БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УДК 535.37; 621.315.592

# **ДЕРЕВЯГО** Александр Николаевич

# КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И СПИН-ФОНОННОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ДЛЯ СИЛЬНО ЛЕГИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

# ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

по специальности 01.04.10 — физика полупроводников

МИНСК, 2021

Научная работа выполнена в Белорусском государственном университете.

Научный руководитель —	Поклонский Николай Александрович,
	доктор физико-математических наук, профессор,
	профессор кафедры физики полупроводников
	и наноэлектроники Белорусского государственного
	университета.
Официальные оппоненты:	Прищепа Сергей Леонидович,
	доктор физико-математических наук, профессор,
	профессор кафедры защиты информации
	ГУО «Белорусский государственный университет
	информатики и радиоэлектроники»;
	Луценко Евгений Викторович,
	кандидат физико-математических наук, доцент,
	заместитель заведующего Центром
	«Полупроводниковые технологии и лазеры»
	ГНУ «Институт физики имени Б.И. Степанова
	Национальной академии наук Беларуси».

Оппонирующая организация — ГНПО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению».

Защита состоится 19 марта 2021 г. в 14.00 часов на заседании совета по защите диссертаций Д 02.01.16 при Белорусском государственном университете по адресу: г. Минск, ул. Ленинградская, 8 (корпус юридического факультета), ауд. 407; телефон ученого секретаря (017) 209-57-09.

С диссертацией можно ознакомиться в Фундаментальной библиотеке Белорусского государственного университета.

Автореферат разослан <u>16</u> февраля 2021 г.

Ученый секретарь совета по защите диссертаций доктор физико-математических наук профессор

А.К. Федотов

#### введение

Актуальность исследования сильно легированных полупроводниковых материалов обусловлена их повышенной радиационной стойкостью (по сравнению со слабо легированными) и, следовательно, возможностью их применения в приборных структурах, длительно работающих в условиях ближнего космоса.

Мотивацией к теоретическому и экспериментальному исследованию термической ионизации атомов примеси в трехмерных кристаллических полупроводниках *n*- и *p*-типа является контроль качества этих материалов для оптимизации области их применения. Задача количественного описания миграции электронов и дырок в полупроводниковых материалах при увеличении в них концентрации атомов примесей (вплоть до достижения ими квазиметаллического состояния) важна для приложений в криогенной микро- и оптоэлектронике.

Обычно ионизационное равновесие (между дырками v-зоны и водородоподобными акцепторами), а также сосуществование зонного (по состояниям vзоны) и прыжкового (по акцепторам) переноса дырок в полупроводниковых кристаллах p-типа трактуют порознь. Однако при температурах  $T_j$ , когда зонная электропроводность на постоянном токе приблизительно равна прыжковой, необходимо совместное рассмотрение и ионизационного равновесия, и дрейфоводиффузионной миграции дырок с учетом двух каналов переноса дырок. Например, для сильно легированных бором кристаллов алмаза p-типа  $T_j$  находится в области комнатных температур и выше, что необходимо учитывать при использовании таких материалов в силовой и радиационно-стойкой электронике. Алмазы p-типа только начинают использоваться в качестве внедряемых в мозговую ткань человека электродов для регистрации активности нейронов. Они находят применение и в электрохимии при очистке воды (пока как электроды портативных устройств).

Перспективность исследования прыжкового переноса электронов по трехзарядным точечным дефектам (имеющим заряд -1, 0 или +1 в единицах элементарного заряда e) в кристаллических полупроводниках связана с тем, что: 1) такие дефекты можно вводить в больших концентрациях ионизирующим излучением (радиацией) в сочетании с последующим термическим отжигом, 2) зарядовые состояния (-1) и (+1) дефектов обеспечивают их самокомпенсацию, 3) радиационно-термическое происхождение таких дефектов определяет стабильность параметров материала при последующем воздействии радиации.

Одиночные квантовые ямы полупроводниковых гетероструктур представляют интерес для создания высокочастотных приборов. В объемных полупроводниках при увеличении легирования подвижность электронов (и дырок) уменьшается из-за рассеяния их на ионах примесей. В гетероструктурах с квантовой ямой легирующая примесь обычно располагается в δ-слое полупроводниковой матрицы, окружающей квантовую яму, в то время как электроны от атомов примеси переходят в квантовую яму, где и осуществляется их миграция. Кристаллы антимонида индия *n*-типа перспективны для использования в устройствах спинтроники благодаря большому (и отрицательному) эффективному магнитному моменту, большой дрейфовой подвижности и малой эффективной массе электронов *c*-зоны. Однако электрические и магнитные параметры электронов *c*-зоны в этих кристаллах значительно изменяются при увеличении концентрации водородоподобных доноров.

Все отмеченное выше обусловливает практическую важность изучения влияния взаимодействия ионов примесей с электронами и дырками на электрические, оптические и магнитные свойства сильно легированных полупроводников, находящихся как на изоляторной, так и на металлической сторонах концентрационного фазового перехода изолятор-металл (перехода Мотта)<sup>1)</sup>.

### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

#### Связь работы с научными программами (проектами) и темами

Исследования по теме диссертации выполнялись на кафедре физики полупроводников и наноэлектроники физического факультета Белорусского государственного университета. Тема диссертационной работы соответствует приоритетным направлениям научных исследований Республики Беларусь на 2016–2020 гг. (Постановление Совета Министров Республики Беларусь от 12.03.2015 г. № 190, п. 6. Электроника и фотоника, п. 8. Многофункциональные материалы и технологии), а также приоритетным направлениям научнотехнической деятельности в Республике Беларусь на 2016–2020 гг. (Указ № 166 Президента Республики Беларусь от 22.04.2015 г., п. 3.4. новые многофункциональные материалы, специальные материалы с заданными свойствами).

В диссертации представлены результаты исследований, выполненных в рамках научно-исследовательских работ: 1) «Радиационно-поврежденные и лазерномодифицированные алмазы: оптические, электрические и парамагнитные свойства» (проект БРФФИ № Ф17РМ-091, № гос. рег. 20171240, срок выполнения 2017–2019 гг.), 2) «Магнетизм сильно легированных водородоподобными примесями ковалентных полупроводников» (грант Министерства образования, № гос. рег. 20190881, срок выполнения 2019 г.), 3) «Фазовые переходы, магнетизм и размерные эффекты в радиационно-модифицированных алмазах» (проект БРФФИ № Ф19РМ-054, № гос. рег. 20191818, срок выполнения 2019–2021 гг.).

#### Цель и задачи исследования

Цель работы — аналитическое и численное описание термической ионизации водородоподобных атомов примеси, электрической проводимости и подвижности электронов *с*-зоны, экранирования электрического поля при прыжко-

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup> Поклонский, Н.А. Электростатические модели концентрационных фазовых переходов изолятор-металл и металл-изолятор в кристаллах Ge и Si с водородоподобными примесями / Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, № 6. – С. 1071–1075.

вой миграции электронов и дырок по точечным дефектам кристаллической структуры, электролюминесценции и электронного магнитного резонанса в сильно легированных полупроводниковых системах.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи: 1) аналитически и численно рассчитать зависимости термической энергии ионизации водородоподобных примесей от их концентрации в полупроводниках *n*- и *p*типа при умеренной степени компенсации (до 50 %) при учете перекрытия возбужденных примесных состояний, а также разброса уровней энергии примесей, сопровождающегося формированием примесной зоны; 2) рассчитать электропроводность на постоянном токе и подвижность электронов с-зоны сильно легированных вырожденных кристаллических полупроводников *n*-типа при учете упругого кулоновского рассеяния подвижных электронов на ионах водородоподобных примесей при низкой температуре; 3) рассчитать длину экранирования внешнего стационарного электрического поля и длину диффузии как дырок *и*-зоны, так и дырок, прыгающих по неподвижным водородоподобным акцепторам, в ковалентных кристаллических полупроводниках р-типа в условиях равенства зонной и прыжковой электропроводностей; 4) аналитически описать прыжковый совместный перенос как одиночных, так и пар электронов в полупроводнике, содержащем равномерно распределенные по объему неподвижные точечные дефекты, которые могут находиться в трех зарядовых состояниях (-1), (0) и (+1); 5) развить модель излучательного распада отрицательного триона на электрон с-зоны и экситон с последующей рекомбинацией электрона и дырки, составляющих экситон, в полупроводниковой гетероструктуре с одиночной квантовой ямой с учетом движения триона вдоль квантовой ямы; 6) описать в квазиклассическом приближении схему локализации электронов из с-зоны внешним магнитным полем на термически ионизованных донорах в слабо легированных немагнитных кристаллических полупроводниках *п*-типа при криогенных температурах и рассчитать изменение термической энергии ионизации водородоподобных доноров в кристаллах арсенида галлия и антимонида индия *n*-типа при помещении их во внешнее стационарное однородное магнитное поле; 7) предложить квазиклассическую модель, качественно и количественно описывающую результаты измерений магнитного резонанса в радиодиапазоне в кристаллах *n*-InSb:Te при комнатной температуре.

