

## ВЛИЯНИЕ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА НА ЗАХВАТ И ЭМИССИЮ НОСИТЕЛЕЙ ГЛУБОКИМИ ЦЕНТРАМИ

А. А. Пахомов, И. Н. Ясневич

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021, Санкт-Петербург, Россия  
(Получена 7.09.1992. Принята к печати 28.09.1992)

Рассмотрены захват и эмиссия носителей глубокими центрами вблизи интерфейса (поверхности кристалла, гетероперехода). Показано, что темпы эмиссии и захвата носителей на такие центры экспоненциально возрастают по мере приближения дефекта к интерфейсу.

*Введение.* Как известно, энергия связи носителя на глубоком центре может существенно измениться в случае, когда такой центр находится вблизи гетерограницы или поверхности кристалла (см., например, [1, 2]). При этом характерное расстояние, на котором влияние поверхности становится существенным, определяется масштабом убывания волновой функции локализованного состояния:

$$R \sim \kappa^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\varepsilon}}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon$  — энергия связи носителя на глубоком центре в объеме кристалла. Типичное значение  $\varepsilon$  для глубоких центров порядка нескольких десятых электронвольта, поэтому существенного изменения энергии связи можно, в силу (1), ожидать лишь для дефектов, удаленных от поверхности не более чем на 10—20 Å. Далее будет показано, что граница раздела существенно влияет на многофононные процессы захвата и эмиссии носителей глубокими центрами, удаленными от поверхности на значительно большее расстояние (порядка сотен Å).

### 1. Энергия связи электрона на приповерхностном дефекте

Будем считать потенциальный барьер на границе полупроводника бесконечно высоким, при этом электронные волновые функции должны обращаться в нуль на поверхности. В рамках модели потенциала нулевого радиуса [3] волновую функцию электрона, локализованного на дефекте вблизи поверхности, удовлетворяющую граничному условию  $\psi|_{z=0} = 0$ , можно построить методом зеркального отражения [4]:

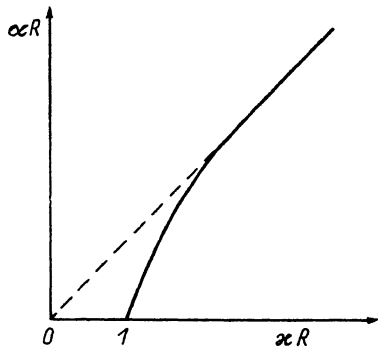
$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -A \{G_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - G_{\alpha}(\mathbf{r}, -\mathbf{R})\}, \quad (2)$$

где

$$G_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-\alpha|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} \quad (3)$$

— функция Грина электрона с энергией  $-\hbar^2\alpha^2/2m$ , соответствующая точечному источнику с радиусом-вектором  $\mathbf{R} = R\mathbf{e}_z$ ;  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор нормали к поверх-

Рис. 1. Зависимости параметра  $\alpha$ , определяющего зависимость энергии связи электрона на приповерхностном дефекте, от параметра  $\kappa$ , характеризующего короткодействующий потенциал дефекта в приближении потенциала нулевого радиуса. Величины  $\alpha$  и  $\kappa$  даны в единицах  $R^{-1}$ , где  $R$  — расстояние от дефекта до поверхности.



ности,  $A$  — нормировочный множитель; ось  $z$  направлена от поверхности в сторону дефекта.

