципом детального равновесия, можно связать сечение излучательного захвата с сечением поглощения. В нашем случае сечение поглощения можно представить как вероятность поглощения фотона одним примесным центром: $\sigma(E) = \frac{K(E)}{N}$.

Сечение излучательного захвата связано с сечением поглощения следующим образом: $\sigma_r(hv) = \sigma_i(hv) \left[\frac{n_0^2(hv)^2}{2c^2 m_e E_{\kappa u H}} \right],$

где $\sigma_i(h\nu)$ — сечение поглощения света при переходе акцептор-зона проводимости. Вывод данного соотношения приведен в конце главы.

Если, как и выше, ввести переменную

$$x = \frac{m_1}{m_2^*} \frac{h\nu - E_g + E_{A,D}}{E_{A,D}}$$

то $\sigma_i(h\nu)$ примет вид:

$$\sigma_i(h\nu) = \sigma_i(x) = A \frac{\sqrt{x}}{(1+x)^n}.$$
(2.19)

Показатель степени *n* в (2.18) равен 4 для водородоподобной примеси и 2 для δ -образного потенциала. Энергия возбуждения $hv = E_g - E_A + E_{\kappa u \mu}$, отсюда $E_{\kappa u \mu}$ $= hv - E_g + E_A$. Подставив $E_{\kappa u \mu}$ в формулу (2.17), получим:

$$R(h\nu) = B \frac{\sqrt{x} \exp\left(-\frac{h\nu - E_g - E_A}{k_B T}\right)}{(1+x)^4}.$$
 (2.20)

Контур полосы излучения дается выражением

$$J(h\nu) = D \left| \vec{e} \vec{P}_{c\nu} \right|^2 R(h\nu), \qquad (2.21)$$

где \vec{e} — единичный вектор; \vec{P}_{cv} — матричный элемент дипольного момента, который определяет, является ли переход разрешенным, а также поляризацию перехода. Таким образом,

$$J(h\nu) = D \left| \vec{e} \vec{P}_{c\nu} \right|^2 \frac{\sqrt{x}}{(1+x)^n} \exp\left(-\frac{h\nu - E_g - E_A}{k_B T}\right).$$
(2.21 a),

Числитель данного выражения можно преобразовать к виду $\sqrt{E_{\kappa u \mu}} \exp \left(-\frac{E_{\kappa u \mu}}{k_B T}\right)$,

он с точностью до множителя определяется заселенностью состояний в разрешенной зоне (рис 2.5).



Рис.2.5. Величины, определяющие форму полосы люминесценции при низких температурах: а — плотность состояний в зоне ($g_c(E_{\kappa u \mu})$); b — распределение электронов (дырок) по энергиям ($f_c(E_{\kappa u \mu})$); с — заселенность состояний в зоне ($g_c(E_{\kappa u \mu}) f_c(E_{\kappa u \mu})$).

Знаменатель $(1+x)^n$ учитывает зависимость вероятности перехода от энергии. При низких температурах и не очень малых E_A можно считать, что вероятность перехода слабо зависит от $E_{\text{кин}}$ (сечение захвата слабо зависит от энергии кванта), то есть от x. При низких температурах электроны собираются в узком интервале k-пространства вблизи минимума зоны проводимости. В этом интервале коэффициенты C_k в актуальной области слабо зависят от волнового вектора k. Тогда знаменатель выражения (2.20 а) также слабо зависит от x, то есть от энергии и волнового вектора.

В этой ситуации (1 + x) мало отличается от 1, и выражение для контура полосы излучения можно записать в виде

$$J(h\nu) = DE_{_{\kappa u\mu}}^{1/2} \exp\left(-\frac{E_{_{\kappa u\mu}}}{k_B T}\right) = D(h\nu - E_g + E_A)^{1/2} \exp\left(-\frac{h\nu - E_g - E_A}{k_B T}\right).$$
(2.22)

Таким образом, при низких температурах форма линии излучения определяется распределением электронов по энергиям в зоне проводимости (рис.2.6). Чем глубже примесь, тем в большем интервале k-пространства коэффициенты C_k могут рассматриваться как величины, не зависящие от k. Волновая



Рис.2.6. Энергетическая диаграмма полупроводника р-типа вблизи центра зоны Бриллюэна и линии излучения перехода зона проводимостиакцептор: а — при низкой температуре; b — при высокой температуре.

