

ДИСПЕРСИОННЫЙ ТРАНСПОРТ В МАТЕРИАЛАХ С НЕМОНОТОННЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ

Архипов В. И., Никитенко В. Р.

В ряде экспериментов по исследованию пространственного распределения плотности неравновесных носителей в неупорядоченных материалах обнаружено, что характеристики переноса одновременно проявляют особенности как нормального, так и дисперсионного режимов транспорта. В настоящей работе показано, что такое поведение характеристик переноса может объясняться в рамках модели транспорта, контролируемого многократным захватом носителей на локализованные состояния с немонотонным энергетическим распределением. Установлено, что в этих условиях внутри временного интервала дисперсионного транспорта существует участок, на котором перенос происходит в квазиравновесном режиме. Проведено сравнение с экспериментальными данными, позволившее оценить ряд важных параметров зонной структуры и кинетических коэффициентов изучаемого материала.

Эксперименты, в которых исследуются нестационарные процессы переноса и фотопроводимости носителей заряда в неупорядоченных полупроводниках и диэлектриках, в последние годы стали одним из основных источников получения информации об энергетическом спектре электронных состояний в этих материалах [1-4]. Следует подчеркнуть, что характеристики переноса и фотопроводимости в неупорядоченных твердых телах обладают целым рядом особенностей, которые получили название дисперсионного транспорта и аномальной кинетики рекомбинации [3-5]. Большая часть экспериментально наблюдаемых закономерностей дисперсионного транспорта и аномальной рекомбинации нашла объяснение в рамках модели переноса, контролируемого захватом носителей на распределенные по энергии локализованные состояния (ЛС) [2-6].

Дисперсионный перенос имеет место в условиях, когда термически равновесное энергетическое распределение локализованных носителей еще не установилось. Когда же в результате многочисленных актов захвата и освобождения формируется равновесная заселенность ЛС, дисперсионный транспорт сменяется равновесным (гауссовским) переносом [2, 6]. Таким образом, дисперсионный и равновесный режимы переноса оказываются разделенными во времени. Однако в целом ряде экспериментов по транспорту и неравновесной фотопроводимости в неупорядоченных материалах наблюдалось одновременное проявление характерных черт обоих упомянутых выше режимов переноса (см., например, [7-9]). В настоящей работе показано, что «существование» равновесного и дисперсионного режимов переноса удается объяснить, используя представление о немонотонном энергетическом распределении ЛС.

Рассмотрение проводится в рамках неоднократно применявшейся ранее модели неравновесного транспорта (см., например, [2, 6, 10]). Для нахождения пространственно-временной зависимости плотности носителей $p(x, t)$ использовано решение известного уравнения неравновесного транспорта [2, 10]

$$[\partial p(x, t)/\partial t] + [\mu(t) E \partial p(x, t)/\partial x] - [D(t) \partial^2 p(x, t)/\partial x^2] + \lambda(t) [p(x, t) - p(x, 0)] = 0. \quad (1)$$

Пользуясь этим решением, нетрудно вычислить временную зависимость нестационарного фототока $j(t)$, а также плотность свободных носителей $p_e(t)$

t) [2]. Однако, как показано в работе [2], точность простой модели дисперсионного транспорта (использующей представление о резкой границе между «мелкими» и «глубокими» ловушками) недостаточна для описания транспорта, который контролируется немонотонным энергетическим распределением ЛС. В этом случае формулы для коэффициентов $D(t)$, $\mu(t)$, $\lambda(t)$, играющих роль