Волновая функция (2) описывает антисимметричное (нечетное) состояние электрона, локализованного на паре центров нулевого радиуса, расположенных зеркально-симметрично на расстоянии  $R$  от поверхности. Энергию связи  $\varepsilon_b(R) = \hbar^2 \alpha^2 / 2m$  можно найти, потребовав выполнения при  $|R - r| \rightarrow 0$  граничного условия [3]:

$$\psi(r, R) = \frac{Am}{2\pi\hbar^2} \left( \frac{1}{|R - r|} - \kappa \right) + O(|R - r|). \quad (4)$$

Параметр  $\kappa$  характеризует короткодействующий потенциал дефекта и, согласно (1), определяет энергию связи электрона на глубоком центре в объеме полупроводника.<sup>1</sup> Подставив (2), (3) в (4), приходим к трансцендентному уравнению, определяющему зависимость энергии связи электрона на дефекте от расстояния до границы,

$$\alpha + \frac{e^{-2\alpha R}}{R} = \kappa, \quad (5)$$

которое, как и следовало ожидать, совпадает с уравнением для энергии связи нечетного состояния электрона на паре центров, расположенных на расстоянии  $2R$  друг от друга. Для нас особенно существенны две особенности уравнения (5). Во-первых, при  $R \rightarrow \infty$   $\alpha \rightarrow \kappa$ , т. е. энергия связи стремится к своему объемному значению; во-вторых, при  $\kappa = 1/R$  энергия связи обращается в нуль. Схематический график зависимости  $\alpha(\kappa, R)$  приведен на рис. 1.

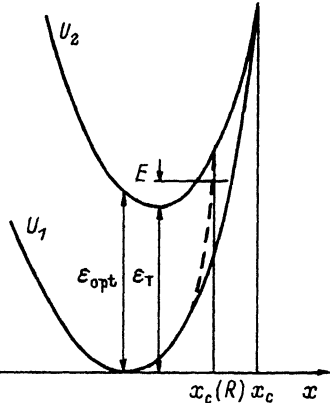
## 2. Классическая картина многофононных переходов

Вероятности процессов многофононного захвата и эмиссии носителей определяются поведением адиабатических потенциалов (термов), отвечающих свободному и связанному на дефекте электрону. При этом определяющий вклад вносит окрестность точки встречи термов, т. е. область малых энергий связи электрона [5, 6]. Характерный масштаб убывания волновой функции связанного состояния при уменьшении энергии связи стремится к бесконечности, поэтому поверхность, согласно (1), должна существенно влиять на ход адиабатических термов даже для достаточно удаленных от нее дефектов.

Наиболее просто поправки к коэффициентам эмиссии и захвата носителей можно найти в рамках классической теории многофононных переходов [5, 6], справедливой при высоких температурах (как правило, выше или порядка комнатной) и сильном электрон-фононном взаимодействии. В этом случае влияние поверхности сводится к уменьшению высоты потенциального барьера в конфигурационном пространстве, разделяющего колебательные состояния дефекта со

<sup>1</sup> Условие (4) равносильно предположению о том, что внутри области действия потенциала дефекта влиянием поверхности можно пренебречь.

Рис. 2. Схема адиабатических потенциалов (термов).  $U_1$  — адиабатический колебательный потенциал дефекта со связанным электроном,  $U_2$  — дефекта без электрона. Сплошными линиями показан ход термов для дефекта в объеме кристалла, пунктиром — для дефекта, удаленного на расстояние  $R$  от поверхности;  $x$  — конфигурационная координата локальных колебаний,  $\varepsilon_T$ ,  $\varepsilon_{opt}$  соответственно термическая и оптическая энергии ионизации дефекта.



связанным электроном (состояние 1) и без электрона (состояние 2) (рис. 2). Пусть адиабатический колебательный потенциал  $U_1(x, R)$  соответствует дефекту со связанным электроном, удаленному на расстояние  $R$  от поверхности. Тогда имеет место соотношение

$$U_1(x, R) = U_2(x) - \varepsilon_b(x, R), \quad (6)$$

где  $U_2(x)$  — адиабатический потенциал «пустого» дефекта,  $\varepsilon_b(x, R)$  — энергия связи электрона на центре,  $x$  — конфигурационная координата локальных колебаний (в дальнейшем будем называть  $x$  координатой ядра). В точке встречи термов  $x_c(R)$  энергия связи должна обращаться в нуль, т. е. должно выполняться равенство

$$\alpha[R, x_c(R)] = 0. \quad (7)$$

Согласно (5), это соотношение эквивалентно равенству

$$x|_{x=x_c(R)} = \frac{1}{R}. \quad (8)$$

Уравнение (8) в неявном виде определяет положение точки встречи термов в конфигурационном пространстве как функцию расстояния  $R$ .