функция глубокого акцептора с увеличением k спадает медленно (коэффициенты C_k спадают как k^{-2} , а не как k^{-4}). В тоже время волновая функция глубокого акцептора быстро спадает с увеличением пространственной координаты, и область интегрирования по r уменьшается.



Рис.2.7. Модельные оптические спектры в области перехода примесь-зона: а — полоса поглощения примесь-зона для $m_2/m_1 = 1/3$; b — линия излучения примесь-зона T = 4,2 K.

Найдем положение максимума полосы излучения из условия $\frac{d}{dE}J(E)=0$.

Если сечение захвата излучения не зависит от энергии, то при низких температурах максимум полосы излучения сдвинут на величину $E_m = 1/2k_BT$ от длинноволновой границы ($E_g - E_{A,D}$). Например, при T = 4,2 K, $k_BT = 3,6*10^{-4}$ эВ = 3 см^{-1} , и в спектре люминесценции наблюдается сравнительно узкая полоса излучения типа примесь-зона (рис. 2.7).

Важным отличием поглощения от излучения является то, что в поглощении полуширина полосы зависит от соотношения эффективных масс электрона и дырки. Поэтому, как это было отмечено выше, становиться невозможным одновременное наблюдение узких линий переходов валентная зона-донор и акцептор-зона проводимости. В излучении есть возможность наблюдать одновременно переходы донор-валентная зона и переходы зона проводимостиакцептор.

Если примесь водородоподобна (n = 4), то для положения максимума полосы излучения можно получить следующее выражение:

$$E_{m} = \frac{1}{a} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{7ak_{B}T}{2} + 1 \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{7ak_{B}T}{2} + 1 \right) + \frac{ak_{B}T}{2}} \right], \text{ где } a = \frac{m_{1}^{*}}{m_{2}^{*}} (E_{i}^{-1})$$

Если $m_1^* < m_2^*$ и $E_i > k_B T$, то корень квадратный можно разложить в ряд и ограничиться двумя первыми членами. Тогда

$$E_{m} = \frac{k_{B}T}{2\left(1 + \frac{7}{2}\frac{m_{1}^{*}}{m_{2}^{*}}\frac{k_{B}T}{E_{i}}\right)}, \text{ и если } E_{i} >> k_{B}T, \text{ то } E_{m} = k_{B}T/2.$$

На рис 2.8 приведены зависимости смещения максимума линии люминесценции примесь-зона от температуры для трех случаев:

1) линейная зависимость, которую можно наблюдать при условии

$$\frac{m_1^*}{m_2^*} \frac{k_B T}{E_i} \ll 1$$
, то есть при $\frac{m_2^*}{m_1^*} E_i >> k_B T$;

2) случай, практически применимый для перехода зона проводимостиакцептор, когда $\frac{m_e}{m_h} < 1$. В этом случае при увеличении энергии тепловых колебаний k_BT актуальная область k-пространства увеличивается медленно, так как зона проводимости имеет большую кривизну. Боровский радиус примеси обратно пропорционален эффективной массе $a_B = \frac{\hbar^2}{m^* e^2} \varepsilon$, и при сравнительно большой массе дырки интервал k-пространства, где волновая функция акцептора отлична от нуля, велик. В результате величина C(k) и вероятность перехода слабо зависят от энергии, зависимость положения максимума *E_m* от температуры близка к линейной.



Рис.2.8. Температурное смещение максимума полосы люминесценции примесь-зона. Условия смещения максимума (1),(2),(3) приведены в тексте.