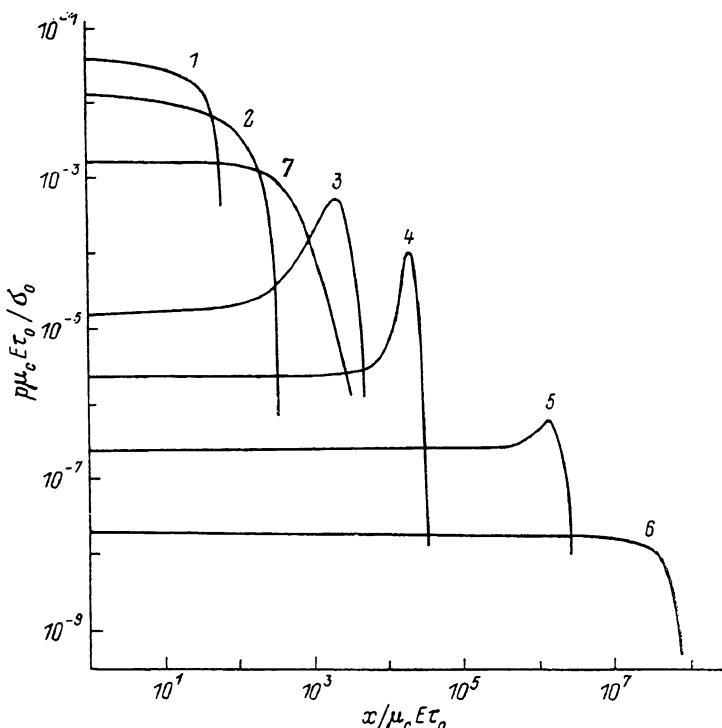


Рис. 1. Координатные зависимости полной плотности носителей в различные моменты времени.

$$\beta = (N_d/N_t) = 10^{-2}, \alpha = (kT/e_0) = 0.5, (e_d/e_0) = 10; \nu_0 t: 1 - 10^3, 2 - 10^5, 3 - 10^{10}, 4 - 10^{11}, 5 - 10^{13}, 6 - 10^{18}, 7 - 10^9.$$

зависящих от времени коэффициента полевой диффузии, подвижности и обратного времени жизни носителей, должны быть записаны следующим образом:

$$D(t) \simeq (\mu_c E)^2 \theta(t)/\omega(t), \quad \mu(t) \simeq \mu_c \theta(t), \quad \lambda(t) \simeq \theta(t)/\tau(t), \quad (2)$$

$$\tau(t) = \left\{ \int_0^\infty d\varepsilon [g(\varepsilon) \exp(-\nu_0 t \exp(-\varepsilon/kT))]/(\tau_0 N_t) \right\}^{-1} \quad (3a)$$

$$\theta(t) = \left\{ 1 + \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) [1 - \exp(-(\nu_0 t) \exp(-\varepsilon/kT))] \exp(\varepsilon/kT)/(2\varepsilon \nu_0 N_t) \right\}^{-1} \quad (3b)$$

$$\omega(t) = \left\{ \int_0^{kT \ln(\nu_0 t)} d\varepsilon g(\varepsilon) [1 - \exp(-(\nu_0 t) \exp(-\varepsilon/kT))] \exp(2\varepsilon/kT)/(2\varepsilon \nu_0^2) \right\}^{-1} \theta^2(t). \quad (3c)$$

В формулах (2), (3) E — напряженность приложенного электрического поля, μ_c — подвижность делокализованных носителей, ε — энергия ЛС (отсчитывается от края подвижности в глубь щели), $g(\varepsilon)$ — пространственно-энергетическая функция распределения ЛС, N_t — плотность ЛС, T — температура, k — постоянная Больцмана, ν_0 — частота попыток освобождения носителя с ЛС, τ_0 — время жизни свободных носителей.

В данной работе конкретные расчеты выполнены для случая модельного распределения

$$g(\varepsilon) = g_e(\varepsilon) + N_d \delta(\varepsilon - \varepsilon_d), \quad g_e(\varepsilon) = (N_e/\varepsilon_0) \exp(-\varepsilon/\varepsilon_0), \quad (4)$$

где N_e — полная плотность экспоненциально распределенных ЛС, N_d и ε_d — плотность и энергия моноэнергетических («дефектных») ЛС.

