

ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДА ГЛУБОКОГО ЦЕНТРА НА МНОГОФОНОННЫЕ ПРОЦЕССЫ ТЕРМОИОНИЗАЦИИ И ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ

Абакумов В. Н., Карпус В., Перель В. И., Ясиевич И. Н.

Рассмотрено влияние дальнедействующего кулоновского потенциала на термоионизацию и захват электронов на глубокие примесные центры. Определена зависимость коэффициента захвата от электронной температуры. Показано, что для отталкивающих центров в экспоненциальную зависимость Бонч-Бруевича вместо электронной температуры T_e входит эффективная температура $T_e^* = T_e T_1 / (T_e + T_1)$, где энергия kT_1 порядка энергии фонона.

Эффект Пула—Френкеля при многофононной термоионизации также определяется не решеточной температурой T , а эффективной температурой $T^* = T T_1 / (T + T_1)$.

Результаты согласуются с экспериментальными данными.

Хорошо известно, что сечения захвата на притягивающие и отталкивающие глубокие центры в полупроводниках различаются на несколько порядков. Экспоненциальное убывание сечения захвата на отталкивающие центры с понижением температуры было предсказано Бонч-Бруевичем [1] и обнаружено в целом ряде экспериментов [2]. Оно связано с тем, что электрон, захватывающийся на отталкивающий центр, должен преодолеть кулоновский барьер. Большое сечение захвата на притягивающие центры при низких температурах обусловлено каскадным механизмом, согласно которому захват происходит путем диффузии электрона по высоковозбужденным состояниям центра [3, 4]. При температурах выше или порядка боровской энергии в кристалле каскадный захват не эффективен, так как высоковозбужденные состояния уже находятся в равновесии с зоной. Основным механизмом потери энергии при захвате электрона в этой области температур становятся многофононные переходы.

Настоящая работа посвящена рассмотрению роли отталкивающего и притягивающего кулоновских полей в захвате и термоионизации, сопровождающихся многофононными переходами.

Вероятность многофононного перехода экспоненциально убывает с ростом энергии, которая должна быть потеряна электроном при захвате, поэтому она экспоненциально зависит от кинетической энергии электрона. Учет этой зависимости необходим наряду с учетом зоммерфельдовского множителя, описывающего влияние кулоновского поля центра. В связи с этим в работе сначала выводится зависимость вероятности перехода между локализованным и свободным состояниями от энергии свободного электрона для нейтрального центра, а затем обсуждается роль заряда центра.

1. Остановимся сначала на термоионизации. Этот процесс можно рассматривать как переход между адиабатическими термами $u_1(x)$ и $u_e(x)$, соответствующими связанному и свободному (с энергией ϵ) состояниям электрона [$u_e(x) = u_2(x) + \epsilon$]. Последующее рассмотрение проводится для актуальной области температур $\hbar\omega / \ln(\epsilon_T / \hbar\omega) \ll kT \ll \hbar\omega / \beta$, где $\hbar\omega$ — энергия колебательного кванта, ϵ_T — энергия связи, β — константа электрон-колебательной связи, определенная так, что $\beta = \epsilon_T / \epsilon_1$. Энергия ϵ_1 соответствует точке встречи термов u_1 и u_2 и отсчитывается от дна терма u_1 (рис. 1). В этой области переход

между термами имеет туннельный характер. Вероятность $e(\epsilon)$ термоэмиссии электрона с энергией ϵ пропорциональна в этом случае экспоненте [5]

$$e(\epsilon) \propto \exp(-\Phi(\epsilon)), \quad \Phi(\epsilon) = 2(S_\epsilon - S_1) + \frac{E + \epsilon_T}{kT}, \quad (1)$$

где $\hbar\omega_\epsilon$ и $\hbar S_1$ — мнимые действия, определяемые формулами

$$S_\epsilon = \frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \int_{u_\epsilon}^{x_c} \sqrt{u_2(x) + \epsilon - E} dx, \quad S_1 = \frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \int_{a_1}^{x_c} \sqrt{u_1(x) - E} dx. \quad (2)$$

Для простоты электрон-фононное взаимодействие локализованного электрона моделируется взаимодействием электрона с колебанием тяжелой частицы («ядра») с массой M ; a_1 , a_ϵ , x_c — точки поворота и точки встречи термов (рис. 1). В выражение (1) следует подставить такое значение энергии колебаний ядра E , при котором $\Phi(\epsilon)$ минимально.