Объект исследования — сильно легированные водородоподобными примесями умеренно компенсированные (до 50 %) кристаллические полупроводники *n*- и *p*-типа; однородные полупроводниковые материалы с трехзарядными точечными дефектами кристаллической структуры; полупроводниковая гетероструктура с одиночной квантовой ямой.

**Предмет исследования** — термическая ионизация водородоподобных доноров и акцепторов; электропроводность и подвижность вырожденного газа электронов *с*-зоны при низких температурах; дрейф и диффузия электронов и дырок посредством прыжковой миграции по точечным дефектам кристаллической структуры при экранировании ими электрического поля; электролюминесценция полупроводниковой гетероструктуры с дрейфующими вдоль квантовой ямы отрицательно заряженными трионами; термическая ионизация доноров во внешнем постоянном магнитном поле; магнитный резонанс электронов *с*зоны в сильно легированных теллуром кристаллах антимонида индия *n*-типа.

### Научная новизна

Научная новизна результатов диссертационной работы заключается в следующем: 1) рассчитана термическая энергия ионизации водородоподобных атомов примесей в полупроводниках *n*- и *p*-типа с учетом среднеквадратичных флуктуаций потенциальной энергии электронов и дырок, уширения примесной зоны и сдвига дна с-зоны (потолка *v*-зоны), обусловленного ограничением радиуса области локализации электрона (или дырки) на доноре (или акцепторе) полупроводников *n*-типа (*p*-типа), при увеличении концентрации легирующих примесей; 2) учтены среднеквадратичные флуктуации потенциальной энергии при расчете электропроводности на постоянном токе и дрейфовой подвижности электронов с-зоны в сильно легированных полупроводниках при низких температурах; 3) в аналитическом виде получены формулы для длины экранирования и длины диффузии в полупроводниках с точечными дефектами в зарядовых состояниях (-1, 0, +1) при одновременном существовании прыжков как одиночных, так и пар электронов по этим дефектам; 4) учтено влияние кинетической энергии триона на энергию его излучательного распада на экситон и электрон *с*-зоны в одиночной квантовой яме полупроводниковой гетероструктуры. Впервые предложена светоизлучающая структура, принцип работы которой основан на переходах между квантоворазмерными уровнями энергии триона в квантовой яме; 5) в квазиклассическом приближении рассчитано увеличение термической энергии ионизации водородоподобных доноров в невырожденных полупроводниках во внешнем постоянном однородном магнитном поле; 6) развита модель спин-фононного магнитного резонанса в кристаллах n-InSb:Te с концентрацией электронов *с*-зоны от 6·10<sup>15</sup> до 5·10<sup>18</sup> см<sup>-3</sup>, описывающая поглощение кванта энергии радиоволны с частотой 10 МГц и оптического фонона, приводящее к переходу электрона с нижнего на более высокий по энергии уровень Ландау с переворотом его собственного спинового магнитного момента.

#### Положения, выносимые на защиту

1. Модель уменьшения термической энергии ионизации водородоподобных доноров (акцепторов) при увеличении их концентрации (вплоть до перехода изолятор-металл) в умеренно компенсированных (до 50 %) ковалентных полупроводниках *n*- и *p*-типа, учитывающая в квазиклассическом приближении квантовой механики сдвиг дна *c*-зоны (потолка *v*-зоны) в глубь запрещенной

зоны из-за коллективизации возбужденных состояний основных примесей, а также сдвиг уровня Ферми к дну *с*-зоны в кристаллах *n*-типа (к потолку *v*-зоны в кристаллах *p*-типа) из-за уширения примесной зоны при кулоновском взаимодействии ближайших по расстоянию ионов примесей, и результаты расчета по этой модели, согласующиеся с известными экспериментальными данными для германия, кремния и алмаза.

2. Модель электропроводности и дрейфовой подвижности электронов на постоянном токе в сильно легированных слабо компенсированных полупроводниках *n*-типа (на металлической стороне перехода Мотта) при низких температурах, учитывающая электростатические флуктуации потенциальной энергии электрона *c*-зоны при конечной длительности его упругого кулоновского рассеяния на одном ионе примеси, и результаты расчета по этой модели, согласующиеся с известными данными для *n*-Ge, *n*-Si, *n*-GaAs и *n*-InSb по уменьшению подвижности электронов при увеличении концентрации примесей.

3. Принципиальная схема светоизлучающей полупроводниковой гетероструктуры с квантовой ямой из ZnSe (наполненной электронами из δ-слоя доноров в широкозонной матрице), принцип работы которой основан на излучательных переходах отрицательно заряженных трионов между их квантоворазмерными уровнями энергии при движении вдоль ямы под действием стационарного внешнего электрического поля; длина волны излучения пропорциональна произведению эффективной массы триона на квадрат ширины квантовой ямы и обратно пропорциональна показателю преломления света ямой.

4. Модель спин-фононного магнитного резонанса в сильно легированных атомами теллура кристаллах антимонида индия *n*-типа, которая показывает, что увеличение концентрации электронов *c*-зоны от  $6 \cdot 10^{15}$  до  $5 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup> при комнатной температуре, приводящее к увеличению почти на порядок резонансного значения магнитной индукции для измерения на радиочастоте 10 МГц, обусловлено переходами электронов между уровнями Ландау *c*-зоны с переворотом их спиновых магнитных моментов за счет поглощения каждым электроном и поперечного оптического фонона, и кванта энергии радиоволны, а также увеличением эффективной массы и *g*-фактора электрона.

### Личный вклад соискателя ученой степени

Представленные в диссертации основные результаты получены соискателем под руководством доктора физико-математических наук Н.А. Поклонского, который сформулировал задачи и направления исследования, участвовал в получении и представлении материалов для опубликования в научных журналах. Кандидаты физико-математических наук С.А. Вырко, А.И. Сягло и А.И. Ковалев участвовали в обсуждении аналитических и численных расчетов.

## Апробация диссертации и информация об использовании ее результатов

Полученные в диссертации результаты прошли апробацию на Международ-

ных конференциях: XXIV международная научно-практическая конференция «Физика конденсированного состояния» (Гродно, 2016); XXV международная научно-практическая конференция «Физика конденсированного состояния» (Гродно, 2017); E-MRS 2018 Spring Meeting (Страсбург, 2018).

Результаты диссертации внедрены в образовательный процесс на кафедрах физики полупроводников и наноэлектроники и физики твердого тела БГУ. Имеется 3 акта о практическом использовании.

## Опубликование результатов диссертации

Основные результаты диссертации опубликованы в 11 научных работах, в том числе в 8 статьях в научных журналах в соответствии с п. 18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий в Республике Беларусь (общим объемом 8,2 авторского листа), 2 статьях в сборниках материалов научных конференций и одних тезисах.

## Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из перечня сокращений и условных обозначений, введения, общей характеристики работы, 4 глав, заключения, библиографического списка и двух приложений. Полный объем диссертации составляет 154 страницы, включая 37 рисунков (на 25 страницах), 3 таблицы (на 3 страницах) и 2 приложения (на 8 страницах). Библиографический список содержит 279 наименований, включая 11 публикаций соискателя ученой степени (на 20 страницах).

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**В главе 1** приведен обзор литературы по тематике диссертационной работы. Из анализа литературы следуют поставленные задачи.

В главе 2 развита квазиклассическая модель расчета термической энергии ионизации водородоподобных атомов примесей в полупроводниках *n*- и *p*-типа, находящихся на изоляторной стороне вблизи фазового перехода Мотта, с учетом среднеквадратичных флуктуаций потенциальной энергии электронов (или дырок), уширения примесной зоны и ограничения радиуса области локализации электрона (или дырки) на доноре (или акцепторе) при увеличении концентрации легирующих примесей. Также развита модель расчета статической электропроводности и дрейфовой подвижности сильно легированных полупроводников *n*-типа при низких (криогенных) температурах.