На рис. 1 показаны координатные зависимости плотности носителей для нескольких моментов времени. Как видно из этого рисунка, существует временной интервал $t_1 < t < t_2$, такой, что координатная зависимость $p(x, t)$ имеет максимум в некоторой точке $x_*(t)$. Закон убывания $p(x, t)$ при $x > x_*(t)$ близок к гауссовскому. В то же время убывание в сторону меньших x происходит более медленно, и кривая $p(x, t)$ имеет длинный негауссовский «хвост» при $x < x_*(t)$. Поэтому вблизи $x=0$ плотность носителей оказывается на несколько порядков больше, чем было бы при обычном гауссовском транспорте. Таким образом, кривые $p(x, t)$ при $t_1 < t < t_2$ имеют особенности, характерные как для квазиравновесного, так и для дисперсионного транспорта. Как показывают вычисления, относительная величина хвоста в определенный момент t убывает с ростом соотношения $\beta = (N_d/N_e)$, и, следовательно, возникновение «квазигауссовского» временного интервала связано с наличием моноэнергетических дефектных локализованных состояний (ДЛС). При $t < t_1$ и $t > t_2$ «профиль» пакета носителей является монотонно убывающей функцией координаты, что характерно для режима дисперсионного транспорта. Следовательно, в определенные моменты времени изменяется характер переноса носителей: происходит переход от дисперсионного режима к квазиравновесному и обратно. Чтобы понять причины таких переходов, рассмотрим кинетику захвата и освобождения носителей, определяемую распределением ЛС (4).

В интервале времени $0 < t < t_0$, где момент t_0 определяется выражением

$$t_0 = (1/\nu_0) \beta^{-(1/\alpha)}, \quad \alpha = (kT/\varepsilon_0), \quad (5)$$

скорость захвата носителей на непрерывно распределенные «глубокие» ЛС превышает скорость захвата на ДЛС, т. е. транспорт контролируется распределенными ЛС. Фототок $j(t)$, вычисленный согласно [2], убывает при $0 < t < t_0$ по степенному закону $j(t) \propto d\tau(t)/dt \propto t^{\alpha-1}$, что характерно для обычного дисперсионного транспорта [2-5]. С момента t_0 ДЛС начинают существенно влиять на кинетику захвата носителей, увеличивая скорость захвата. Закон убывания фототока становится более быстрым: $j(t) \propto t^{-(1+\alpha)}$. Однако транспорт продолжает оставаться дисперсионным до момента t_1 , когда становится существенным термическое освобождение носителей с глубоких ЛС. Момент t_1 определяется тем условием, что скорость термического освобождения носителей с ДЛС начинает превышать скорость освобождения с распределенных по энергии глубоких ЛС:

$$t_1 = (1/\nu_0) [(a/\beta) \exp(\varepsilon_d/kT)]^{1/(1+\alpha)}. \quad (6)$$

Таким образом, при $t_1 < t < t_2$ (о моменте t_2 см. далее) захват и освобождение носителей контролируются ДЛС и происходит переход к квазиравновесному режиму транспорта. Кривая фототока на этом отрезке времени имеет «плато»

$$j(t) = (e\mu_c \varepsilon_0 E/L) \theta(t_1) \simeq (e\mu_c \varepsilon_0 E/L) (\tau_0 \nu_0 \beta)^{-1} \exp(-\varepsilon_d/kT), \quad t_1 < t < t_2. \quad (7)$$

Напомним, что координатные зависимости $p(x, t)$ (рис. 1) при $t_1 < t < t_2$ имеют максимум. Дисперсия передней [гауссовой, $x > x_*(t)$] части пакета определяется коэффициентом полевой диффузии D [см. (2)] и, следовательно, пропорциональна приложенному полю E . Подобные координатные зависимости $p(x, t)$ (с максимумом, гауссовским «передним склоном» и негауссовским «хвостом») экспериментально наблюдались в работе [7]. Сопоставление данных работы [7] (рис. 2, штриховые кривые) и результатов наших вычислений (сплошные кривые) демонстрирует достаточно хорошее совпадение формы этих кривых. Наличие хвоста объясняется задержкой части носителей на глубоких энергетически распределенных ЛС с большими временами теплового освобож-