При малых ϵ можно использовать разложение

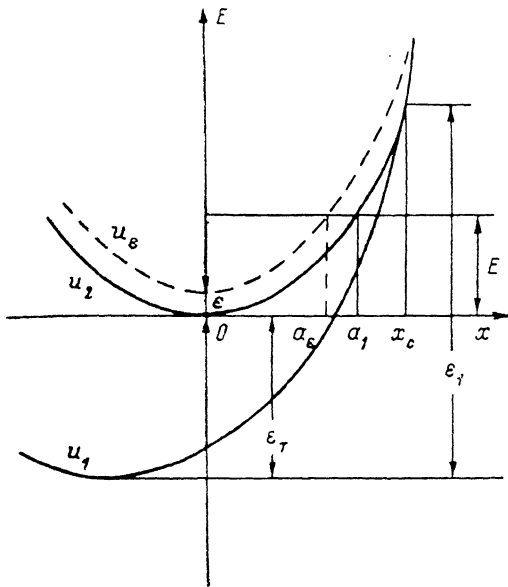


Рис. 1. Схема термов при их обычной перестройке в процессе термоионизации.

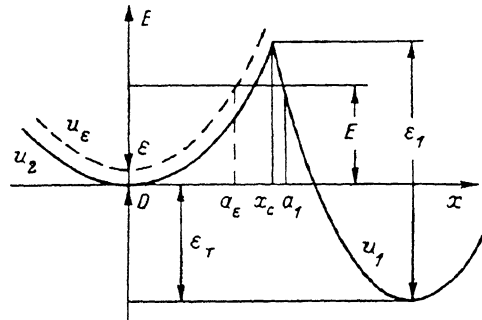


Рис. 2. Схема термов при их сильной перестройке в процессе термоионизации.

$$\Phi(\epsilon) = \Phi + 2 \left(\frac{\partial S_\epsilon}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=0} \epsilon, \quad \Phi = 2(S_2 - S_1) + \frac{E + \epsilon_T}{kT}$$

(здесь S_2 — значение S_ϵ при $\epsilon=0$) и определить оптимальную энергию E из условия минимума Φ . Учтем далее, что

$$\left(\frac{\partial S_\epsilon}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=0} = - \frac{\partial S_2}{\partial E} \equiv \frac{\tau_2}{\hbar},$$

где τ_2 можно назвать временем туннелирования от точки поворота в потенциале u_2 до точки встречи термов x_c при энергии E . С другой стороны, условие минимума для Φ дает соотношение

$$\frac{2\tau_2}{\hbar} = \frac{2\tau_1}{\hbar} + \frac{1}{kT}, \quad \frac{\tau_1}{\hbar} \equiv - \frac{\partial S_1}{\partial E}. \quad (3)$$

В рассматриваемом интервале температур оптимальная энергия $E \ll \epsilon_T$, $\epsilon_1 - \epsilon_T$, и поэтому при вычислении времени туннелирования τ_1 по второй из формул (3) можно положить $E=0$. Таким образом, τ_1 фактически не зависит от температуры (в отличие от τ_2 , которое имеет особенность при $E \rightarrow 0$, так как в этом случае туннелирование идет в окрестности минимума терма u_2). Таким

образом, зависимость вероятности термоэмиссии от энергии вылетевших электронов можно представить в виде¹

$$e(\varepsilon) \propto \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT^*}\right), \quad \frac{1}{kT^*} = \frac{1}{kT} + \frac{2\tau_1}{\hbar}. \quad (4)$$

Эффективная температура вылетевших электронов T^* меньше, чем T . Заметим, что если при ионизации имеет место настолько сильная перестройка термов, что минимумы термов u_1 и u_2 оказываются по разные стороны от точки их встречи x_c (рис. 2), то $\tau_1 < 0$, и тогда $T^* > T$.

Используя принцип детального равновесия, связывающий вероятность термоэмиссии $e(\varepsilon)$ и коэффициент захвата $\alpha(\varepsilon)$ электронов с энергией ε , можно из формулы (4) получить для $\alpha(\varepsilon)$ зависимость

$$\alpha(\varepsilon) \propto \exp\left(-\frac{2\tau_1}{\hbar}\varepsilon\right). \quad (5)$$

Таким образом, коэффициент захвата для схемы термов рис. 1 уменьшается с увеличением энергии электрона. Если же схема термов дается рис. 2, то ситуация обратная. К аналогичным выводам пришли Мешков [6] и Иоселевич, Рашба [7].

