

УДК 621.315.592

## ТЕРМОПОЛЕВАЯ ИОНИЗАЦИЯ ПРИМЕСЕЙ. МНОГОМОДОВОЕ РАССМОТРЕНИЕ

*В. Н. Абакумов, В. Карпус, В. И. Перель, И. Н. Ясевич*

Рассмотрены термическая ионизация глубоких примесных центров и ионизация в электрическом поле с учетом взаимодействия электрона с многими модами колебания. Показано, что отличие от результатов одномодового рассмотрения возникает при низких температурах, когда становится существенным взаимодействие с акустическими фононами.

Влияние электрического поля на термическую ионизацию глубоких примесей в полупроводниках описывается в рамках теории многофононных переходов. Конкретные результаты, однако, ранее были получены в предположении, что с электроном взаимодействует лишь одна мода колебаний. Представляет интерес выяснить, какие изменения в эти результаты вносит учет взаимодействия с многими колебательными модами.

Только многомодовое рассмотрение позволяет выяснить роль акустических фононов в процессах термополевой эмиссии. Как можно ожидать, взаимодействие с акустическими фононами особенно существенно при низких температурах. Иселевич и Рашба [1], рассматривая многофононный захват электрона на примесный центр, показали, что при низких температурах взаимодействие с акустическими фононами приводит к степенной зависимости логарифма сечения захвата от температуры вместо экспоненциальной, следующей из одномодовой, модели. Ниже мы воспроизводим этот результат, как нам кажется, более простым методом.

Целью настоящей работы является многомодовое рассмотрение процессов термополевой ионизации. Как и следовало ожидать, учет взаимодействия с оптическими фононами не меняет характера результатов, полученных в одномодовом приближении [2]. Учет взаимодействия электрона с акустическими фононами существенно изменяет эти результаты при низких температурах.

Все последующее рассмотрение проводится с экспоненциальной точностью.

### 1. Термоионизация в многомодовом рассмотрении

Если иметь в виду только экспоненциальную зависимость, то вероятность выброса электрона в зону проводимости из локализованного состояния при заданной энергии колебаний решетки  $E$  можно представить в виде

$$P(E) \propto \exp[-2(S_2 - S_1)], \quad (1)$$

где «действия»  $S_i$  определяются выражениями

$$\hbar S_i = - \int_0^{\tau_i} L_i d\tau - E\tau_i, \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

Здесь  $L_1, L_2$  — функции Лагранжа, описывающие решетку в условиях, когда электрон находится на центре и когда он свободен соответственно;  $E$  — энергия колебаний в конечном состоянии (электрон свободен). Функции  $L_i$  зависят от координат и скоростей всех колебательных мод. При линейном взаимодействии электрона с колебаниями решетки (модель типа Хуанга и Рис) функции Лагранжа имеют вид

$$L_1 = \sum_{\nu} L_{1\nu} + \varepsilon_T, \quad L_2 = \sum_{\nu} L_{2\nu}, \quad (3)$$

$$L_{2\nu} = -\frac{M}{2} (\dot{x}_{\nu}^2 + \omega_{\nu}^2 x_{\nu}^2), \quad L_{1\nu} = -\frac{M}{2} (\dot{x}_{\nu}^2 + \omega_{\nu}^2 (x_{\nu} - x_{0\nu})^2).$$

Здесь  $\nu$  — номер колебательной моды;  $\varepsilon_T$  — термическая энергия ионизации;  $x_{\nu}$  — нормальные координаты ( $\dot{x}_{\nu} = dx_{\nu}/d\tau$ ); сдвиг положения равновесия  $x_{0\nu}$  обусловлен взаимодействием связанного электрона с колебаниями решетки. Необычный знак перед  $x_{\nu}^2$  в этих формулах связан с тем, что рассматривается подбарьерное движение решетки, так что  $t$  — мнимое время,  $\tau = it$ .