В разделе 2.1 на примере полупроводника *n*-типа описывается статистика электронов и зарядовых состояний водородоподобных доноров. Распределение флуктуаций потенциальной энергии электронов *c*-зоны, а также распределение уровней энергии в примесной зоне считаются гауссовыми. Рассчитан сдвиг дна *c*-зоны в запрещенную зону за счет ограничения радиуса области локализации электрона на доноре  $E_{\rm res} = -(2a_{\rm H}/d_{\rm im})I_{\rm d}$ , где  $a_{\rm H} = I_{\rm d}/8\pi\varepsilon_{\rm r}\varepsilon_{\rm 0}$  — боровский радиус,  $I_{\rm d}$  — энергия ионизации (уровень энергии) одиночного донора,  $\varepsilon_{\rm r}\varepsilon_{\rm 0}$  — диэлек-

трическая проницаемость кристаллической матрицы,  $d_{im} = 1,24[(1+K)N]^{-1/3}$  диаметр сферической области кристаллической матрицы, приходящейся на каждый атом примеси,  $N = N_0 + N_{+1}$  концентрация доноров, N<sub>0</sub> и N<sub>+1</sub> — концентрации электрически нейтральных (0) и ионизованных (+1) доноров, К степень компенсации доноров акцепторами (все в зарядовом состоянии (-1)). При этом имеет место условие электрической нейтральности:  $n + KN = N_{+1}$ , где *n* — концентрация электронов в *с*зоне. Тогда дифференциальная термическая энергия ионизации доноров E<sub>1d</sub> относительно дна с-зоны равна

$$E_{1d} = -k_{\rm B} \, \frac{\mathrm{d} \ln(nT^{-3/2})}{\mathrm{d}(1/T)},\tag{1}$$



 $T_1 = 3T_j/2$  и степеней компенсации K: 0,01 (1); 0,3 (2); 0,5 (3); круги — известные экспериментальные данные для полупроводников *n*- и *p*-типа

Рисунок 1. – Зависимость дифференциальной термической энергии ионизации водородоподобных доноров  $E_{1d}$ или акцепторов  $E_{1a}$  от их концентрации Nи степени компенсации K

где *k*<sub>в</sub> — постоянная Больцмана, *T* — абсолютная температура.

На эксперименте значение энергии  $E_{1d}$  определяется в интервале температур со средним значением  $T_1 = 3T_j/2$ , где  $T_j = 0.728 e^2 (KN)^{1/3}/4\pi\epsilon_r\epsilon_0 k_B$  — температура, при которой равны зонная и прыжковая электропроводности<sup>2)</sup>. При температуре  $T_1$  концентрация электронов в *c*-зоне есть  $n(T_1) \ll K(1 - K)N$ , а концентрация и онов примесей равна 2KN.

Из формулы (1) и уравнения электронейтральности  $n + KN = N_{+1}$  следует:

$$E_{1d} = I_d + \Delta_d - \delta E_c, \qquad (2)$$

где  $\delta E_c \approx -E_{\rm res} > 0$ ; значение  $\Delta_d$  при  $KN \approx N_{+1}$  находится из условия

$$2K \approx 1 + \operatorname{erf}(\Delta_{\rm d}/\sqrt{2}W_{\rm d}),\tag{3}$$

где erf(..) — функция ошибок,  $W_d = 2,64e^2(2KN)^{1/3}/4\pi\varepsilon_r\varepsilon_0 \approx 3k_BT_1$  — среднеквадратичная флуктуация уровней энергии доноров относительно уровня  $I_d$  одиночного донора;  $\Delta_d \approx k_BT_1\ln[K/(1-K)]$  — положение уровня Ферми относительно  $I_d$ .

Результаты расчетов по (2) и (3) термической энергии ионизации водородоподобных примесей согласуются с экспериментальными данными для ряда полупроводниковых кристаллов (Ge, Si, алмаз, GaAs, GaP, SiC и ZnSe); рисунок 1.

В разделе 2.2 рассматривается статистика электронов *с*-зоны для полностью ионизованных водородоподобных доноров в сильно легированных кристаллических полупроводниках *n*-типа (Ge, Si, GaAs и InSb) при низких температурах.

<sup>&</sup>lt;sup>2)</sup> Transition temperature from band to hopping direct current conduction in crystalline semiconductors with hydrogen-like impurities: Heat versus Coulomb attraction / N.A. Poklonski [et al.] // Journal of Applied Physics. -2011. - Vol. 110, No 12. -P. 123702 (7 pp.).

Получены формулы для расчета электропроводности и подвижности электронов *с*-зоны на постоянном токе. Результаты расчета электропроводности и подвижности при учете конечного времени рассеяния электрона на одном ионе лучше согласуются с экспериментальными данными по сравнению с расчетами по модели Конуэлл–Вайскопфа. Показано, что вклад электрон-электронного рассеяния в уменьшение дрейфовой подвижности для широкого диапазона концентраций электронов проводимости много меньше, чем вклад от кулоновского рассеяния их на ионах примесей. Для кристаллов *n*-GaAs и *n*-InSb учитывалась также зависимость эффективной массы электронов *с*-зоны от их концентрации.

В главе 3 в дрейфово-диффузионном приближении рассматривается сосуществование прыжковой миграции по двухуровневым трехзарядным точечным дефектам (по *t*-дефектам в зарядовых состояниях Z = -1, 0, +1) одиночных и пар электронов в кристаллических частично разупорядоченных полупроводниках. Также в этом приближении рассматривается миграция дырок *v*-зоны и дырок, мигрирующих посредством прыжков между зарядовыми состояниями (0) и (-1) акцепторов в полупроводниках *p*-типа, с учетом уширения акцепторной зоны и среднеквадратичных флуктуаций потенциальной энергии дырок *v*-зоны.

В разделе 3.1 в дрейфово-диффузионном приближении получена система линейных дифференциальных уравнений для нахождения отклонений от равновесных концентраций  $\delta N_{-1}$ ,  $\delta N_0$  для *t*-дефектов в зарядовых состояниях (-1) и (0), напряженности электрического поля *E* и плотностей токов одиночных электронов ( $J_{-1,0}$  и  $J_{0,+1}$ ) и пар электронов ( $J_{-1,+1}$ ). Отклонение концентрации дефектов  $\delta N_{+1}$  в зарядовом состоянии (+1) и плотность прыжкового тока пар электронов  $J_{-1,+1}$  от равновесных значений связаны с искомыми величинами так:

$$\delta N_{+1}(x) = -\delta N_0(x) - \delta N_{-1}(x); \quad J_{-1,+1}(x) = \frac{2D_{-1,+1}}{D_{-1,0}} \frac{N_{+1}}{N_0} J_{-1,0}(x) + \frac{2D_{-1,+1}}{D_{0,+1}} \frac{N_{-1}}{N_0} J_{0,+1}(x), \quad (4)$$

где  $D_{Z,Z'} = (k_{\rm B}T/e)\xi_{Z,Z'}M_{Z,Z'}$  — коэффициент диффузии прыгающих между дефектами в зарядовых состояниях Z и Z' = -1, 0, +1 электронов;  $M_{Z,Z'}$  — дрейфовая прыжковая подвижность;  $\xi_{Z,Z'} = 1$  в случае узких зон *t*-дефектов ( $W_1, W_2 \ll k_{\rm B}T$ ; разброс значений каждого из двух уровней энергии *t*-дефектов в энергетической щели кристалла много меньше тепловой энергии);  $\xi_{Z,Z'} > 1$  в случае широких зон ( $W_1, W_2 \gg k_{\rm B}T$ );  $N_Z$  — концентрация *t*-дефектов в зарядовом состоянии Z.