3) случай более характерен для переходов донор-валентная зона. Донор является, как правило, мелкой примесью, и при малой кривизне валентной зоны с ростом температуры быстро расширяется область k-пространства, занятая дырками. При этом вероятность перехода быстро падает, так как волновая функция донора в k-пространстве сильно локализована. Отсюда вытекает, что полоса излучения уже не имеет максвелловской формы. Следует также иметь в виду, что с ростом температуры может происходить ионизация примеси. При увеличении температуры положение максимума сдвигается относительно порога поглощения примесь-зона в область больших энергий, а край фундаментального поглощения движется в длинноволновую сторону, причем обычно быстрее, чем E_{max} . Сдвиг порога, в основном, определяется зависимостью $E_g(T)$.

Переходы примесь-зона в непрямозонных кристаллах

Рассмотрим переход акцептор-зона проводимости (для этого случая имеется больше экспериментальных данных). В случае непрямозонного полупроводника экстремумы зон находятся в разных точках *k*-пространства. Вероятность перехода зависит от перекрытия волновых функций в начальном и конечном состоянии. Волновая функция акцептора $\Psi_A = \sum_{k,n} C_k \varphi_k(\vec{r}, \vec{k})$, ее локализация в *k*-пространстве определяется поведением весовых коэффициентов. В водородоподобном приближении весовые коэффициенты $C_k \approx \frac{a'}{(k^2 + a'^2)^2}$. Напомним, что в области значений волнового вектора k << a' коэффициенты $C_k \approx$

сопят, а в области k >> a' коэффициенты C_k спадают как k^{-4} , то есть быстро. Поскольку во всех известных случаях минимум зоны проводимости располагается в точке k_0 близкой к границе зоны Бриллюэна или совпадающей с ней, вероятность прямого перехода мала, и переход возможен только с участием фонона. Для глубокой примеси a_B мало, a' велико, так что область, где $C_k \approx const$ расширяется (рис 2.9).

Если примесь описывается δ -образным потенциалом $C_k \approx \frac{1}{(k^2 + {a'}^2)}$, то

при больших значениях волнового вектора k весовые коэффициенты спадают как $C_k \sim k^{-2}$, волновая функция электрона, локализованного на примеси, спадает медленно, при этом может наблюдаться и бесфононный переход в области



Рис.2.9. Переход примесь-зона в случае непрямозонного полупроводника.

 $k = k_0$ в поглощении. В этом случае спектр должен состоять из налагающихся ступеней, однако экспериментально это не наблюдалось.

Интенсивность линии люминесценции при использовании водородоподобной модели для прямого перехода <u>в прямозонном</u> полупроводнике $J_{nрямой}^{\delta ec \phi o h}$ при $k_0 = 0$ пропорциональна значению квадрата коэффициента разложения $C(k_0)^2$, для прямого перехода <u>в непрямозонном</u> кристалле ($k_0=k_{min}$) интенсивность линии пропорциональна $J_{henpямой}^{\delta ec \phi o h} \sim C(k_{min})^2$. Соотношение интенсивностей соответствующих полос дается выражением:

$$\frac{J_{\mu enp \pi M o \tilde{u}}^{\delta e c \phi o H}}{J_{n p \pi M o \tilde{u}}^{\delta e c \phi o H}} = \frac{C(k_{\min})^2}{C(k_0)^2} = \frac{a'^4}{\left(k_{\min}^2 + a'^2\right)^2}.$$

Для δ -образного потенциала зависимость от коэффициентов разложения аналогична, но в этом случае $C_k \approx \frac{1}{(k^2 + {a'}^2)}$.

Для кремния хорошо известны энергии ионизации примесей и значения их боровских радиусов, структура зон и величины энергий фононов (см. таблицу ниже) поэтому удается надежно анализировать спектры излучения кремния,

легированного различными примесями. Параметры для кремния: $\varepsilon = 12; a_0 =$