В работе [5] показано, что в модели потенциала нулевого радиуса параметр  $\alpha$  зависит от координаты ядра  $x$  по линейному закону:

$$x(x) = \sqrt{\frac{\beta m M \omega^2}{\hbar^2}} (x_c - x), \quad (9)$$

где  $x_c = x_c(\infty)$  — точка, в которой энергия связи обращается в нуль для дефекта в объеме кристалла,  $M$  — эффективная масса ядра,  $\omega$  — частота колебаний ядра в состоянии 2;  $\beta$  — безразмерная константа связи электрон-фононного взаимодействия,  $m$  — эффективная масса электрона. Используя (8), (9), находим

$$\delta x_c(R) = x_c - x_c(R) = \sqrt{\frac{2\varepsilon_R}{\beta M \omega^2}}, \quad (10)$$

где для удобства дальнейших вычислений введена величина

$$\varepsilon_R = \frac{\hbar^2}{2mR^2}, \quad (11)$$

имеющая смысл энергии размерного квантования одномерного движения электрона между центром и границей кристалла.

Высота потенциального барьера для переходов ядра между состояниями 1 и 2 определяется величиной потенциальной энергии колебаний в точке встречи термов:  $\varepsilon_2(R) = U_2[x_c(R)]$  (см. рис. 2). В параболическом приближении адиабатический потенциал пустого дефекта имеет вид  $U_2(x) = M\omega^2 x^2/2$ . В этом случае изменение высоты барьера, вызванное влиянием поверхности, равно

$$\delta\varepsilon_2 = \varepsilon_2 - \varepsilon_2(R) = 2 \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon_R}{\beta}} - \frac{\varepsilon_R}{\beta}, \quad (12)$$

где  $\varepsilon_2 = \varepsilon_2(\infty)$  — высота барьера для поверхности ядра, для дефекта в объеме. В классической теории многофононных переходов величина  $\varepsilon_2$  характеризует энергию активации локальных колебаний при захвате электрона, таким образом, коэффициент захвата электрона на глубокой центр, находящийся на расстоянии  $R$  от поверхности, можно с экспоненциальной точностью представить в виде

$$\begin{aligned} C_n(R, T) &\sim \exp\left[-\frac{\varepsilon_2(R)}{kT}\right] = C_n(\infty, T) \exp\left[\frac{\delta\varepsilon_2(R)}{kT}\right] = \\ &= C_n(\infty, T) \exp\left\{\frac{2}{kT} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon_R}{\beta}} - \frac{\varepsilon_R}{\beta}\right)\right\}, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $C_n(\infty, T)$  — коэффициент захвата электронов на дефект в объеме кристалла. Выражение для темпа термоионизации дефектов вблизи поверхности  $e_n(R, T)$  имеет вид, полностью аналогичный (13) с заменой  $C_n(\infty, T)$  на  $e_n(\infty, T)$ , где  $e_n(\infty, T) \exp\{(\varepsilon_2 + \varepsilon_T)/kT\}$  — темп термоионизации дефектов в объеме;  $\varepsilon_T$  — термическая энергия ионизации дефекта.

Параметр  $\beta$ , характеризующий силу электрон-фононного взаимодействия, обычно меньше или порядка единицы [5, 6]. В работе [5] использовалась модель системы термов в виде касающихся парабол разной кривизны. В рамках этой модели параметр  $\beta$  может быть выражен через оптическую  $\varepsilon_{\text{opt}}$  и термическую энергию ионизации:  $\beta = (\varepsilon_{\text{opt}} - \varepsilon_T)/\varepsilon_{\text{opt}}$ .