Получены формулы для длины экранирования  $\Lambda_s$  электростатического поля и длины диффузии  $\Lambda_d$  при прыжковой миграции одиночных и пар электронов между *t*-дефектами [в зарядовых состояниях (-1), (0) и (+1)]:

$$\Lambda_{\rm s} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\rm r}\varepsilon_0 k_{\rm B} T}{e^2 (N_{-1,0}/\xi_{-1,0} + N_{0,+1}/\xi_{0,+1} + 4N_{-1,+1}/\xi_{-1,+1})}},\tag{5}$$

$$\Lambda_{\rm d} = \sqrt{\frac{N_0(D_{0,+1}D_{-1,0}N_0 + D_{-1,0}D_{-1,+1}N_{-1} + D_{0,+1}D_{-1,+1}N_{+1})}{\alpha N(D_{-1,0}N_{-1}N_0 + D_{0,+1}N_0N_{+1} + 4D_{-1,+1}N_{-1}N_{+1})}},\tag{6}$$

где  $N_{Z,Z'} = N_Z N_{Z'}/(N_{-1} + N_0 + N_{+1})$  — концентрация электронов, прыгающих с *t*дефекта в зарядовом состоянии Z на *t*-дефект в зарядовом состоянии Z'; а коэффициент прыжкового захвата электрона с *t*-дефекта в зарядовом состоянии (-1) на *t*-дефект в зарядовом состоянии (+1), приводящего к появлению двух электрически нейтральных *t*-дефектов [(-1) + (+1)  $\rightarrow$  2(0)]. Из формул (5) и (6) как частные случаи следуют известные выражения для длины экранирования и длины диффузии при прыжковой миграции только одиночных электронов либо только пар электронов между *t*-дефектами в зарядовых состояниях (-1) и (+1).

В разделе 3.2 в дрейфово-диффузионном приближении получена система линейных дифференциальных уравнений для нахождения отклонений от равновесных значений концентраций дырок v-зоны  $\delta p$ , концентраций акцепторов  $\delta N_{-1}$  в зарядовом состоянии (-1), напряженности внешнего стационарного электрического поля и плотностей токов  $J_p$  и  $J_h$  дырок v-зоны и дырок, совершающих прыжки между акцепторами. Показано, что отклонение отношений коэффициентов диффузии к подвижности  $D_p/\mu_p = \xi_p k_{\rm B} T/e$  и  $D_h/M_h = \xi_h k_{\rm B} T/e$  для свободных и прыгающих дырок от классического значения  $k_{\rm B} T/e$  (где  $\xi_p \ge 1$  и  $\xi_h \ge 1$ ) связано с увеличением флуктуаций потенциальной энергии дырок v-зоны и уширением зоны акцепторных состояний за счет разупорядочения кристаллической структуры полупроводника при его сильном легировании.

Получены формулы для длины экранирования электрического поля и длины диффузии при сосуществовании зонной и прыжковой электропроводности:

$$\Lambda_{\rm s} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\rm r}\varepsilon_0 k_{\rm B}T}{e^2[(p/\xi_p) + (N_{\rm h}/\xi_{\rm h})]}}, \quad \Lambda_{\rm d} = \sqrt{\frac{N_0 D_p D_{\rm h}}{\alpha_p N(pD_p + N_{\rm h}D_{\rm h})}}, \tag{7}$$

где p — концентрация дырок v-зоны,  $N_{\rm h} = N_0 N_{-1}/(N_0 + N_{-1})$  — концентрация прыгающих с нейтральных на ионизованные акцепторы дырок,  $\alpha_p$  — коэффициент захвата дырки v-зоны на акцептор в зарядовом состоянии (-1).

Из (7) следует, что при  $p/\xi_p \ll N_h/\xi_h$  длина экранирования  $\Lambda_s$  внешнего электрического поля определяется только эффективной концентрацией участвующих в экранировании прыгающих по акцепторам дырок. Увеличение темпа захвата дырок v-зоны на акцепторы  $\alpha_p$  уменьшает длину диффузии дырок  $\Lambda_d$ .

В главе 4 представлена схема светоизлучающей полупроводниковой гетероструктуры с одиночной квантовой ямой, принцип работы которой основан на излучательных переходах между квантоворазмерными уровнями отрицательно заряженного триона, ускоренного внешним электрическим полем вдоль ямы. Также развита модель локализации электрона из *с*-зоны на ион донорной примеси в полупроводниках *n*-типа под действием внешнего магнитного поля и рассчитана энергия термической ионизации доноров в зависимости от величины магнитной индукции поля. Предложена модель спин-фононного магнитного резонанса электронов *c*-зоны в кристаллах *n*-InSb:Te при температуре T = 300 K.

В разделе 4.1 развита модель излучательного распада отрицательного трио-

на в полупроводниковой гетероструктуре ZnSe/Zn<sub>0,89</sub>Mg<sub>0,11</sub>S<sub>0,18</sub>Se<sub>0,82</sub> с одиночной квантовой ямой (КЯ) из ZnSe на экситон и электрон *с*-зоны с последующей рекомбинацией составляющих экситон электрона и дырки с учетом кинетической энергии поступательного движения триона вдоль КЯ. Для области температур жидкого гелия получено выражение для средней энергии фотона, испускаемого при распаде отрицательно заряженного триона:

$$E_{\rm tr}^{\rm (em)} = E_{\rm g} - I_{\rm ex} - I_{\rm tr} - E_{\rm F} + (m_n E_{\rm F} + m_{\rm tr} E_{\rm tr}^{\rm (kin)})/m_{\rm ex}, \qquad (8)$$

где  $E_{\rm g}$  — ширина энергетической щели КЯ,  $I_{\rm ex}$  — энергия связи экситона,  $I_{\rm tr}$  — энергия связи триона,  $E_{\rm F}$  — уровень Ферми,  $m_n$ ,  $m_{\rm ex}$  и  $m_{\rm tr}$  — эффективные массы электрона, экситона и триона,  $E_{\rm tr}^{\rm (kin)}$  — кинетическая энергия триона в КЯ.

Квадрат ширины линии фотолюминесценции триона можно оценить по формуле:  $(\delta E_{tr}^{(em)})^2 \approx (\delta I_{ex}^{(em)})^2 + (\delta E_F)^2$ , где  $\delta I_{ex}^{(em)}$  — эффективная ширина линии излучения экситона,  $\delta E_F \approx W_e$  — среднеквадратичная флуктуация потенциальной энергии электрона в квантовой яме. Так как для электрона и дырки  $W_e \approx W_h \approx \delta I_{ex}^{(em)}/2$ , то для расчетной величины имеем  $[\delta E_{tr}^{(em)}]_c \approx \sqrt{5/4} \delta I_{ex}^{(em)}$ , что численно согласуется с экспериментальными значениями.

Трион, как и электрон *с*-зоны, имеет дискретный набор уровней энергии в КЯ. Квантоворазмерные уровни энергии  $(I_{tr})_j$  поперечного движения триона (вдоль оси *z*) в квантовой яме определяются из уравнения:

$$(I_{\rm tr})_{j} = \frac{\pi^{2}\hbar^{2}}{2m_{\rm tr}L_{z}^{2}} \left[ j - \frac{2}{\pi} \operatorname{arcctg} \sqrt{\frac{V_{\rm tr}}{(I_{\rm tr})_{j}} - 1} \right]^{2}, \tag{9}$$

где  $\hbar$  — постоянная Планка, j = 1, 2, ... — номер квантоворазмерного уровня энергии триона с эффективной массой  $m_{tr}$ ,  $L_z$  — ширина квантовой ямы,  $V_{tr}$  — глубина потенциальной ямы для триона, равная энергетическому зазору между дном КЯ и первым квантоворазмерным уровнем энергии электрона *с*-зоны КЯ.