дения. Отметим, что увеличение относительной величины хвоста со временем в условиях равномерного движения «центра тяжести» пакета приводит, как

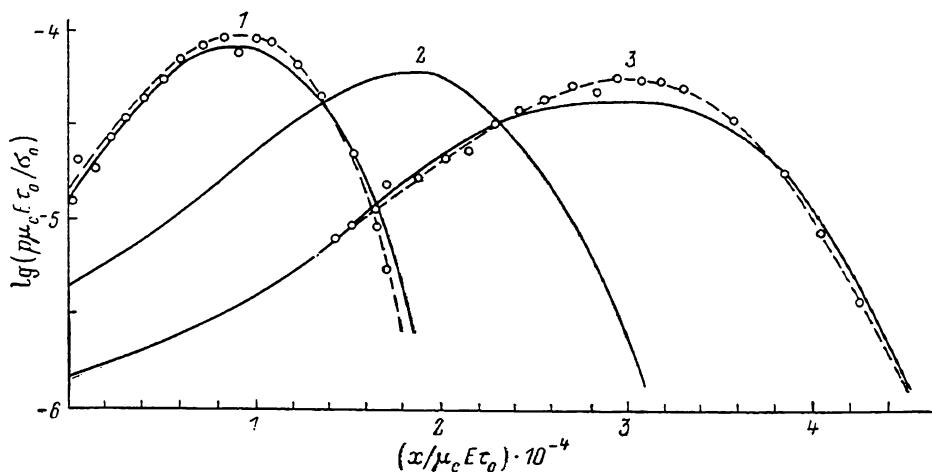


Рис. 2. Координатные зависимости полной плотности носителей на квазистационарном временимоментом интервале.

Экспериментальные результаты [7] (точки и штриховые кривые) для $\alpha\text{-As}_2\text{Se}_3$, обезразмерены с использованием следующих численных значений: $v_0 = 3 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$, $\mu_e \tau_0 = 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^2/\text{В}$, $E = 3 \cdot 10^8 \text{ В/ом}$, $\sigma_0 = 10^{15} \text{ см}^{-2}$, $\beta = 10^{-3}$, $\alpha = 0.5$, $\exp(-e_d/kT) = 8 \cdot 10^{-11}$; $\nu_0 t$: 1 — $1.25 \cdot 10^{11}$, 2 — $2.5 \cdot 10^{11}$, 3 — $3.75 \cdot 10^{11}$.

видно из рис. 2, к тому, что максимум движется с ускорением. Заметим также, что совмещение экспериментальных [7] и теоретических кривых приводит к разумным численным оценкам параметров, характеризующих в нашей мо-