### 3. Квантовое рассмотрение

В случае сравнительно низких температур, удовлетворяющих неравенству  $kT \ll \hbar\omega \ln(1/\beta)$ , захват и термоэмиссия электронов происходят за счет туннелирования ядра [5, 6]. Вероятность туннелирования ядра с энергией колебаний  $E$  с экспоненциальной точностью определяется соотношением [7]

$$W(E, R) \sim \exp\left\{\frac{2}{\hbar} \text{Im} S(E, R)\right\}, \quad (14)$$

где  $\text{Im} S(E, R)$  — мнимая часть действия, вычисленная на туннельной траектории в конфигурационном пространстве, соединяющей точки поворота ядра на термах 1, 2 и проходящей через точку встречи  $x_c(R)$ :

$$\text{Im} S(E, R) = \sqrt{2M} \left\{ \int_{a_1}^{x_c(R)} \sqrt{U_1(x, R) - E} dx + \int_{x_c(R)}^{a_2} \sqrt{U_2(x) - E} dx \right\}. \quad (15)$$

Зависимость  $U_1(x, R)$  определяется уравнениями (5), (7).

Простое аналитическое выражение для вероятности туннелирования можно получить в случае, когда энергия туннелирования  $E$  удовлетворяет неравенству

где  $\varepsilon_R$  определена формулой (11). В этом случае влияние поверхности оказывается существенным лишь для небольшого участка туннельной траектории в окрестности точки встречи термов, лежащей вдали от точек поворота  $a_{1, 2}$ . Выражение для поправки к мнимой части действия можно получить, раскладывая подынтегральное выражение в (15) по степеням энергии связи в окрестности точки встречи:

$$\begin{aligned} \delta (\text{Im } S) &= \text{Im } S (E, R) - \text{Im } S (E) = \\ &= \frac{1}{v (E, x_c)} \left\{ \int_{a_1}^{x_c(R)} [\varepsilon_b (x) - \varepsilon_b (x, R)] dx + \int_{x_c(R)}^{x_c} \varepsilon_b (x) dx \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

где  $\text{Im } S (E)$  и  $\varepsilon_b (x) = \hbar^2 \kappa^2 (x) / 2M$  — соответственно мнимая часть действия и энергия связи для дефекта в объеме,

$$v (E, x_c) = \sqrt{\frac{2}{M} (E - \varepsilon_2)} \quad (18)$$

— скорость ядра в точке встречи. Заметим, что хотя в первом интеграле интегрирование ведется по интервалу  $[a_1, x_c]$ , реальная область интегрирования гораздо уже, поскольку по мере удаления от точки встречи энергия связи  $\varepsilon_b (x, R)$ , согласно (5), экспоненциально быстро стремится к своему объемному значению  $\varepsilon_b (x)$ .

Входящие в (17) интегралы легко вычисляются с помощью соотношений (5)–(7). При этом в первом интеграле удобно перейти к переменной  $\alpha$ . В результате получаем для вероятности туннелирования

$$W (E, R) \sim W (E, \infty) \exp \left\{ 4 \frac{\varepsilon_R^{3/2}}{[\beta (\hbar\omega)^2 (\varepsilon_2 - E)]^{1/2}} \right\}, \quad (19)$$

где  $W (E, \infty)$  — вероятность туннелирования дефекта в объеме.

Заметим, что энергия

$$\varepsilon_m \sim [\beta (\hbar\omega)^2 (\varepsilon_2 - E)]^{1/3} \quad (19a)$$

имеет смысл характерной энергии связи электрона, при которой происходит многофононный переход (см. [6], с. 149). Соответственно, формула (19) может быть переписана в виде

$$W (E, R) \sim W (E, \infty) \exp \left\{ \frac{r_0^3 (E)}{R^3} \right\}, \quad (20)$$

где  $r_0 (E) \sim \hbar / (2m\varepsilon_m)^{1/2}$  имеет смысл характерного радиуса локализации электрона при многофононном переходе.