На основе дискретизации уровней энергии триона по (9) предлагается возможная схема излучения «горячего» триона в КЯ (рисунок 2) при его переходе с первого возбужденного уровня энергии  $(I_{tr})_2$  на основной уровень энергии  $(I_{tr})_1$ . Для образования трионов в КЯ полупроводниковая гетероструктура возбуждается излучением с энергией  $\hbar\omega_1$  (для заброса электронов  $e^-$  в *c*-зону КЯ из легированных донорами δ-слоев в кристаллической матрице), а также излучением с энергией  $\hbar\omega_2$  (для создания экситонов в КЯ). Пусть первоначально «холодный» трион находится в основном состоянии, определяемом уровнем энергии  $(I_{tr})_1$ . Если приложить продольное внешнее электрическое поле напряженностью  $\mathbf{F}_y$  вдоль оси *y* в плоскости *xy* (в плоскости КЯ), то это приводит к ускорению триона, и он приобретает кинетической энергию  $[(\hbar k_{tr1})^2/2m_{tr}]_y > (I_{tr})_2$ . Можно подобрать такое значение кинетической энергии ускоренного полем  $\mathbf{F}_y$  триона стала практически равной нулю (при этом квазиимпульс триона  $[\hbar k_{tr2}]_y \approx 0$ ). При таком переходе для выполнения законов сохранения энергии и



Штриховой стрелкой показан переход триона под действием внешнего электрического поля  $F_y$  с уровня энергии  $(I_{tr})_1$  на уровень  $(I_{tr})_2$  с последующим испусканием фотона с энергией  $(I_{tr})_2 - (I_{tr})_1 = [\hbar \omega_{tr}]_{21}$ ;  $E_n$  – одноэлектронная энергия Рисунок 2. – Схема светоизлучающей структуры на трионах: a – движение триона (tr<sup>¬</sup>) в КЯ под действием внешнего электрического поля напряженностью  $F_y$  вдоль координатной оси y;  $\delta$  – дискретные (квантоворазмерные) уровни энергии движения отрицательно заряженного триона с учетом его кинетической энергии вдоль КЯ

квазиимпульса необходимо участие фонона. При температурах ниже температуры Дебая ( $T_D = 340$  К для ZnSe) неупругое рассеяние электрона в кристалле сопровождается в основном рождением продольного оптического фонона с энергией  $\hbar\omega_{LO} = 31,5$  мэВ. Закон сохранения энергии при переходе триона между его уровнями энергии в КЯ (рисунок 2) имеет вид:

$$(I_{\rm tr})_1 + [(\hbar k_{\rm tr1})^2 / 2m_{\rm tr}]_v = (I_{\rm tr})_2 + [(\hbar k_{\rm tr2})^2 / 2m_{\rm tr}]_v + \hbar \omega_{\rm lat} \approx (I_{\rm tr})_2 + \hbar \omega_{\rm LO}.$$
(10)

Длина электромагнитной волны, испускаемой движущимся вдоль КЯ трионом (без распада), равна  $[\lambda_{tr}]_{21} = 2\pi v_r / [\omega_{tr}]_{21}$ , где  $v_r = c/n_r$  — скорость фотона  $v_r$ в полупроводниковой гетероструктуре, c — скорость света в вакууме,  $n_r$  — показатель преломления,  $[\omega_{tr}]_{21}$  — угловая частота фотона. Оценка величины  $[\lambda_{tr}]_{21}$ для перехода  $(I_{tr})_2 \rightarrow (I_{tr})_1$  триона в КЯ из ZnSe при  $n_r \approx 2$  и  $[\hbar \omega_{tr}]_{21} = (I_{tr})_2 - (I_{tr})_1 \approx$  $\approx 10$  мэВ дает  $[\lambda_{tr}]_{21} \approx 62$  мкм (дальний инфракрасный диапазон длин волн).

**В разделе 4.2** развита модель локализации электронов *с*-зоны на ионизованных атомах доноров под действием внешнего магнитного поля с индукцией *В*. Получено уравнение для радиуса *R*<sub>t</sub> орбиты электрона вокруг иона донора:

$$\hbar^2 / 2mR_t^2 - e^2 B^2 R_t^2 / 8m - e^2 / 8\pi \varepsilon_r \varepsilon_0 R_t = 0, \qquad (11)$$

где *m* — эффективная масса электрона. Энергия связанного состояния электрона на доноре следует из теоремы вириала для электрона и иона в магнитном поле<sup>3)</sup>. Энергия взаимодействия эффективного спинового магнитного момента электрона  $|g_t|\mu_B/2$  с внешним магнитным полем учитывается отдельным слагаемым. Эта схема расчета дает:  $E_t(\uparrow) = E_t(B) + g_t\mu_B B/2$  и  $E_t(\downarrow) = E_t(B) - g_t\mu_B B/2$ , где  $g_t - g$ -фактор электрона на доноре,  $\mu_B$  — магнетон Бора,

$$E_{\rm t}(B) = [e^2/(8\pi\varepsilon_{\rm r}\varepsilon_0 R_{\rm t})](1 - R_{\rm t}/R_{\rm im}) - m(\omega_{\rm c}R_{\rm t})^2/4.$$
(12)

<sup>&</sup>lt;sup>3)</sup> Любошиц, В.Л. Теорема вириала и условия равновесия системы заряженных частиц в магнитном поле / В.Л. Любошиц // Сообщения ОИЯИ Дубна. – 1996. – Т. 28, № 6. – С. Р4-96-221 (18 с.).

Радиус орбиты  $R_t(B)$  электрона на доноре определяется из уравнения (11). В формуле (12) множитель  $(1 - R_t/R_{im})$ , где  $R_{im} = [4\pi N(1 + K)/3]^{-1/3} = d_{im}/2$ , отражает сдвиг дна *c*-зоны в глубь запрещенной зоны кристалла при увеличении концентрации примесей; величина  $m(\omega_c R_t)^2/4$ , где  $\omega_c = eB/m$ , отражает сдвиг уровня энергии электрона на одиночном доноре к дну *c*-зоны из-за увеличения кинетической энергии локализации электрона; уровень энергии электрона  $E_t(B)$  отсчитывается от дна *c*-зоны нелегированного полупроводника при B = 0.

Используя (1) и уравнение электрической нейтральности  $n(B) + KN = N_{+1}(B)$ , где n(B) — концентрация электронов *с*-зоны в магнитном поле,  $N_{+1}(B)$  — концентрация ионизованных доноров в магнитном поле, получена формула для расчета термической энергии ионизации атомов водородоподобных доноров в невырожденных полупроводниках *n*-типа во внешнем магнитном поле в виде:

$$E_{1d} = E_{t}(B) + \frac{1}{2}\hbar\omega_{c}\operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega_{c}}{2k_{B}T}\right) + g_{t}\mu_{B}B\operatorname{th}\left(\frac{g_{t}\mu_{B}B}{2k_{B}T}\right) - g_{n}\mu_{B}B\operatorname{th}\left(\frac{g_{n}\mu_{B}B}{2k_{B}T}\right) - k_{B}T, \quad (13)$$

где  $\omega_c$  — циклотронная частота,  $g_n$  — g-фактор электрона c-зоны.

Расчет по (13) согласуется с известными экспериментальными данными для кристаллов *n*-GaAs<sup>4)</sup> ( $g_t \approx 2$ ,  $g_n = -0,44$ ) и *n*-InSb<sup>5)</sup> ( $g_t \approx -45$ ,  $g_n = -51,55$ ), находящихся на изоляторной стороне перехода Мотта.

**В разделе 4.3** предложена модель спин-фононного магнитного резонанса в кристаллах антимонида индия *n*-типа с концентрацией электронов *c*-зоны *n* от  $6 \cdot 10^{15}$  до  $5 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>. [Резонанс наблюдался<sup>6)</sup> на радиочастоте 10 МГц при комнатной температуре; резонансное значение магнитной индукции  $B_r(n)$  увеличивается от 0,18 до 1,7 Тл.] Рассматривается поглощение фонона электроном *c*-зоны, имеющим проекцию (квази)волнового вектора  $k_{1z}$  на координатную ось *z*, параллельную направлению вектора магнитной индукции **B** внешнего постоянного поля, с последующим переворотом спина электрона и переходом его на более высокий по энергии уровень Ландау (рисунок 3, *a*). Закон сохранения *z*-компоненты волнового вектора электрона *c*-зоны при поглощении им оптического фонона записывается в виде  $k_{2z} = k_{1z} + q \cos \theta$ , где  $k_{1z}$ , модули волнового вектора электрона *c*-зоны до и после поглощения оптического фонона, *q* — величина квазиволнового вектора фонона,  $\theta$  — угол между направлением волнового вектора фонона,  $\theta$  — угол между направлением волнового вектора фонона *g* в кристалле и осью *z*. После усреднения по равновероятным значениям угла  $\theta$  закон сохранения энергии принимает вид:

$$\hbar^2 q^2 / 4m + |g_n| \mu_{\rm B} B_{\rm r} + (\zeta_{\rm f} - \zeta_{\rm i}) \hbar \omega_{\rm c} = E_{\rm ph}(q) + \hbar \omega_{\rm rw}, \qquad (14)$$

<sup>&</sup>lt;sup>4)</sup> Jouault, B. Ionization energy of magnetodonors in pure bulk GaAs / B. Jouault, A. Raymond, W. Zawadzki // Physical Review B. – 2002. – Vol. 65, № 24. – P. 245210 (7 pp.).