2. Рассмотрим роль заряда центра. Предполагается, что потенциал центра складывается из короткодействующего притягивающего потенциала (который и изменяется при колебаниях ядер) и далекодействующего кулоновского потенциала, который может быть притягивающим или отталкивающим в зависимости от знака заряда. Очевидно, что матричный элемент перехода электрона пропорционален перекрытию волновых функций связанного и свободного состояний. Так как глубокое связанное состояние имеет малый радиус (предполагается, что гораздо меньше боровского), то вероятность эмиссии пропорциональна квадрату модуля кулоновской волновой функции сплошного спектра на центре. Другими словами, для получения вероятности термоэмиссии электрона с заряженного центра выражение (4) следует умножить на зоммерфельдовский множитель $z(\varepsilon)$.²

Этот множитель для притягивающего (Z_+) и отталкивающего (Z_-) центров соответственно равен

$$Z_+(\varepsilon) = \frac{2\pi\sqrt{E_B/\varepsilon}}{1 - \exp(-2\pi\sqrt{E_B/\varepsilon})}, \quad Z_-(\varepsilon) = \frac{2\pi\sqrt{E_B/\varepsilon}}{\exp(2\pi\sqrt{E_B/\varepsilon}) - 1}, \quad (6)$$

где $E_B = Z^2 e^4 m / 2\hbar^2 \kappa^2$ — боровская энергия центра с зарядом Ze , κ — диэлектрическая постоянная, m — эффективная масса электрона в зоне. Такие же множители появляются и в вероятности захвата. Поэтому коэффициенты захвата электрона на положительный (α_+) и отрицательный (α_-) центры равны

$$\alpha_{\pm}(\varepsilon) \propto Z_{\pm}(\varepsilon) \exp\left(-\frac{2\tau_1}{\hbar}\varepsilon\right). \quad (7)$$

Полный коэффициент захвата определяется формулой

$$\alpha = \int \alpha(\varepsilon) f(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (8)$$

где $f(\varepsilon)$ — функция распределения электронов, нормированная условием

$$\int f(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1,$$

¹ Отметим, что при выводе формулы (4) фактически не учитывалась дискретность колебательного спектра. На самом деле распределение вылетевших электронов должно состоять из пиков, соответствующих энергиям $\varepsilon = E' - E$, где E' — энергия уровней в потенциале u_1 , а E — энергии более низких уровней в потенциале u_2 . Формула (4) фактически дает огибающую этих пиков.

² Более строгий вывод см. в работе [8].

где $\rho(\epsilon)$ — плотность состояний в зоне. Будем считать, что электроны распределены по Максвеллу с температурой T_e , которая может отличаться от температуры решетки:

$$f(\epsilon) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT_e} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT_e}\right).$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \alpha_+ &= \alpha_0 \sqrt{\frac{4\gamma}{\pi}} \int_0^\infty \frac{\exp(-x)}{1 - \exp(-\sqrt{\gamma/x})} dx, \\ \alpha_- &= \alpha_0 \sqrt{\frac{4\gamma}{\pi}} \int_0^\infty \frac{\exp(-x)}{\exp(\sqrt{\gamma/x}) - 1} dx, \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$\gamma = \frac{4\pi^2 E_B^*}{kT_e^*}, \quad \frac{1}{kT_e^*} = \frac{1}{kT_e} + \frac{2\tau_1}{\hbar}. \quad (10)$$

Здесь α_0 — коэффициент захвата на глубокий центр без учета его заряда. При $\gamma \ll 1$ заряд центра не влияет на коэффициент захвата. Из-за большого численного множителя $4\pi^2$ обычно выполняется противоположное условие $4\pi^2 E_B \gg kT_e^*$. Тогда в выражении для α_+ можно пренебречь экспонентой в знаменателе, а в выражении для α_- — единицей в знаменателе и вычислить интеграл методом перевала

$$\alpha_+ = \alpha_0 \sqrt{\frac{16\pi E_B}{kT_e^*}}, \quad \alpha_- = \alpha_0 \frac{8}{\sqrt{3}} \left(\frac{4\pi^2 E_B^*}{kT_e^*} \right)^{1/3} \exp\left[-\left(\frac{27\pi^2 E_B}{kT_e^*}\right)^{1/3}\right]. \quad (11)$$