В первом из интегралов (2) предполагается, что движение происходит в потенциале  $u_1$

$$u_1 = \sum_{\nu} \frac{1}{2} M \omega_{\nu}^2 (x_{\nu} - x_{0\nu})^2 - \varepsilon_T.$$

Оно начинается на поверхности, ограничивающей классически разрешенную область в этом потенциале, и кончается на поверхности встречи термов (где  $u_1 = u_2$ ). Во втором интеграле предполагается, что аналогичное движение происходит в потенциале  $u_2$

$$u_2 = \sum_{\nu} \frac{1}{2} M \omega_{\nu}^2 x_{\nu}^2.$$

Координаты и скорости каждой из частиц, из которых состоит решетка, при движении в обоих потенциалах должны совпадать на поверхности встречи термов. Времена  $\tau_1$  и  $\tau_2$  определяют продолжительность движения в потенциалах  $u_1$  и  $u_2$  (времена туннелирования). Строгий вывод формулы (1) может быть проведен с помощью метода Фейнмана (см. [1]).

Для того чтобы получить вероятность термоионизации, необходимо умножить выражение (1) на заселенность колебательного уровня  $\varepsilon_T + E$  при температуре  $T$  и просуммировать по  $E$ .

Экспоненциальную зависимость вероятности термоионизации  $w$  и сечения захвата  $\sigma$  можно записать в виде

$$w \propto \exp(-\varepsilon_T/kT - \Phi), \quad \sigma \propto \exp(-\Phi). \quad (4)$$

Здесь  $\Phi$  есть значение функции

$$\Phi(E) = 2(S_2 - S_1) + E/kT,$$

вычисленное при оптимальной энергии  $E = E_0$ , которая соответствует минимальному значению  $\Phi(E)$ , т. е. определяется уравнением  $d\Phi(E)/dE = 0$ . Можно показать [3], что  $d(S_2 - S_1)/dE = -(\tau_2 - \tau_1)/\hbar$ , откуда следует уравнение для оптимальной энергии  $E_0$

$$\tau_2 - \tau_1 = \hbar/2kT, \quad (5)$$

которое совпадает с соответствующим уравнением в одномодовой модели [4].

Выразим показатель экспоненты  $\Phi$  в (4) через времена  $\tau_2$  и  $\tau_1$ . Уравнения движения на промежутках  $(0, \tau_1)$  и  $(0, \tau_2)$  имеют вид

$$\frac{d^2 x_{1\nu}}{d\tau^2} = \omega_{\nu}^2 (x_{1\nu} - x_{0\nu}), \quad \frac{d^2 x_{2\nu}}{d\tau^2} = \omega_{\nu}^2 x_{2\nu}.$$

Решая эти уравнения при начальных условиях  $\dot{x}_{1v}(0) = \dot{x}_{2v}(0) = 0$  (так как траектория начинается на границе классически разрешенной области) и сшивая решения условиями  $x_{1v}(\tau_1) = x_{2v}(\tau_2)$ ,  $\dot{x}_{1v}(\tau_1) = \dot{x}_{2v}(\tau_2)$ , получим

$$x_{1v} - x_{0v} = -x_{0v} \frac{\text{sh } \omega_v \tau_2 \text{ ch } \omega_v \tau_1}{\text{sh } \omega_v (\tau_2 - \tau_1)},$$

$$x_{2v} = -x_{0v} \frac{\text{sh } \omega_v \tau_1 \text{ ch } \omega_v \tau_2}{\text{sh } \omega_v (\tau_2 - \tau_1)}.$$

Вычислив действия (2), найдем

$$\Phi = \frac{2\varepsilon_T \tau_1}{\hbar} - \sum_v \frac{\Delta\varepsilon_v}{\hbar\omega_v} \frac{\text{ch } \omega_v (\tau_2 + \tau_1) - \text{ch } \omega_v (\tau_2 - \tau_1)}{\text{sh } \omega_v \tau_2}. \quad (6)$$

$$\Delta\varepsilon_v = \frac{1}{2} M \omega_v^2 x_{0v}^2.$$

Величина  $\Delta\varepsilon_v$  представляет собой вклад в сдвиг Франка—Кондона  $\Delta\varepsilon$  от  $v$ -й моды,  $\Delta\varepsilon = \sum_v \Delta\varepsilon_v$ . Напомним, что  $\Delta\varepsilon$  представляет собой разность между оптической и термической энергиями ионизации центра.