<sup>&</sup>lt;sup>5)</sup> Ionization energy of magnetodonors in InSb / A. Raymond [et al.] // Journal of Physics C: Solid State Phys. – 1984. – Vol. 17, № 13. – P. 2381–2389.

<sup>&</sup>lt;sup>6)</sup> Кондратьев, М.В. Резонансное поглощение электромагнитной волны в примесных полупроводниках *n*-InSb / М.В. Кондратьев // Физика и техника полупроводников. – 1986. – Т. 20, № 8. – С. 1485–1487.



Рисунок 3. – Схема уровней Ландау и подуровней Зеемана, а также прямые и непрямые переходы электронов *с*-зоны между ними в кристалле *n*-InSb:Te во внешнем магнитном поле (*a*) и зависимость отношения интенсивности сигналов магнитного резонанса в *j*-м образце к 1-му образцу  $Y_j/Y_1$  (левая шкала) и отношения ширины линии резонанса в *j*-м образце к 1-му образцу  $\delta B_{rj}/\delta B_{r1}$  (*б*) от концентрации электронов *n*; круги и квадраты — экспериментальные данные<sup>6</sup>

где m = m(n) — эффективная масса электрона,  $g_n = g_n(n)$  — g-фактор электрона,  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $B_r = B_r(n)$  — резонансное значение магнитной индукции,  $\omega_c = \omega_c(n)$  — циклотронная частота электрона *c*-зоны,  $E_{ph}$  — энергия фонона,  $\omega_{rw} = 2\pi f_{rw}$  — угловая частота сигнальной (поглощаемой образцом) радиоволны ( $f_{rw} = 10$  МГц). При расчетах учтена зависимость эффективной массы, подвижности, *g*-фактора и резонансного значения магнитной индукции от концентрации *n* электронов *c*-зоны. Для поперечных оптических фононов  $q \approx 0$  (центр зоны Бриллюэна),  $E_{ph}(0) \approx 22,9$  мэВ (тепловая энергия  $k_BT \approx 25,9$  мэВ при температуре T = 300 К); величина  $\zeta_f - \zeta_i$  определялась по измеренному значению  $B_r$ .

Поглощение радиоволн образцом происходит не во всем его объеме 1,5×  $\times 2 \times 10$  мм<sup>3</sup>, а только в скин-слое (вдоль направления с размером 10 мм). Поэтому отношение интегральной интенсивности сигнала магнитного резонанса *j*го образца к интенсивности сигнала 1-го образца равно отношению чисел электронов *c*-зоны в областях, где происходит резонансное поглощение ими магнитной компоненты радиоволны:  $Y_j/Y_1 = n_j \langle \delta_{sj} \rangle / n_1 \langle \delta_{s1} \rangle$ , где  $n_j$  — концентрация электронов *c*-зоны в *j*-м образце,  $\langle \delta_{sj} \rangle$  — глубина скин-слоя для радиоволны с частотой 10 МГц в *j*-м образце, усредненная по интервалу индукции со средним значением  $B_t(n_j)$  при регистрации линии магнитного резонанса, j = 1, ..., 6 номера образцов *n*-InSb:Te;  $n_1 = 6 \cdot 10^{15}$ ,  $n_2 = 1 \cdot 10^{16}$ ,  $n_3 = 5.8 \cdot 10^{16}$ ,  $n_4 = 1 \cdot 10^{17}$ ,  $n_5 = 9 \cdot 10^{17}$ ,  $n_6 = 5 \cdot 10^{18}$  — концентрация электронов в образцах (в единицах см<sup>-3</sup>). Расчет относительной интенсивности  $Y_j/Y_1$  сигналов магнитного резонанса в сравнении с экспериментальными данными представлен на рисунке 3, *б*.

Флуктуации потенциальной энергии электронов *с*-зоны обусловливают неэквидистантность уровней (парабол) Ландау в пределах образца и сосуществование вертикальных и невертикальных переходов электронов на диаграмме «одноэлектронная энергия – пространственная координата». Это определяет уширение линии спин-фононного магнитного резонанса при переходах электронов между зеемановскими подуровнями уровней Ландау. При этом для отношения ширины линии резонанса в *j*-м образце  $\delta B_{rj}$  к ширине линии в 1-м образце  $\delta B_{r1}$  выполняется  $\delta B_{rj}/\delta B_{r1} \approx W_{nj}/W_{n1}$ , где  $W_{nj}$  — среднеквадратичная флуктуация потенциальной энергии электрона *с*-зоны в *j*-м образце.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

#### Основные научные результаты диссертации

1) Развита модель уменьшения термической энергии ионизации водородоподобных примесей при увеличении их концентрации (вплоть до фазового перехода изолятор-металл, иначе перехода Мотта) в умеренно компенсированных ковалентных полупроводниках *n*- и *p*-типа, учитывающая: 1) сдвиг края зоны свободных состояний в запрещенную зону за счет ограничения радиуса области локализации электрона (дырки) на примеси; 2) уширение примесной зоны, сдвигающее уровень Ферми от центра примесной зоны к дну с-зоны в кристаллах *п*-типа (к потолку *v*-зоны в кристаллах *p*-типа). Показано, что относительное уменьшение термической энергии ионизации доноров в кристаллах *n*-типа (акцепторов в кристаллах *p*-типа) из-за уменьшения доступной для локализации электрона (дырки) области кристаллической матрицы с увеличением концентрации легирующей N и компенсирующей KN примесей равно отношению боровского радиуса  $a_{\rm H}$  к радиусу  $R_{\rm im} \approx 0.62 [(1+K)N]^{-1/3}$  сферической области матрицы, приходящейся на один атом примеси, а сдвиг уровня Ферми пропорционален ширине примесной зоны. Результаты расчета по предложенным формулам количественно согласуются с данными для кристаллов германия, кремния, алмаза, арсенида и фосфида галлия, карбида кремния и селенида цинка [6].

2) В квазиклассическом приближении квантовой механики рассчитаны статическая электропроводность и дрейфовая подвижность электронов *с*-зоны в сильно легированных слабо компенсированных кристаллах кремния и германия *n*-типа для температуры жидкого гелия и в кристаллах арсенида галлия и антимонида индия *n*-типа для температуры жидкого азота. Показано, что уменьшение подвижности при увеличении концентрации примесей связано с уменьшением радиуса области кристалла, приходящейся на один атом примеси, и увеличением темпа упругого кулоновского рассеяния электрона на ионах примеси при конечной длительности его рассеяния на одном ионе [3, 9, 10].

3) В дрейфово-диффузионном приближении рассчитаны длина экранирования электрического поля и длина диффузии электронов в полупроводниках, содержащих точечные дефекты одного сорта в трех зарядовых состояниях (-1, 0, +1) при сосуществовании стационарной прыжковой миграции как одиночных, так и пар электронов. Показано, что учет прыжков пар электронов с дефектов в зарядовом состоянии (-1) на дефекты в зарядовом состоянии (+1) уменьшает длину экранирования за счет увеличения концентрации экранирующих зарядов, а также изменяет длину диффузии электронов, полученную при учете прыжков только одиночных электронов по схеме:  $(-1) \rightarrow (0)$  и  $(0) \rightarrow (+1)$  [2, 5].

4) В дрейфово-диффузионном приближении рассчитаны длина экранирования электрического поля и длина диффузии в легированных водородоподобными акцепторами полупроводниках (на примере алмаза *p*-типа) при сосуществовании зонной (по состояниям *v*-зоны) и прыжковой (между акцепторами в зарядовых состояниях (0) и (–1)) электропроводности на постоянном токе. Показано, что увеличение отношения коэффициента диффузии к дрейфовой подвижности для дырок *v*-зоны по отношению с классической величиной  $k_{\rm B}T/e$ происходит по мере увеличения концентрации дырок [2, 4].