Таким образом, притягивающий кулоновский потенциал несколько увеличивает коэффициент захвата, а отталкивающий сильно (экспоненциально) его уменьшает. Для α_- экспоненциальная зависимость такого типа была впервые получена Бонч-Бруевичем [1]. Главное отличие второй из формул (11) от его результата заключается в замене температуры T_e на эффективную электронную температуру T_e^* [см. формулу (10)]. Появление T_e^* вместо T_e связано с экспоненциальной зависимостью вероятности захвата протуннелировавшего сквозь кулоновский барьер электрона от его энергии. Заметим, что T_e^* содержит параметр центра $2\tau_1/\hbar$, который порядка обратной энергии кванта колебаний [4, 8]. Если температура гораздо меньше этой энергии, то $T_e^* \approx T_e$ и экспонента во второй из формул (11) совпадает с экспонентой Бонч-Бруевича.

Для зависимости вероятности термоионизации e , определяемой соотношением

$$e = \int e(\epsilon) \rho(\epsilon) d\epsilon,$$

от заряда центра имеют место формулы, полностью аналогичные (9)—(11), с заменой T_e^* на T^* [см. формулу (4)].

3. Обсудим зависимость коэффициента захвата от электронной температуры. Для нейтрального и притягивающего (в случае $\gamma \gg 1$) центров, согласно (5), (8), (11), имеем

$$\alpha_0 = \alpha_0^{(0)} \left(\frac{T_1 + T}{T_1 + T_e} \right)^{3/2}, \quad \alpha_+ = \alpha_+^{(0)} \left(\frac{T_1 + T}{T_1 + T_e} \right) \left(\frac{T}{T_e} \right)^{1/2}, \quad (12)$$

$$kT_1 \equiv \hbar/2\tau_1,$$

где $\alpha_0^{(0)}$ и $\alpha_+^{(0)}$ — коэффициенты захвата в равновесных условиях (при $T_e = T$). Как уже указывалось, kT_1 порядка энергии колебательного кванта. Формулы (12) предсказывают уменьшение коэффициента захвата с ростом электронной температуры (при схеме термов рис. 1). Для притягивающего центра это уменьшение более быстрое, чем для нейтрального. Для притягивающих центров зависимость α от T_e качественно подобна зависимости при каскадном захвате [9], но при $T_e < T_1$ более слабая.

Уменьшение коэффициента захвата при разогреве носителей электрическим полем для притягивающих центров наблюдалось в ряде работ (см., например, обзор [10]). При захвате электронов на нейтральные центры Ni в Ge наблюдались зависимость $\alpha \propto T_e^{-3/2}$ при высоких температурах и постоянство α при температуре 77 K (в полях, меньших 10^3 В/см), что согласуется с первой из формул (12). Следует иметь в виду, что если разогрев носителей происходит в достаточно сильных электрических полях \mathcal{E} , то поле уже влияет и на сам процесс многофононного захвата, облегчая его. При этом $\alpha \propto \exp(\hbar^2 e^2 \mathcal{E}^2 / 24m(kT_e^*)^3)$. В [11, 8] отмечалось аналогичное влияние поля на термическую ионизацию. При еще более сильном поле, когда $e\mathcal{E} > \sqrt{2m\epsilon_T}\omega$, захват может происходить путем прямого туннелирования свободного электрона в связанное состояние [8, 12]. При этом взаимодействие с колебаниями решетки уже не является определяющим фактором в захвате. Возможно, такие условия имели место в экспериментах [13], где наблюдались очень сильное увеличение сечений захвата и резкое ослабление их температурной зависимости для ряда глубоких центров в арсениде галлия в области слоя обеднения обратно смещенного барьера Шоттки.

Для отталкивающих центров из (11), (12) находим зависимость коэффициента захвата от электронной температуры в виде

Рис. 3. Ход потенциала вблизи центра при наличии внешнего электрического поля.