<i>c</i> , <i>c</i> , <i>c</i> , <i>n</i> , <i>n</i> ,	un 0,0 1		, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	$2 \epsilon E_i$	E_{i}	
примесь	<i>Еi</i> , эВ	<i>а</i> _{<i>B</i>} , см	<i>а</i> ', см ⁻¹	$(k_0^2 + a'^2)^2$	$C(k_{min})/C(0)$	$C(k_{min})^2/C(0)$
В	0,044	1,3*10 ⁻⁷	$7,3*10^{6}$	$4,8*10^{30}$	6*10 ⁻⁴	3,6*10 ⁻⁷
Ga	0,072	8,3*10 ⁻⁸	$1,2*10^{7}$	$5,2*10^{30}$	$4*10^{-3}$	$1,6*10^{-5}$
In	0,155	3,9*10 ⁻⁸	$2,6*10^7$	7,9*10 ³⁰	$6*10^{-2}$	3,6*10 ⁻³

$5 40^{\circ}$ 1 00 -1 4/(2*10 ⁷)		e^2	$0.6 \cdot 10^8$	-СМ
5,48 A; $k_{min} = 0.8 \pi/a_0 = 4/63 \times 10^{\circ} cm$	$a^{-}; a_{B} =$	$\overline{2\epsilon E_i} =$	$\overline{E_i}$	

Видно, что величины $(k_0^2 + a'^2)^2$ близки для разных примесей, величины $C(k_{min})/C(0)$ существенно различаются, а для величин $C(k_{min})^2/C(0)^2$ различия очень велики. Последний столбец дает представление о соотношении интенсивности бесфононных переходов и переходов примесь-зона в прямозонном и непрямозонном полупроводниках.



Рис.2.10. Спектр люминесценции кремния легированного: а — мелкой примесью (B, Ga); b — глубокой примесью (In).

На рис 2.10 приведены спектры люминесценции кремния, легированного различными донорами. Энергия прямого перехода между уровнем примеси и минимумом валентной зоны $E_g - E_i$ отмечена на рис. 2.10 штриховыми линиями. В типичном спектре люминесценции кремния, легированного мелкой примесью, наблюдаются линии, энергетическое положение которых в спектре отстоит от значения энергии $E_g - E_i$ на величину энергии поперечных оптических и акустических фононов (рис. 2.10 а), что характерно для непрямого перехода примесь-зона. В спектре люминесценции кремния, легированного глубокой примесью (рис. 2.10 b), наиболее интенсивная линия наблюдается на частоте E_g $-E_i$, что характерно для <u>прямого</u> перехода примесь-зона. Интенсивность линии люминесценции определяется перекрытием волновых функций, и, следовательно, значением коэффициентов разложения C_k в точке экстремума зоны $k = k_{\min}$.

В качестве примера также можно рассмотреть карбид кремния, легированный алюминием, β -SiC(Al): ширина запрещенной зоны карбида кремния E_g = 2,5 эВ, энергия ионизации примеси $E_i(Al) = 0,25$ эВ, то есть алюминий является довольно глубоким центром. Экстремум зоны проводимости находится в Хточке зоны Бриллюэна. Симметрия зон такова, что разрешены межзонные переходы с участием четырех разных фононов Х-точки (LO_x, TO_x, LA_x, TA_x).

В спектре люминесценции β -SiC(Al) хорошо наблюдается реплика бесфононного перехода LO^Г (рис 2.11) – карбид кремния имеет значительную ионность, и для фонона, соответствующего Г-точке зоны Бриллюэна, величина электрон-фононного взаимодействия значительна. В интервале 20 — 80 К форма бесфононной полосы хорошо описывается максвелловским распределением, при более высоких температурах фононные повторения столь сильны, что измерения формы бесфононной полосы ненадежны.



Рис.2.11. Спектр люминесценции карбида кремния, легированного алюминием.

В излучении некоторых кристаллов наблюдаются широкие полосы, которые трудно объяснить на основе рассмотренной выше модели. Например, в излучении ZnS со структурными дефектами присутствует бесструктурная полоса с шириной 0,5 эВ при низких температурах, когда выполняется условие 0,5 эВ $>> 2k_BT$ (для T = 77 K, $2k_BT = 0,013$ эВ). Появление широкой полосы можно объяснить сильным электрон-фононным взаимодействием для глубоких центрах (модель Урбаха). В этоим случае стоксовы потери велики, и колебательная структура спектров нечетка. Такие системы рассматриваются на основе принципа Франка-Кондона.