5) Рассмотрена энергетика и кинематика излучательного распада подвижного отрицательно заряженного триона (связанного состояния экситона и электрона) в полупроводниковой гетероструктуре ZnSe/Zn<sub>0.89</sub>Mg<sub>0.11</sub>S<sub>0.18</sub>Se<sub>0.82</sub> с одиночной плоской квантовой ямой ZnSe (наполненной электронами из δ-слоя доноров в широкозонной кристаллической матрице) на экситон и электрон с-зоны с последующей излучательной рекомбинацией образующих экситон электрона и дырки. Показано, что энергия испускаемого при излучательном распаде триона фотона линейно увеличивается с увеличением кинетической энергии поступательного движения триона вдоль ямы. Показано, что ширина линии излучения триона при его распаде определяется величиной среднеквадратичной флуктуации потенциальной энергии электрона с-зоны в квантовой яме. Впервые предложена схема светоизлучающей приборной структуры на трионах. Излучение обусловлено переходами триона (без распада) между квантоворазмерными уровнями энергии в квантовой яме при ускорении его стационарным внешним электрическим полем вдоль плоскости ямы. Длина волны излучения триона может варьироваться (при увеличении напряженности поля) от субмиллиметрового до среднего инфракрасного диапазона и пропорциональна произведению эффективной массы триона на квадрат ширины квантовой ямы и обратно пропорциональна показателю преломления света квантовой ямой [1].

6) Предложена квазиклассическая модель локализации электронов из *с*-зоны на ионы водородоподобных доноров в невырожденных прямозонных полупроводниках *n*-типа [GaAs с концентрацией доноров  $N = 3,5 \cdot 10^{14}$  см<sup>-3</sup> и степенью компенсации K = 0,48 и InSb ( $N = 7,82 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>, K = 0,3)] под действием внешнего постоянного однородного магнитного поля. Модель учитывает: 1) условие баланса центробежной, кулоновской и лоренцевой сил, действующих на электрон, захваченный на ион; 2) условие квантования орбит «оптического» электрона донора по Бору–Зоммерфельду; 3) дискретизацию зоны свободных состояний электронов в *с*-зоне на уровни Ландау; 4) зеемановское расщепление уровней Ландау; 5) теорему вириала для электронов и ионов в магнитном поле.

Результаты расчета по модели показывают, что увеличение индукции магнитного поля приводит к увеличению термической энергии ионизации атомов примесей, что согласуется с известными экспериментальными данными [7, 11].

7) Предложена модель спин-фононного магнитного резонанса на частоте 10 МГц в легированных теллуром кристаллах антимонида индия *n*-типа с концентрацией электронов *с*-зоны от  $6 \cdot 10^{15}$  до  $5 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup> при комнатной температуре в магнитных полях от 0,18 до 1,7 Тл. Положение центра линии сигнала магнитного резонанса связано с величиной магнитной индукции, необходимой для появления такого расщепления уровней энергии электронов, при котором энергетически возможен переход электрона с нижнего зеемановского подуровня нижнего уровня Ландау на верхний зеемановский подуровень верхнего уровня Ландау с переворотом спина электрона путем поглощения им поперечного оптического фонона и кванта энергии радиоволны с частотой 10 МГц, детектирующей магнитный резонанс. Ширина линии магнитного резонанса обусловлена флуктуациями потенциальной энергии электронов с-зоны из-за кулоновского взаимодействия их как с ионами примесей, так и между собой. Интенсивность сигнала резонанса пропорциональна произведению концентрации электронов на толщину скин-слоя на частоте 10 МГц при учете зависимости электропроводности образцов от индукции постоянного магнитного поля [8].

#### Рекомендации по практическому использованию результатов

1) Результаты исследования излучательного распада триона в квантовой яме полупроводниковой гетероструктуры, стационарной миграции дырок v-зоны и прыгающих между акцепторами дырок в кристаллическом полупроводнике, а также результаты расчетов электропроводности на постоянном токе и дрейфовой подвижности электронов сильно легированных полупроводников *n*-типа внедрены в учебный процесс на кафедре физики полупроводников и наноэлектроники и кафедре физики твердого тела физического факультета БГУ.

2) Результаты расчетов уменьшения термической энергии ионизации водородоподобных атомов примесей при увеличении их концентрации могут быть использованы для оценки качества полупроводниковых материалов при проектировании элементов приборных структур. Схема полупроводниковой гетероструктуры с одиночной квантовой ямой из ZnSe, принцип работы которой основан на излучательных переходах движущихся вдоль ямы под действием стационарного внешнего электрического поля отрицательно заряженных трионов между их квантоворазмерными уровнями энергии, может быть использована для разработки новых светоизлучающих приборов. Объясненный моделью сдвиг резонансного значения магнитного поля при спин-фононном резонансе в сильно легированных атомами теллура кристаллах антимонида индия *n*-типа при комнатной температуре показывает на возможность использования их в качестве детекторов радиоволнового излучения.

# СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

# Статьи в научных журналах в соответствии с п. 18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий в Республике Беларусь

1. Излучательный распад триона в квантовой яме полупроводниковой гетероструктуры / Н.А. Поклонский, А.Н. Деревяго, С.А. Вырко, А.И. Сягло // Журнал прикладной спектроскопии. – 2017. – Т. 84, № 4. – С. 586–594.

2. Drift-diffusion model of hole migration in diamond crystals via states of valence and acceptor bands / N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.I. Kovalev, A.N. Dzeraviaha // Journal of Physics Communications. -2018. - Vol. 2, No 1. - P. 015013 (1–14).

3. Поклонский, Н.А. Квазиклассическая модель статической электропроводности сильно легированных вырожденных полупроводников при низких температурах / Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Н. Деревяго // Физика и техника полупроводников. – 2018. – Т. 52, вып. 6. – С. 544–553.

4. Поклонский, Н.А. Модель стационарной миграции свободных и прыгающих между акцепторами дырок в кристаллическом полупроводнике / Н.А. Поклонский, А.Н. Деревяго, С.А. Вырко // Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия физико-математических наук. – 2020. – Т. 56, № 1. – С. 92–101.

5. Миграция электронов по трехзарядным дефектам кристаллической матрицы / Н.А. Поклонский, А.Н. Деревяго, С.А. Вырко, А.И. Ковалев // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. – 2020. – № 1. – С. 41–53.

6. Поклонский, Н.А. Термическая энергия ионизации водородоподобных примесей в полупроводниковых материалах / Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Н. Деревяго // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. – 2020. – № 2. – С. 28–41.

7. Поклонский, Н.А. Локализация внешним магнитным полем электронов на ионах водородоподобных доноров в невырожденных полупроводниках / Н.А. Поклонский, А.Н. Деревяго, С.А. Вырко // Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия физико-математических наук. – 2020. – Т. 56, № 2. – С. 239–252.

8. Поклонский, Н.А. Спин-фононный магнитный резонанс электронов проводимости в кристаллах антимонида индия / Н.А. Поклонский, А.Н. Деревяго, С.А. Вырко // Журнал прикладной спектроскопии. – 2020. – Т. 87, № 4. – С. 595–604.

## Статьи в сборниках материалов научных конференций

9. Деревяго, А.Н. Дрейфовая подвижность электронов в вырожденных полупроводниках / А.Н. Деревяго // Физика конденсированного состояния: материалы XXIV междунар. науч.-практ. конф. аспир., магистр, и студ. (Гродно, 21 апр. 2016г.) / ГрГУ им. Я. Купалы, физ.-техн. фак.; редкол.: В.Г. Барсуков (гл. ред.) [и др.]. – Гродно: ГрГУ, 2016. – С. 128–130. 10. Деревяго, А.Н. Расчет подвижности дырок в вырожденных полупроводниках *р*-типа / А.Н. Деревяго // Физика конденсированного состояния: материалы XXV междунар. науч.-практ. конф. аспир., магистр, и студ. (Гродно, 20 апр. 2017 г.) / ГрГУ им. Я. Купалы, физ.-техн. фак.; редкол.: В.Г. Барсуков (гл. ред.) [и др.]. – Гродно: ГрГУ, 2017. – С. 142–144.

### Тезисы докладов на конференциях

11. Poklonski, N.A. Ionization equilibrium of *c*-band electrons and hydrogen-like donors in semiconductors under quantizing magnetic field [Electronic resource] / N.A. Poklonski, A.N. Dzeraviaha, S.A. Vyrko // Proc. of E-MRS 2018 Spring Meeting, Symp. B: "Theoretical searches for innovative materials for energy harvesting and storage", Strasbourg (France), June 18–22, 2018. – Strasbourg, 2018. – PosterID B.P2.38. – Mode of access: www.european-mrs.com/theoretical-searches-innovative-materials-energy-harvesting-and-storage-emrs. – Date of access: 08.10.2020.