1 — для притягивающего центра, 2 — для нейтрального центра, 3 — для отталкивающего центра. Стрелкой указан путь туннелирования электрона.

$$\alpha_- = 1.3\alpha_0^{(0)} \left(\frac{T_1 + T}{T_1 + T_e} \right)^{3/2} \left(\frac{T_0}{T_e^*} \right)^{2/3} \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T_e^*} \right)^{1/3} \right], \quad (13)$$

$$kT_0 \equiv 27\pi^2 E_B.$$

Например, в Ge $T_0 \approx 3 \cdot 10^4$ K для однозарядного центра и $T_0 \approx 1.2 \cdot 10^5$ K для двухзарядного. Основное отличие зависимости (13) от соответствующей зависимости Бонч-Бруевича заключается в том, что последняя насыщается при $T_e \sim T_0$, в то время как формула (13) предсказывает насыщение экспоненциального роста α_- при гораздо меньших электронных температурах, а при дальнейшем росте T_e — степенной спад. Именно такая зависимость α_- от T_e наблюдалась экспериментально [14, 15] для захвата на Au^+ , Au^- и Cu^+ в германии.

4. Влияние электрического поля на термоионизацию притягивающих заряженных центров обычно связывают с эффектом Пула—Френкеля. Если считать, что $e \propto \exp(-\epsilon_T/kT)$ и учесть понижение энергии ионизации ϵ_T в электрическом поле на величину $\epsilon_{PF} = 2\sqrt{Ze^3\mathcal{E}/\kappa}$, то зависимость вероятности термоионизации от поля имеет вид

$$e \propto \exp(\epsilon_{PF}/kT).$$

Действительно, во многих экспериментах наблюдалась зависимость вида $e \propto \exp(a\sqrt{\mathcal{E}})$ (см., например, [16–18]). Однако в ряде работ было обнаружено, что зависимость коэффициента a от обратной температуры имеет вид $a \propto T^{-1} + \text{const}$, т. е. прямая, изображающая эту зависимость, не проходит через начало координат. Этот результат может быть понят, если учесть, что при много-

фононных процессах вероятность того, что электрон окажется в состоянии с энергией ϵ , определяется, согласно формуле (4), экспонентой $\exp(-\epsilon/kT^*)$. Интегрируя эту экспоненту по ϵ от $-\epsilon_{PF}$ до ∞ , получим

$$e \propto \exp\left(\frac{\epsilon_{PF}}{kT^*}\right) = \exp\left(\frac{2\sqrt{Z}e^3\delta/\kappa}{kT^*}\right), \quad (14)$$

так что вместо T в формулу Пула—Френкеля входит эффективная температура T^* , определяемая соотношением $(T^*)^{-1} = (T)^{-1} + (T_1)^{-1}$. Из результатов работы [17] (в которой изучалась электропроводность SiO) следует, что $T_1 \approx 10^3$ К, т. е. порядка энергии оптического фонона в кремнии. В органических полупроводниках наблюдались значения $T_1 < 0$ [18], что может быть истолковано как свидетельство в пользу такого расположения термов, при котором точка встречи находится между их минимумами (рис. 2).

5. В достаточно сильных полях ионизация определяется туннелированием электрона [8]. При этом вероятность термоионизации пропорциональна интегралу

$$e \propto \int \exp(-\epsilon/kT^*) D(\epsilon) d\epsilon, \quad (15)$$

где $D(\epsilon)$ — вероятность туннельного просачивания электрона сквозь потенциальный барьер (рис. 3). Роль заряда центра при этом сводится к увеличению прозрачности барьера (в случае притягивающего центра) или к ее уменьшению (в случае отталкивающего центра):

$$D_{\pm}(\epsilon) = \exp(-\epsilon/kT^*) \exp\left[\pm 2\sqrt{E_B/|\epsilon|} \ln \xi_{\pm}\right], \quad (16)$$

$$\xi_{\pm} = 8\sqrt{2m} |\epsilon|^{3/2}/he\delta, \quad \xi_{-} \approx 43\kappa e^2/Zc^3\delta.$$