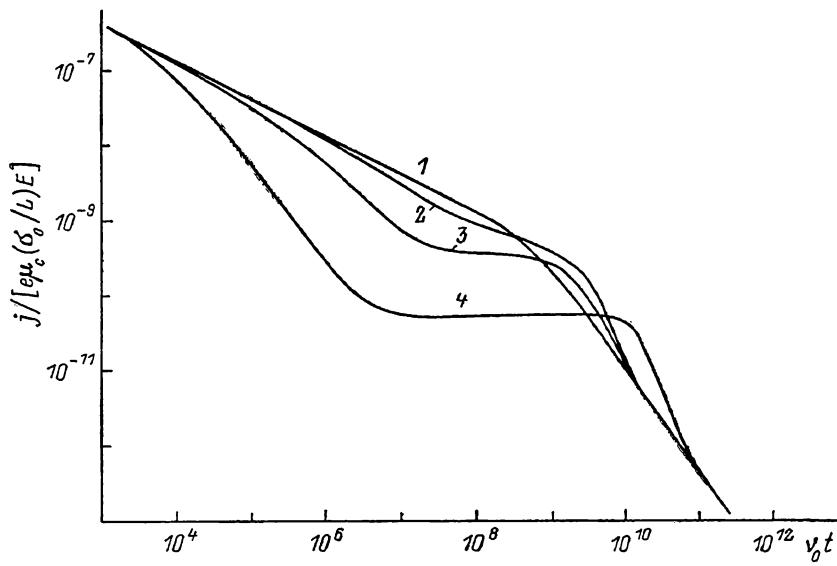


Рис. 3. Кривые переходного тока при различных плотностях моноэнергетических ЛС. $(L/\mu_c E \tau_0) = 3 \cdot 10^4$, $(\epsilon_d/\sigma_0) = 9$, $\alpha = 0.5$; $\beta = (N_d/N_t)$: 1 — 10^{-8} , 2 — 10^{-4} , 3 — 10^{-3} , 4 — 10^{-2} .

дели транспорт носителей (в [7] это ионы Cu^+ в $\alpha\text{-As}_2\text{Se}_3$): $\mu_e \tau_0 \simeq 2 \cdot 10^{-10} \text{ см}^2/\text{В}$, $v_0 \simeq 3 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$, $\beta \simeq 10^{-3}$.

Описанное выше квазигауссовское движение пакета носителей продолжается до момента t_2 , после которого скорость освобождения носителей с распределенными ЛС становится больше, чем с ДЛС, и транспорт, таким образом, снова контролируется распределенными ЛС. Момент t_2 определяется равенством

$$t_2 = (1/v_0) [\beta \exp(-\epsilon_d/kT)]^{1/(1+\alpha)}. \quad (8)$$

При $t > t_2$ восстанавливается характерное для дисперсионного транспорта монотонное убывание функции $p(x, t)$ с ростом координаты. При этом в достаточно широкой области вблизи начала координат плотность носителей, убывая со временем, остается практически однородной по координате (рис. 1). Вместе с этим происходит возврат к первоначальному степенному закону убывания тока:

$$j(t) \propto t^{-(1-\alpha)}.$$

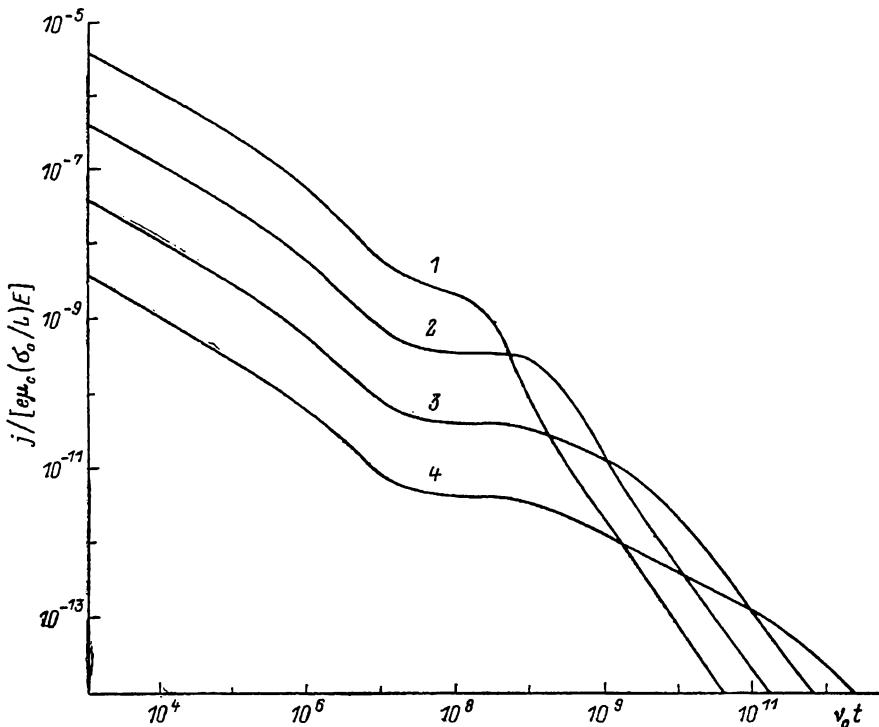


Рис. 4. Временные зависимости переходного тока для образцов различной толщины.
 $(\epsilon_d/v_0)=9$, $\beta=10^{-8}$, $\alpha=0.5$; $(L/\mu_c E \cdot v_0)$: 1 — $3 \cdot 10^8$, 2 — $3 \cdot 10^4$, 3 — $3 \cdot 10^8$, 4 — $3 \cdot 10^8$.