Выражение (6) зависит только от времен  $\tau_1$  и  $\tau_2$ . Они определяются двумя условиями. Первое из них есть уравнение (5), а второе получается из требования, чтобы точка  $x_{1v}$  в момент  $\tau_1$ , так же как и точка  $x_{2v}$  в момент  $\tau_2$ , лежала на поверхности пересечения термов. Приравняем  $u_1$  при  $x_{1v}(\tau_1)$  значению  $u_2$  при  $x_{2v}(\tau_2)$ , получаем второе условие в виде

$$\sum_v \Delta\varepsilon_v \frac{\text{sh } \omega_v (\tau_1 + \tau_2)}{\text{sh } \omega_v (\tau_2 - \tau_1)} = \varepsilon_T. \quad (7)$$

Формулы (5)—(7) определяют показатели экспонент для вероятностей термоионизации и захвата (4) при учете взаимодействия электрона с многими модами колебаний. В случае, если существенна только одна мода колебаний, эти формулы, как можно проверить, приводят к результатам Макворта [5]. Другой простой случай — взаимодействие с оптическими колебаниями в пренебрежении дисперсией их частот. Легко убедиться, что результат (6) совпадает с одномодовым при учете, что  $\Delta\varepsilon = \sum_v \Delta\varepsilon_v$ .

Рассмотрим теперь поведение показателя экспоненты при низких температурах  $T$ . При  $T \rightarrow 0$  время  $\tau_1$  стремится к некоторой постоянной величине, тогда как время  $\tau_2$  стремится к бесконечности. Это связано с тем, что при  $T \rightarrow 0$  оптимальная энергия  $E_0$  приближается к дну терма  $u_2$ . Поэтому из (6) получаем при  $T \rightarrow 0$

$$\Phi_{T \rightarrow 0} \equiv \Phi_0 = \frac{2\varepsilon_T \tau_1}{\hbar} - \sum_v \frac{\Delta\varepsilon_v}{\hbar\omega_v} (\exp 2\omega_v \tau_1 - 1), \quad (8)$$

причем  $\tau_1$  определяется уравнением

$$\sum_v \Delta\varepsilon_v \exp 2\omega_v \tau_1 = \varepsilon_T. \quad (9)$$

Таким образом, при  $T \rightarrow 0$  время туннелирования  $\tau_1$  и весь показатель экспоненты для вероятности многофононного захвата определяются модами с наибольшими частотами. По порядку величины  $2\tau_1 \sim \sim \omega_0^{-1} \ln(\varepsilon_T/\Delta\varepsilon)$ , как и в одномодовом случае. Здесь  $\omega_0$  — частота оптического фонона

Чтобы найти температурную поправку к  $\Phi$ , запишем формулу (6) в виде

$$\Phi = \Phi_0 - \sum_v 4 \frac{\Delta\varepsilon_v}{\hbar\omega_v} \frac{\text{sh}^2(\omega_v \tau_1)}{\exp(\hbar\omega_v/kT) - 1}. \quad (10)$$

Видно, что температурная зависимость показателя экспоненты в сечении захвата (разность  $\Phi_0 - \Phi$ ) при низких температурах определяется низкочастотными колебаниями, т. е. акустическими фононами.<sup>1</sup>

Чтобы получить эту температурную зависимость, надо конкретизировать характер электрон-фононного взаимодействия. В случае деформационного взаимодействия с акустическими фононами сдвиг энергии примесного уровня можно записать в виде  $\Xi \operatorname{div} \mathbf{u}|_{r=0}$ , где  $\mathbf{u}$  — смещение,  $\Xi$  — константа деформационного потенциала.

Такая запись справедлива для взаимодействия с длинноволновыми колебаниями, которые, согласно (10), вносят определяющий вклад в разность  $\Phi_0 - \Phi$ . В сумме (10) следует оставить лишь вклад продольных акустических фононов, для которых роль номера моды  $\nu$  играет волновой вектор  $\mathbf{q}$ . При выбранном взаимодействии

$$\Delta \varepsilon_{\mathbf{q}} = \frac{\Xi^2 q^2}{2NM\omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad \omega_{\mathbf{q}} = sq, \quad (11)$$

где  $N$  — число ячеек в кристалле,  $s$  — скорость звука. Заменяя сумму в (10) интегралом и вычисляя его, получаем (при низких температурах, когда существенны  $\hbar\omega_{\mathbf{q}} \sim kT \ll \hbar/\tau_1$ )

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{\pi^2 \Xi^2 \tau_1^2}{15 \rho s^3 \hbar^5} (kT)^4. \quad (12)$$

Аналогичное рассмотрение пьезоакустического взаимодействия приводит к температурной зависимости  $(\Phi_0 - \Phi) \sim T^4$ . Как указывалось в начале статьи, эти зависимости впервые были получены Рашбой и Йоселевичем [1].