Соотношение между сечением поглощения и сечением излучательного перехода (захвата) носителя на уровень примеси.

Процесс поглощения света примесными центрами в кристалле можно рассматривать аналогично процессу рассеяния света на молекулах идеального газа, так как примесные ионы расположены в среде хаотически. Это предположение верно для слаболегированного полупроводника, где атомы примеси независимы друг от друга, а полное поглощение и излучение являются суперпозициями поглощения и излучения отдельных атомов. Как известно, рассеяние света на отдельных молекулах газа характеризуется сечением рассеяния – отношением потока энергии, рассеиваемого по всем направлениям, к интенсивности падающего излучения. Для нашей задачи, однако, удобно пользоваться сечением поглощения σ_i (σ_i — коэффициент поглощения, отнесенный к концентрации примесных центров, способных принимать участие в переходе).

Сечение поглощения фотона, то есть отношение коэффициента поглощения к числу осцилляторов для полупроводника легированного примесью, $\sigma(E) = \frac{K(E)}{N}$, где K(E) — коэффициент поглощения, N — концентрация примесей. Плотность состояний в зоне проводимости равна $g(E) = 4\pi \left(\frac{m_e}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$. Число электронов в зоне проводимости, имеющих энер-

гию
$$N(E) = f_c(E)g(E)$$
, где $f_c = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{\kappa u \mu} - E_F}{k_B T}\right)}$ – вероятность того, что со-

стояние в зоне проводимости занято электроном. Доля доноров, занятых электронами f_d ; доля свободных состояний $(1 - f_d) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{-E_D + E_F}{kT}\right)}$.

В состоянии равновесия имеет место соотношение

$$\frac{dr_{sp}}{dE} = \left(\frac{dg_{st}}{dE} - \frac{dr_{st}}{dE}\right),\tag{2.23}$$

где r_{sp} — вероятность спонтанного излучения; r_{st} — вероятность стимулированного излучения; g_{st} — вероятность стимулированного поглощения.

Плотность спонтанного излучения (число фотонов, приходящихся на единичный интервал энергии)

$$\frac{dr_{sp}}{dE} = f_c (1 - f_d) \boldsymbol{\sigma}_r(E) v(E) g(E) N_d, \qquad (2.24)$$

где $\sigma_r(E)$ — сечение захвата электрона с энергией *E* на основное состояние доноров с излучением кванта света. Скорость электрона $v(E) = \left(\frac{2E}{m_c}\right)^{1/2}$, N_d —

концентрация доноров.

Плотность генерации электронов в результате поглощения фотона (число свободных носители на единичный интервал энергии):

$$\frac{dg_{st}}{dE} = f_d (1 - f_c) \sigma_i(h\nu) N_d \frac{c}{n} Q(h\nu), \qquad (2.25)$$

где c/n — скорость фотонов в среде; $(1 - f_c)$ — вероятность того, что конечное состояние окажется свободным.

Плотность «тепловых» фотонов с энергией $hv = E_D + E_{\kappa u h}$:

$$Q(E) = \frac{2\pi (n/\hbar c)^3 (h\nu)^2}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}.$$

Вероятность встречи фотона с нейтральным донором равна

$$\frac{1}{d}f_d N_d \sigma_i(hv)\frac{c}{n},$$

где *d* — толщина образца.

Плотность стимулированных переходов

$$\frac{dr_{st}}{dE} = f_c (1 - f_d) \sigma_i (h\nu) N_d \frac{c}{n} Q(h\nu), \qquad (2.26)$$
отсюда: $\left(\frac{dg_{st}}{dE} - \frac{dr_{st}}{dE}\right) = (f_d - f_c) \sigma_i (h\nu) N_d \frac{c}{n} Q(h\nu),$