Сравнение (6) и (8) показывает, что плато на зависимости $j(t)$ может наблюдаться только при достаточно большой относительной плотности ДЛС:

$$N_d/(N_d + N_e) \geq \exp(-\epsilon_d/v_0). \quad (9)$$

Зависимость формы кривой $j(t)$ от плотности ДЛС показана на рис. 3; $j(t)$ и соотношения (7) — (9) хорошо согласуются с результатами, полученными в [11] численно для распределения (4) с экспоненциальным $g_e(\epsilon)$.

Вид функции $j(t)$ существенно зависит также от соотношения между временем пролета t_r и временами начала t_1 и окончания t_2 участка квазиравновесного транспорта (рис. 4). Если справедливо условие $t_r < t_1$, то форма кривой $j(t)$ остается чисто дисперсионной. В этом случае время пролета можно найти из соотношения

$$\tau(t_r) = (L/\mu_c E), \quad (10)$$

которое приводит к нелинейной зависимости времени пролета от поля и толщины образца: $t_r = (1/v_0)(L/\mu_c E)^{1/\alpha}$. Если же пакет носителей выходит из образца позже, чем наступает режим квазиравновесного переноса, но раньше, чем этот режим заканчивается ($t_1 < t_r < t_2$), время пролета становится линейной функцией отношения (L/E)

$$t_r = [L/\mu_c E \theta(t_1)] = (L/\mu_c \beta E) \exp(-\epsilon_d/kT). \quad (11)$$

Наконец, если время пролета превышает время окончания квазиравновесного режима переноса, то величина t_t вновь определяется выражением (10).

В ряде экспериментов [8, 9] измеряемой величиной является временная зависимость плотности тока проводимости $j(L, t) = \epsilon_0 E p_c(L, t)$, т. е. фактически плотности свободных зарядов вблизи тылового электрода $p_c(L, t)$. Форма кривых $p_c(L, t)$, представленных на рис. 5, характеризуется наличием двух участков: после быстрого нарастания следует более медленное экспоненциальное с последующим замедлением убывание. С уменьшением параметра β асимметрия кривых $p_c(L, t)$ возрастает.