A

## 19 РЕЗЮМЕ Деревяго Александр Николаевич

# КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И СПИН-ФОНОННОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ДЛЯ СИЛЬНО ЛЕГИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Ключевые слова: сильно легированный полупроводник, термическая энергия ионизации, электропроводность и подвижность, длина экранирования и диффузии, трион, магнитный резонанс, локализация магнитным полем.

**Цель работы** — аналитическое и численное исследование электрической проводимости и подвижности электронов, энергии ионизации водородоподобных примесей в отсутствие и при наличии внешнего магнитного поля, дрейфа и диффузии, излучательного распада отрицательного триона и магнитного резонанса в сильно легированных и умеренно компенсированных полупроводниках.

Методы исследования и использованная аппаратура: квазиклассическое приближение квантовой механики, статистическая физика точечных дефектов, электронов и дырок, миграция квазичастиц, решение систем дифференциальных уравнений.

Полученные результаты и их новизна: 1) развита модель расчета термической энергии ионизации водородоподобных атомов примесей в полупроводниках *п*-и *р*-типа с учетом сдвига дна *с*-зоны (или потолка *v*-зоны) за счет ограничения радиуса области локализации электрона (или дырки) на доноре (на акцепторе) полупроводников *n*-типа (или *p*-типа) при увеличении концентрации легирующих примесей; 2) впервые в аналитическом виде получены формулы для длины экранирования и длины диффузии в полупроводниках с трехзарядными точечными дефектами при одновременном существовании прыжков как одиночных, так и пар электронов по дефектам; 3) впервые предложена светоизлучающая структура, принцип работы которой основан на переходах между квантоворазмерными уровнями энергии триона в квантовой яме; 4) рассчитана термическая энергия ионизации водородоподобных доноров в невырожденных полупроводниках *n*-типа во внешнем постоянном однородном магнитном поле; 5) предложена модель спин-фононного магнитного резонанса в полупроводниковых кристаллах *n*-InSb:Te с концентрацией электронов в *c*-зоне от  $6 \cdot 10^{15}$  до 5·10<sup>18</sup> см<sup>-3</sup>, описывающая поглощение кванта энергии радиоволны с частотой 10 МГц и поперечного оптического фонона, приводящее к переходу электрона с нижнего на более высокий по энергии уровень Ландау с переворотом спина электрона.

**Рекомендации по использованию и область применения.** Результаты могут использоваться в учебном процессе на физическом факультете БГУ, а также при проектировании радиационно-стойких элементов приборных структур.

# 20 РЭЗЮМЭ Дзеравяга Аляксандр Мікалаевіч

## КВАЗІКЛАСІЧНЫЯ МАДЭЛІ ЭЛЕКТРАПРАВОДНАСЦІ, ЭЛЕКТРАЛЮМІНЕСЦЭНЦЫІ І СПІН-ФАНОННАГА МАГНІТНАГА РЭЗАНАНСУ ДЛЯ МОЦНА ЛЕГІРАВАНЫХ ПАЎПРАВАДНІКОЎ

**Ключавыя словы:** моцна легіраваны паўправаднік, тэрмічная энергія іанізацыі, электраправоднасць і рухомасць, даўжыня экранавання і дыфузіі, трыон, магнітны рэзананс, лакалізацыя магнітным полем.

**Мэта працы** — аналітычнае і колькаснае даследаванне электрычнай праводнасці і рухомасці электронаў, энергіі іанізацыі вадародападобных прымесей у адсутнасці і пры наяўнасці вонкавага магнітнага поля, дрэйфу і дыфузіі, выпраменьвальнага распаду адмоўнага трыона і магнітнага рэзанансу ў моцна легіраваных і умерана кампенсаваных паўправадніках.

Метады даследавання і скарыстаная апаратура: квазікласічнае набліжэнне квантавай механікі, статыстычная фізіка кропкавых дэфектаў, электронаў і дзірак, міграцыя квазічасціц, рашэнне сістэм дыферэнцыяльных раўнанняў.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: 1) развіта мадэль разліку тэрмічнай энергіі іанізацыі вадародападобных атамаў дамешкаў у паўправадніках *n*- і *p*-тыпу з улікам зруху дна с-зоны (або столі *v*-зоны) за кошт абмежавання радыусу вобласці лакалізацыі электрона (або дзіркі) на донары (на акцептары) паўправаднікоў *п*-тыпу (*p*-тыпу) пры павелічэнні канцэнтрацыі легіруючых дамешкаў; 2) упершыню у аналітычным выглядзе атрыманы формулы для даўжыні экранавання і даўжыні дыфузіі ў паўправадніках з двухузроўневымі трохзараднымі дэфектамі пры адначасовым існаванні скачкоў як адзіночных, так і пар электронаў па дэфектах; 3) упершыню прапанаваная святловыпраменьваючая структура, прынцып працы якой заснаваны на пераходах паміж квантава-размернымі ўзроўнямі энергіі трыона ў квантавай яме; 4) разлічана тэрмічная энергія іанізацыі вадародападобных атамаў дамешкаў у нявыраджаных паўправадніках у вонкавым пастаянным аднародным магнітным полі; 5) прапанавана мадэль спін-фаноннага магнітнага рэзанансу ў паўправадніковых крышталях *n*-InSb:Te з канцэнтрацыяй электронаў у *c*-зоне ад  $6 \cdot 10^{15}$  да  $5 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>, якая апісвае паглынанне кванта энергіі радыёхвалі з частатой 10 МГц і папярочнага аптычнага фанону, што прыводзіць да пераходу электрона з ніжняга на больш высокі па энергіі ўзровень Ландау з пераваротам спіна электрона.

**Рекамендацыі по выкарыстанні і галіны прымянення.** Вынікі могуць выкарыстоўвацца ў навучальным працэсе на фізічным факультэце БДУ, а таксама пры праектаванні радыяцыйна-стойкіх элементаў прыборных структур.

## 21 SUMMARY Dzeraviaha Aliaksandr Mikalaevich

## QUASICLASSICAL MODELS OF ELECTROCONDUCTIVITY, ELECTROLUMINESCENCE AND SPIN-PHONON MAGNETIC RESONANCE FOR HEAVILY DOPED SEMICONDUCTORS

**Keywords:** heavily doped semiconductor, thermal ionization energy, electrical conductivity and mobility, screening and diffusion length, trion, magnetic resonance, localization by a magnetic field.

The goal of this work: analytical and numerical study of the electrical conductivity and mobility of electrons, the ionization energy of a hydrogen-like impurities in the absence and in the presence of an external magnetic field, drift and diffusion, radiative decay of negative trion and magnetic resonance in heavily doped and moderately compensated semiconductors.

**Methods of the study and used equipment:** quasi-classical approximation of quantum mechanics, statistical physics of point defects, electrons and holes, migration of quasiparticles, solution of systems of differential equations.

The obtained results and their novelty: 1) a model has been developed for calculating the thermal ionization energy of hydrogen-like impurity atoms in *n*- and *p*type semiconductors, taking into account the shift of the bottom of the *c*-band (or top of the v-band) due to the limitation of the radius of the region of localization of an electron (or hole) on the donor (or acceptor) of *n*-type (or *p*-type) semiconductors with an increase in the concentration of dopants; 2) formulas for the screening length and diffusion length in semiconductors with two-level three-charged defects with the simultaneous existence of hops of both single and pairs of electrons over defects are obtained in an analytical form for the first time; 3) a light-emitting structure was proposed for the first time, the principle of which is based on transitions between quantum-dimensional energy levels of a trion in a quantum well; 4) the thermal ionization energy of hydrogen-like impurity atoms in non-degenerate semiconductors in an external constant uniform magnetic field was calculated; 5) a model of spin-phonon magnetic resonance in n-InSb:Te semiconductor crystals with the c-band electron concentration from  $6 \cdot 10^{15}$  to  $5 \cdot 10^{18}$  cm<sup>-3</sup> was proposed, which describes the absorption of a quantum of energy of a radio wave with a frequency of 10 MHz and an transverse optical phonon, leading to the transition of an electron from the lower to a higher Landau energy level with a flip of electron spin.

**Recommendations for the use and application area.** The results can be used in the educational process at the Faculty of Physics of BSU, as well as in the design of radiation-resistant elements of device structures.

 $\square$