Эти выражения справедливы при $\xi_{\pm} \gg 1$. Вычисляя интеграл (15) методом перевала [считая при этом второй сомножитель в (16) медленно меняющимся], найдем для зависимости вероятности термоионизации от поля следующие выражения:

$$\tau_{\pm} \propto \exp\left(\frac{e^2\delta^2\hbar^2}{24m(kT^*)^3}\right) \exp\left(\pm \frac{4kT^*\sqrt{2mE_B}}{e\delta\hbar} \ln \eta_{\pm}\right), \quad (17)$$

$$\tau_{+} = e^2\delta^2\hbar^2/2m(kT^*)^3, \quad \tau_{-} \approx 0.7e^3\delta^3\hbar^3/(kT^*)^4 m \sqrt{2mE_B}.$$

Коэффициенты захвата для заряженных центров α_{\pm} в таких условиях имеют аналогичную зависимость от поля. При еще больших значениях поля термоионизация (так же как и захват) может происходить путем прямого туннелирования между связанными и свободными состояниями [12].

Л и т е р а т у р а

- [1] Бонч-Бруевич В. Л. Коэффициент рекомбинации при наличии кулоновского барьера. — Сб. ст. ФТТ, 1959, т. II, с. 182—185.
- [2] Bonch-Bruevich V. L., Landsberg E. G. — Phys. St. Sol., 1968, v. 29, N 9, p. 1—35.
- [3] Lax M. — Phys. Rev., 1960, v. 119, N 5, p. 1502—1523.
- [4] Абакумов В. Н., Перель В. И., Ясиевич И. Н. Захват носителей заряда на притягивающие центры в полупроводниках. — ФТП, 1978, т. 12, в. 1, с. 3—32.
- [5] Абакумов В. Н., Меркулов И. А., Перель В. И., Ясиевич И. Н. К теории многофононного захвата электрона на глубокий центр. — ЖЭТФ, 1985, т. 89, в. 4 (10), с. 1472—1486.
- [6] Мешков С. В. Квазиклассическая теория многофононных безызлучательных переходов. — ЖЭТФ, 1985, т. 89, в. 5 (11), с. 1734—1748.
- [7] Иоселевич А. С., Рашба Э. И. Теория скорости безызлучательного захвата. — ЖЭТФ, 1986, т. 91, в. 5 (11), с. 1917—1937.
- [8] Карпус В., Перель В. И. Многофононная ионизация глубоких центров в полупроводниках в электрическом поле. — ЖЭТФ, 1986, т. 91, в. 6 (12), с. 2319—2331.
- [9] Абакумов В. Н., Крещук Л. Н., Ясиевич И. Н. Захват носителей на притягивающие центры в сильных электрических полях. — ФТП, 1978, т. 12, в. 2, с. 264—272.
- [10] Глинчук К. Д., Литовченко Н. М. Рекомбинационные характеристики Ge и Si, используемых в полупроводниковом приборостроении (обзор). — В кн.: Полупроводниковая техн. и микроэлектрон., М., 1978, в. 28, с. 3—22.

- [11] Карпус В., Перель В. И. Термоионизация глубоких центров в полупроводниках в электрическом поле. — Письма ЖЭТФ, 1985, т. 42, в. 10, с. 403—405.
- [12] Карпус В. Влияние электрон-фононного взаимодействия на ионизацию глубоких центров сильным электрическим полем. — Письма ЖЭТФ, 1986, т. 44, в. 7, с. 334—336.
- [13] Prinz V. Ya., Rechkunov S. N. — Phys. St. Sol. (b), 1983, v. 118, p. 159—166.
- [14] Pratt R. G., Ridley B. K. — Proc. Phys. Soc., 1965, v. 85, N 2, p. 293—300.
- [15] Алексеева В. Г., Жданова Н. Г., Каган М. С., Калашников С. Г., Ландсберг Е. Г. Захват горячих электронов центрами Cu^{2-} в германии. — ФТП, 1972, т. 6, в. 2, с. 316—322.
- [16] Царенков Б. В., Наследов Д. Н., Дмитриев А. Г. Обратная ветвь $I-V$ -характеристики и пробой $p-n$ -структур при неполной ионизации. — ФТП, 1972, т. 6, в. 2, с. 345—352.
- [17] Hartman T. E., Blair J. C., Bauer R. — J. Appl. Phys., 1966, v. 37, N 6, p. 2468—2474.
- [18] Gill W. D. — In: Proc. V Int. Conf. «Amorphous and liquid semiconductors». Berlin. 1973, p. 901—907.

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

Получена 11.05.1987
Принята к печати 16.06.1987