Произведение $(f_d - f_c)\sigma_i(h\nu)N_d = K$, то есть это коэффициент поглощения света при оптическом переходе электронов с донорных уровней в зону проводимости. Коэффициент поглощения максимален, когда зона проводимости пуста, а все уровни доноров заняты. Из выражения (2.23) следует, что $f(1 - f_c)\sigma_c(E)\nu(E)a(E)N_c = (f_c - f_c)\sigma_c(h\nu)N_c C O(h\nu)$

$$f_c(1-f_d)\sigma_r(E)v(E)g(E)N_d = (f_d - f_c)\sigma_i(hv)N_d \frac{c}{n}Q(hv)$$
, а сечение излу-

чательного захвата: $\sigma_r = \sigma_i (hv) \frac{n^2 (hv)^2}{2c^2 m_c E} \frac{f_d - f_c}{f_c (1 - f_d)(e^{\frac{hv}{kT}} - 1)}$. Если учесть,

что $hv = E_D + E_{\kappa u \mu}$, а отношение $\frac{f_d - f_c}{f_c (1 - f_d)(e^{\frac{hv}{kT}} - 1)} = 1$, то сечение захвата

электрона из зоны проводимости на основное состояние донора с излучением соответствующего электромагнитного кванта можно связать с сечением поглощения фотона донором следующим образом:

$$\sigma_r = \sigma_i \frac{n^2 (h\nu)^2}{2c^2 m_c E}.$$
(2.27)

Необходимо отметить, что для кристалла принцип детального равновесия выполняется при условии усреднения по энергии значений плотности состояний и тепловой скорости электронов. Усреднение необходимо, так как в отличие от газа в кристалле энергии поглощенных и излученных квантов могут не совпадать, в частности, из-за взаимодействия электронной системы с колебаниями решетки. Перейдем к усредненному значению сечения излучательного захвата $\overline{\sigma}_r$ и средней скорости электрона \overline{v} , проинтегрировав выражение (2.24). Получим, что плотность спонтанного излучения дается выражением:

$$r_{sp} = (1 - f_d) N_d \overline{\sigma}_r \overline{v} \int_0^\infty f_c(E) g(E) dE$$

vгде $\int_{0}^{\infty} f_{c}(E)g(E)dE = n_{0}$ — полная концентрация электронов проводимости в зоне, а $\bar{v} = \frac{1}{n_{0}} \int_{0}^{\infty} v(E)f_{c}(E)g(E)dE$ — средняя скорость электрона при данной

температуре. Тогда:

$$\overline{\sigma}_{r} = \frac{1}{n_{0}\overline{v}} \int_{0}^{\infty} V(E)\sigma_{r}(E)f_{0_{c}}(E)g(E)dE = \frac{1}{n_{0}\overline{v}} \frac{8\pi n^{2}}{h^{3}c^{2}} \int_{0}^{\infty} (E_{d} + E)\sigma_{r}(E)f_{0_{c}}(E)dE$$

Все это справедливо и для переходов в валентную зону. Для сравнения с экспериментом следует учесть отклонение локального поля в окрестности при-

меси от макроскопического поля, это учитывается множителем $\left(\frac{E_{eff}}{E_{o}}\right)^{2}$. Для

более детального анализа необходима конкретная модель захвата с определенной зависимостью $\sigma(hv)$, что выходит за рамки нашего рассмотрения.

В качестве примера можно привести кремний, легированный индием. При применении модели δ -образного потенциала и использовании ряда констант, полученных из опытов, расчет дает $\bar{\sigma}_r = 8 \ 10^{-22} T^{1/2} \ cm^2$ (с учетом вырождения акцепторных уровней). Измеренное значение для сечения поглощения фотона в Si(In) составляет 2 10^{-16} см². Как видно, экспериментальное значение для сечения излучательного захвата на 6 порядков меньше, чем расчетное. Дело в том, что в расчете учитывается только излучательный захват, однако необходимо рассматривать и захваты на примесные уровни с излучением не электромагнитных квантов, а фононов. Для мелких примесей излучательные переходы зона проводимости-донор и валентная зона-акцептор маловероятны, в основном потеря энергии носителями идет через фононы (одноступенчатые и каскадные процессы).