Отметим, что при высоких температурах  $kT > \varepsilon_T \hbar \omega_0 / \Delta \varepsilon$  формулы (5)–(7) приводят к обычному термоактивационному закону  $\Phi = \varepsilon_2 / kT$ , где, так же как в одномодовой модели,  $\varepsilon_2 = (\varepsilon_T - \Delta \varepsilon)^2 / 4 \Delta \varepsilon$ . Этот результат легко получить, если в (6), (7) разложить гиперболические функции при  $\omega, \tau_i \ll 1$ .

## 2. Ионизация в электрическом поле

При термической ионизации в отсутствие электрического поля электрон выбрасывается в зону с некоторой энергией  $\varepsilon$ . В предыдущем разделе фактически вычислялась вероятность выброса электрона с нулевой энергией, т. е. на дно зоны проводимости. Учет конечной энергии вылетевшего электрона сводится к тому, что терм  $u_2$  следует заменить на  $u_{\varepsilon} = u_2 + \varepsilon$ . В результате вероятность выброса электрона с энергией  $\varepsilon$  определяется выражением

$$w(\varepsilon) \propto \exp(-\varepsilon_T / kT - \Phi(\varepsilon)), \quad (13)$$

где  $\Phi(\varepsilon)$  отличается от соответствующего показателя  $\Phi$ , входящего в формулу (4), лишь заменой  $u_2$  на  $u_{\varepsilon}$ . Зависимость  $\Phi(\varepsilon)$  от  $\varepsilon$  при  $\varepsilon \ll \varepsilon_T$  можно представить в виде разложения

$$\Phi(\varepsilon) \simeq \Phi + \left. \frac{d\Phi}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \varepsilon. \quad (14)$$

Можно показать, что  $d\Phi/d\varepsilon = 2\tau_2/\hbar$ , так что распределение вылетевших электронов по энергиям дается выражением  $\exp(-2\tau_2\varepsilon/\hbar)$ .

В электрическом поле  $\mathcal{E}$  становится возможным выброс электрона в состояния с  $\varepsilon < 0$  путем туннелирования через треугольный барьер. Вероятность такого процесса можно получить, умножая (13) на туннельную экспоненту  $\exp(-4\sqrt{2m}|\varepsilon|^{3/2}/3\hbar F)$ , где  $F = e\mathcal{E}$  — сила, действующая на электрон в электрическом поле.

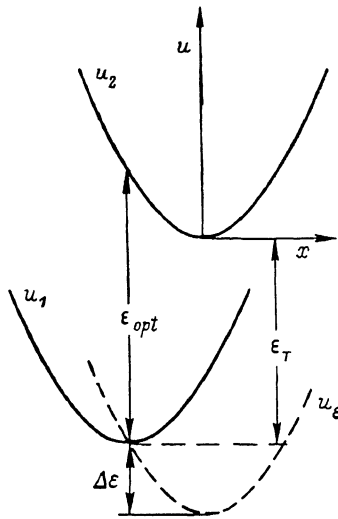
<sup>1</sup> Можно показать, что температурные поправки к  $\tau_1$  не играют роли при низких температурах.

В слабых полях, используя разложение (14) и оптимизируя вероятность выброса по  $\varepsilon$ , получаем

$$w = w_0 \exp(\tau_2^3 F^2 / 3\hbar m), \quad \tau_2 = \tau_1 + \hbar / 2kT, \quad (15)$$

где  $w_0$  — вероятность термоионизации в нулевом поле; время туннелирования  $\tau_1$  при  $kT < \hbar \omega_0$  не зависит от температуры и определяется уравнением (9). Формула (15) для вероятности ионизации фактически совпадает с результатом одномодового приближения [2]. Оптическая энергия вылетевшего электрона ( $\varepsilon_0 = -F^2 \tau_2^2 / 2m$ ) в случае слабого поля мала ( $|\varepsilon_0| \ll \varepsilon_T$ ), так что терм  $u_\varepsilon$  близок к терму  $u_2$ .