Темп термоэмиссии (захвата) электронов определяется путем усреднения вероятности туннелирования  $W (E, R)$  по равновесному распределению дефектов по энергиям колебаний. При этом оказывается, что переходы имеют место в узком интервале энергий, в окрестности оптимальной энергии перехода  $E_0$ , определяемой из соотношения

$$\frac{1}{kT} - \frac{2}{\hbar} \frac{d}{dE} \text{Im } S (E) = 0. \quad (21)$$

$$\frac{\hbar\omega}{2kT} + \operatorname{arctg}(z^{1/2}) - \frac{1}{(1-\beta)^{1/2}} \operatorname{arctg}([(1-\beta)z]^{1/2}) = 0, \quad (22)$$

где  $z = (\varepsilon_2 - E)/\varepsilon_2$ .

При выполнении условия (16) можно пренебречь влиянием поверхности на оптимальную энергию перехода, поэтому формула (19) при замене  $E$  на  $E_0$  определяет увеличение темпов эмиссии и захвата электронов при приближении дефекта к поверхности.

Заметим, что хотя величина  $\varepsilon_R \ll \varepsilon_2 - E$ , отношение  $\varepsilon_R/\hbar\omega$  может быть во много раз больше единицы, поэтому экспоненциальный фактор в (19) также может быть во много раз больше единицы.

**Заключение.** В данной работе показано, что для дефектов, расположенных вблизи поверхности, темпы многофононных переходов экспоненциально возрастают с уменьшением расстояния до поверхности. Этот результат справедлив как для классической, так и для квантовой картины многофононных переходов. Рассмотрим два примера.

В работе [8] процессы эмиссии и захвата электронов на глубокий уровень радиационного дефекта  $E3$  в GaAs рассматривались в рамках классического приближения с параметрами  $\varepsilon_2 = 0.30$  эВ,  $\varepsilon_T = 0.08$  эВ. В модели потенциала нулевого радиуса параметр  $\beta = \varepsilon_T/(\varepsilon_2 + \varepsilon_T)$ . Используя формулу (13), находим, что захват и эмиссия электронов заметно усиливаются на расстояниях  $R < 200$  Å.

Температурная зависимость сечения захвата на глубокий уровень состояния 2 кислорода в GaP хорошо показана в рамках квантового (туннельного) описания многофононных переходов [6]. Соответствующие параметры для комнатной температуры равны:  $\varepsilon_T = 0.89$  эВ,  $\beta = 0.55$ ;  $E_0 = 0.15\varepsilon_2$ ,  $\hbar\omega = 280$  К. В этом случае влияние поверхности становится существенным для дефектов, удаленных от поверхности на расстояние  $R < 20$  Å. Отметим, что эта величина почти на порядок превосходит расстояние, на котором поверхность может существенно изменить энергию ионизации этого дефекта.

В заключение заметим, что, хотя все рассмотрение в данной работе велось для случая бесконечно высокого барьера на границе раздела, все основные результаты могут быть непосредственно обобщены на случай барьера конечной высоты, например гетероперехода. Необходимо лишь, чтобы высота барьера была больше величины  $\varepsilon_m$ , определяемой формулой (19а).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] В. Д. Кревчик, Э. З. Имамов. ФТП, 17, 1235 (1982).
- [2] М. И. Иванов, И. А. Меркулов, Ал. Л. Эфрос. ФТП, 22, 628 (1988).
- [3] Ю. Н. Демков, Ю. И. Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике, 240. Л.
- [4] Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике, 832. М. (1978).
- [5] В. Н. Абакумов, И. А. Меркулов, В. И. Перель, И. Н. Ясевич. ЖЭТФ, 89, 1472 (1985).
- [6] V. N. Abakumov, V. I. Perel, I. N. Yassievich. Nonradiative recombination in semiconductors, 314. Amsterdam (1991).
- [7] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, 768. М. (1989).
- [8] D. Stievenard, J. Bourgoin. Phys. Rev. B, 33, 8140 (1986).