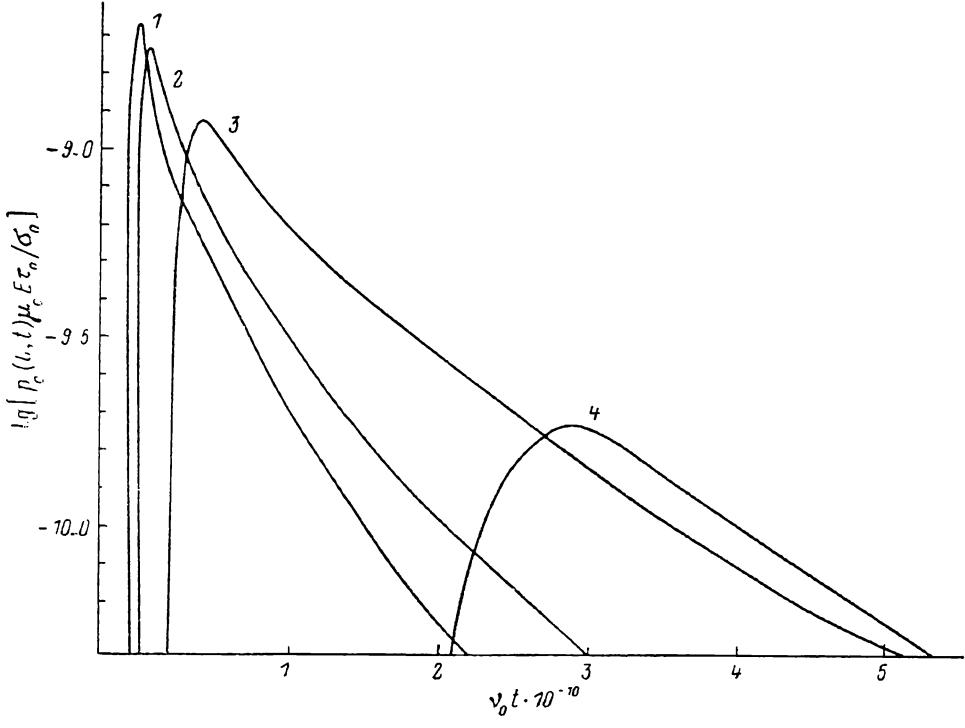


Рис. 5. Временные зависимости плотности делокализованных носителей вблизи тылового электрода при различных плотностях моноэнергетических ЛС.

$$(\epsilon_d/\epsilon_0)=9, (L/\mu_0 E \tau_0)=3 \cdot 10^4, \alpha=0.5; \beta=(N_d/N_f): 1 - 0, 2 - 10^{-4}, 3 - 10^{-3}, 4 - 10^{-2}.$$

Из анализа пространственного распределения носителей в условиях дисперсионного транспорта, контролируемого экспоненциально распределенными ЛС ($\beta=0$) [9], следует, что при $\alpha=0.5$ отношение $t_m/t_t \approx 0.2$, т. е. $t_m \ll t_t$, где t_m — время достижения максимума функцией $p_c(L, t)$. Результаты данной работы (рис. 3, 5) свидетельствуют о том, что в условиях, когда транспорт контролируется ДЛС, справедливо равенство $t_m \approx t_t$, что характерно для квазиравновесного транспорта и согласуется с экспериментальными данными [9].

Таким образом, на основе модели многократного захвата носителей на ЛС, энергетическое распределение которых имеет резкий максимум, удается объяснить существование признаков квазиравновесного и дисперсионного транспорта, наблюдавшееся в ряде экспериментов [7-9] по кинетике переходного тока и исследованию пространственного распределения носителей в аморфных материалах.

Список литературы

- [1] Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М., 1982. 662 с.
- [2] Архипов В. И., Руденко А. И., Андриеш А. М. и др. Нестационарные инжекционные токи в неупорядоченных твердых телах. Кишинев, 1983. 175 с.

- [3] Тютнев А. П., Банников А. В., Менгелов Г. С. и др. Электрические явления при облучении полимеров. М., 1985. 176 с.
- [4] Звягин И. П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М., 1984. 192 с.
- [5] Физика гидрогенизированного аморфного кремния. В. 2. Электронные и колебательные свойства / Под ред. Дж. Джоунополоса, Дж. Люковски. М., 1988. 448 с.
- [6] Rudenko A. I., Arkhipov V. I. // Phil. Mag. B. 1982. V. 45. N 2. P. 177—187.
- [7] Lebedev E. A., Nebauer A., Süptits I. // Phys. St. Sol. (a). 1979. V. 54. P. K207—K211.
- [8] Лебедев Э. А., Карпова Л. Н. // ФТП. 1981. Т. 15. В. 12. С. 2421—2423.
- [9] Архипов В. И., Казакова Л. П., Лебедев Э. А., Руденко А. И. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 4. С. 723—728.
- [10] Arkhipov V. I., Rudenko A. I. // Phil. Mag. B. 1982. V. 45. N 2. P. 189—207.
- [11] Monroe D. // Sol. St. Commun. 1986. V. 60. N 5. P. 435—441.

Московский инженерно-физический
институт

Получена 6.10.1988
Принята к печати 27.01.1989