О ЗАХВАТЕ ЭЛЕКТРОНА В ПРИПОВЕРХНОСТНУЮ ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ ЯМУ ПОЛУПРОВОДНИКА

Дмитриев С. Г.

Рассмотрен захват электрона в узкую приповерхностную энергетическую яму полупроводника (ПП). Показано, что эффективная скорость поверхностной рекомбинации определяется конкуренцией между процессами рекомбинации в яме, процессами рассеяния вблизи поверхности и процессами захвата в яму. Указаны условия, при которых эффективная скорость поверхностной рекомбинации S не зависит от рекомбинации на дне ямы и определяется рассеянием в приповерхностной области. Показано, что в случае малых потерь энергии в объеме ПП процессы релаксации по энергиям могут оказывать заметное ограничивающее влияние на S.

Во многих случаях определяющим скорость рекомбинации процессом является захват электрона в ту или иную энергетическую яму. Например, в случае малых потерь энергии электрон теряет и приобретает энергию с почти одинаковой вероятностью, а его относительно медленное движение вниз по шкале энергий носит диффузионный характер. Описывающее это движение кинетическое уравнение для функции распределения $f(\varepsilon)$ сводится к уравнению Фоккера—Планка. Такой подход к определению сечения рекомбинации был предложен в работе Питаевского для расчета этого сечения в одноатомном газе [1]. Этот же метод применялся в работе Абакумова, Переля и Яссиевич при исследовании процессов рекомбинации в объеме ПП [2]. В работе Захарова и Карпмана изучалось движение электронов в поле монохроматической волны [3]. Авторы рассмотрели функцию распределения внутри и вне энергетической ямы и показали, что сшивка решений происходит в узком переходном слое вблизи края ямы.

Несколько иная ситуация возникает при захвате электрона в узкую приповерхностную энергетическую яму ПП. В традиционной постановке задачи генерируемые в объеме ПП электроны диффундируют к поверхности и отражаются от нее или захватываются в яму. При этом вблизи внутреннего края ямы существует область, в которой происходит релаксация функции распределения по импульсам и энергиям.

Таким образом, скорость захвата в яму определяется не только диффузией по шкале энергий в яме, но и обычной диффузией из объема ПП к яме, а также процессами захвата в яму и выброса из нее. Конкуренция между этими процессами и будет определять поток электронов на поверхность.

Движение электронов в достаточно узкой приповерхностной яме, размеры которой превосходят характерную длину потерь энергии в ней, было рассмотрено в предыдущей работе автора [4]. Здесь же мы рассмотрим более подробно транспорт электронов к поверхности.

Поток электронов в яму удобно описывать с помощью эффективной скорости поверхностной рекомбинации S, фигурирующей в граничном условии для уравнения диффузии

$$J_D = -D \frac{dn(z)}{dz}\bigg|_{z=0} = n(0)\, S, \tag{1}$$

где J_D — диффузионный поток, D — коэффициент диффузии, $n(z)$ — концентрация электронов. Рассмотрим факторы, определяющие величину S.

Заметим, что использовать диффузионное приближение и, следовательно, диффузионное уравнение для описания движения частиц можно далеко не всегда. Для применимости этого приближения требуется, в частности, чтобы функция распределения частиц по импульсам была достаточно близка к равновесной — изотропной функции распределения. Вдали от возмущающих диффузионное приближение центров движение частиц можно описать с помощью уравнения диффузии, однако вблизи границ, на расстояниях порядка длины свободного пробега от них, функция распределения может заметно отличаться от равновесной из-за рассеяния. Поэтому пользоваться здесь уравнением диффузии нельзя.

Для определения S необходимо решать кинетическое уравнение для функции распределения (с тем или иным граничным условием для этой функции) и выделять затем длинноволновую асимптотику решения — диффузионную моду. Величину S можно определить после этого подстановкой концентрации частиц в диффузионной моде в соотношение (1). Заметим, что истинная концентрация частиц вблизи поверхности отличается, вообще говоря, от решения уравнения диффузии.