С увеличением поля оптимальная энергия вылетевшего электрона понижается и терм  $u_\varepsilon$  опускается. В достаточно сильном поле ионизация центра определяется холодной эмиссией электрона и следует говорить не о слиянии поля на термоионизацию, а о влиянии электрон-фононного взаимодействия на холодную эмиссию. При этом оптимальная энергия  $\varepsilon_0$  определяется наиболее благоприятными условиями для перестройки решетки, т. е. минимальным значением величины  $\tilde{\Phi} = \varepsilon_T / kT + \Phi(\varepsilon)$  (см. (13)). Эта величина достигает минимума (равного нулю) при расположении термов, показанном на рисунке, т. е. когда  $\varepsilon_0 = -\varepsilon_{opt}$ , где  $\varepsilon_{opt} = \varepsilon_T + \Delta\varepsilon$  — оптическая энергия ионизации. Таким образом, в достаточно сильном поле вероятность ионизации с экспоненциальной точностью равна



$$w \propto \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar F} \varepsilon_{opt}^{3/2}\right), \quad (16)$$

т. е. влияние электрон-фононного взаимодействия сводится к замене в туннельной экспоненте термической энергии связи на оптическую (как и в одномодовой модели [2]).

Чтобы найти зависящую от температуры поправку к показателю экспоненты (16), вычислим  $\tilde{\Phi} = \varepsilon_T / kT + \Phi(\varepsilon)$ . Вместо формул (6), (7) при замене  $u_2$  на  $u_\varepsilon$  найдем

$$\tilde{\Phi} = \frac{2(\varepsilon_T + \varepsilon)\tau_2}{\hbar} - \sum_{\nu} \frac{\Delta\varepsilon_{\nu}}{\hbar\omega_{\nu}} \frac{\text{ch } \omega_{\nu}(\tau_1 + \tau_2) - \text{sh } \omega_{\nu}(\tau_2 - \tau_1)}{\text{sh } \omega_{\nu}(\tau_2 - \tau_1)}, \quad (17)$$

$$\sum_{\nu} \Delta\varepsilon_{\nu} \frac{\text{sh } \omega_{\nu}(\tau_1 + \tau_2)}{\text{sh } \omega_{\nu}(\tau_2 - \tau_1)} = \varepsilon_T + \varepsilon. \quad (18)$$

Формула (5) остается в силе, однако теперь при  $\varepsilon < 0$ ,  $|\varepsilon|$ , близком к  $\varepsilon_{opt}$  (т. е. при расположении термов, близком к указанному на рисунке),  $\tau_1$  отрицательно, а  $\omega_{\nu}\tau_2 \ll 1$ . Действительно, при этих условиях уравнение (18) с учетом (5) можно представить в виде

$$\frac{2\tau_2}{\hbar} = \frac{\varepsilon_{opt} - |\varepsilon|}{\eta(T)}, \quad \eta(T) \equiv \sum_{\nu} \Delta\varepsilon_{\nu} \hbar\omega_{\nu} \text{cth } \frac{\hbar\omega_{\nu}}{2kT}. \quad (19)$$

Разлагая  $\tilde{\Phi}$  при  $\omega_{\nu}\tau_2 \ll 1$ , получим из формул (5), (17), (19)

$$\tilde{\Phi} = (\varepsilon_{opt} - |\varepsilon|)^2 / 2\eta(T). \quad (20)$$

Вероятность эмиссии электрона в состоянии с энергией  $\varepsilon < 0$  определяется выражением

$$w(\varepsilon) \propto \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar F} |\varepsilon|^{3/2} - \tilde{\Phi}\right). \quad (21)$$

Оптимизируя это выражение по  $\epsilon$  с учетом (20), определяем оптимальную энергию вылетевшего электрона

$$\epsilon_0 = -\epsilon_{\text{opt}} + 2\eta(T) \frac{\sqrt{2m\epsilon_{\text{opt}}}}{\hbar F}.$$

Подставляя это выражение в (21), (20), получим вместо (16) следующую формулу для вероятности ионизации сильным электрическим полем:

$$w \propto \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar F} \epsilon_{\text{opt}}^{3/2} + \frac{4m\epsilon_{\text{opt}}}{\hbar^2 F^2} \eta(T)\right). \quad (22)$$

Это выражение справедливо в достаточно сильном электрическом поле, когда выполняется условие  $F > \sqrt{2m\epsilon_{\text{opt}}} \Omega$ . Здесь  $\Omega$  — наибольшая из частот  $\omega$  и  $kT/\hbar$ , где  $\omega$  — характерная частота колебаний, определяющих величину  $\eta(T)$ . Это условие обеспечивает, в частности, выполнение неравенств  $\omega\tau_2 \ll 1$ ,  $\epsilon_{\text{opt}} - |\epsilon_0| \ll \Delta\epsilon$ , которые использовались при выводе (22).

В случае взаимодействия с оптическими фононами формула (22) повторяет результат одномодового рассмотрения [2]. В области низких температур, как видно из (22), (19), температурную зависимость показателя  $w$  определяют низкочастотные фононы, т. е. акустические колебания. Используя (11), нетрудно убедиться, что в случае деформационного взаимодействия с акустическими фононами температурная зависимость коэффициента  $\eta(T)$  в формуле (22) имеет вид

$$\eta(T) = \eta(0) + \frac{\pi^2}{30} \frac{\Xi^2 (kT)^4}{\rho \hbar^3 s^5}, \quad (23)$$

где  $\eta(0) = \sum \Delta\epsilon_q \hbar \omega_q$ . Выражение (23) справедливо при  $kT < \hbar \omega_D$ , где  $\omega_D$  — дебаевская частота. Однако необходимо отметить, что для относительно мелких примесных центров условие применимости (23) может оказаться жестче. Действительно, выражение (11) для  $\Delta\epsilon_q$  получено в предположении, что характерная длина волны акустических фононов гораздо больше радиуса локализованного состояния электрона. В случае относительно мелких уровней формулу (11) можно уточнить, учитывая, что изменение энергии связанного состояния электрона за счет деформационного взаимодействия с акустическими фононами определяется выражением  $\langle \psi | \Xi \operatorname{div} \mathbf{u} | \psi \rangle$ , где  $\psi$  — волновая функция связанного электрона. При этом выражение (11) заменяется на

$$\Delta\epsilon_q = \frac{\Xi^2 q^2}{2NM\omega_q^2} |\langle \psi | \exp i\mathbf{q}\mathbf{r} | \psi \rangle|^2.$$

Матричный элемент в этом выражении убывает с ростом  $q$  при  $q \geq a^{-1}$ , где  $a$  — радиус локализации электрона. Температурная зависимость (23) определяется фононами  $\hbar q s \sim kT$ , следовательно, она имеет место при  $kT < \sqrt{2ms^2\epsilon_T}$  (где использовано  $\epsilon_T \sim \hbar^2/2ma^2$ ).

При высоких температурах, когда можно использовать разложение  $\operatorname{cth} \hbar \omega_q/2kT \simeq 2kT/\hbar \omega_q$ , получим следующую формулу для коэффициента  $\eta(T)$  в показателе (22):

$$\eta(T) = 2\Delta\epsilon kT. \quad (24)$$

Таким образом, многомодовое рассмотрение процессов ионизации приводит к существенно новым результатам (по сравнению с одномодовым) в случае низких температур, когда определяющим является взаимодействие с акустическими фононами.

Температурная зависимость логарифма вероятности ионизации фосфора в кремнии сильным электрическим полем наблюдалась в работе [6] при  $T \geq 15$  К. Однако формулы (23), (24) приводят к более слабой температурной зависимости, чем наблюдавшаяся в [6].

## Л и т е р а т у р а

- [1] Иселевич А. С., Рашба Э. И. ЖЭТФ, 1986, т. 91, № 5 (11), с. 1917—1937.
- [2] Карпус В., Перель В. И. ЖЭТФ, 1986, т. 91, № 6 (12), с. 2319—2331.
- [3] Голдстейн Г. Классическая механика. М.: Наука, 1975. 415 с.
- [4] Абакумов В. Н., Меркулов И. А., Перель В. И., Ясевич И. Н. ЖЭТФ, 1985, т. 89, № 4 (10), с. 1472—1486.
- [5] Markvart T. J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1981, vol. 14, N 29, p. L895—L899.
- [6] Даргис А., Жураускас С., Жураускене Н. Лит. физ. сб., 1987, т. 27, № 3, с. 322—332.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
25 марта 1988 г.