Электроны в приповерхностной области, пролетая над ямой и отражаясь от поверхности, могут, теряя энергию, захватываться в яму или, так и не потеряв достаточного для захвата в яму количества энергии, вылетать обратно в объем ПП. Для определения характера влияния этих процессов на величину S удобно рассмотреть сначала более простую вспомогательную задачу, в которой электрон, однажды попавший в яму, уже не вылетает из нее в объем ПП, т. е. задачу с частично поглощающей поверхностью. Вылет же частиц из ямы рассмотрим далее.

Величина эффективной скорости поверхностной рекомбинации $\tilde{S}$ для сформулированной задачи допускает в некоторых случаях и точный, выходящий за рамки диффузионного приближения расчет. Например, если при отражении от поверхности и захвате в яму функция распределения по энергиям отраженных частиц остается близкой к равновесной, а изменяется только функция распределения по импульсам, то (при некоторых дополнительных предположениях) эффектами релаксации по энергиям в объеме ПП можно пренебречь, и задача сводится к решению односкоростного кинетического уравнения, точные методы решения которого хорошо развиты (см., например, [5]). Приведем здесь найденное в диффузионном приближении значение S для случая полностью поглощающей поверхности и изотропного рассеяния в объеме: $\tilde{S}=v/\xi$, v — скорость частиц, $\xi=2,13$. . . Точное аналитическое выражение для $\tilde{S}$ в случае этой модели, справедливое при произвольном соотношении между временами упругого рассеяния и релаксации числа частиц, получено в [6]. Оно довольно громоздко, и мы не будем приводить его здесь.

В другом предельном случае, когда захват на поверхность столь мал, что функция распределения близка к равновесной, $\tilde{S}=1/4\, vP$, где P — усредненная вероятность захвата.

Заметим, что случай полностью поглощающей поверхности соответствует максимально достижимому значению S.

Существуют, конечно, и случаи, когда влияние эффектов релаксации по энергиям на S не мало́, например случай, когда величины потерь энергии электроном малы и захват в яму происходит только из узкой полоски энергий вблизи дна зоны проводимости $\Delta \ll kT$, где k — постоянная Больцмана, а T — температура. Такой пример рассмотрим в конце работы.

Итак, введенная величина $\tilde{S}$ допускает независимый расчет. Заметим только, что определяемый $\tilde{S}$ диффузионный поток на поверхность J_D (т. е. поток частиц диффузионной моды) отличается, вообще говоря, от истинного потока $J_1=\xi_1 J_D$, который можно найти путем точного решения кинетического уравнения (см., например, [5]). Различия потоков связаны с потерями частиц на расстояниях порядка длины свободного пробега от поверхности (если потери отсутствуют, то поток сохраняется). Поскольку истинная концентрация частиц в этой области отличается от концентрации частиц диффузионной моды, изменение истинного потока тоже отличается от изменения диффузионного потока. Вдали же от поверхности оба потока совпадают. Обычно эти различия малы (т. е. $\xi_1 \cong 1$) в силу относительной малости потерь частиц на столь малых расстояниях. Однако в некоторых случаях их все же следует учитывать, например при малых длинах диффузии или предельно малых скоростях рекомбинации S.

Рассмотрим теперь влияние на S процессов выброса из ямы. Частицы в яме с энергией, достаточно близкой к энергии дна зоны проводимости в объеме ПП ($\varepsilon=0$), могут приобрести энергию в результате неупругого процесса и вылететь из ямы в объем ПП. Поток выбрасываемых частиц можно представить в виде

$$\tilde{J}_1 = fg\Delta_0 w, \qquad (2)$$

где f и g — значения функции распределения по энергиям и плотности состояний в яме вблизи ее верхнего края ($\varepsilon=-0$), Δ_0 — полоска энергий, из которой происходит выброс, а w — усредненная вероятность выброса (см. [4]).

Далеко не все вылетевшие из ямы частицы исчезают в объеме в результате рекомбинации. Обычно большая их часть после рассеяния вновь попадает на поверхность и захватывается в конце концов в яму. Частицам же, испытывающим рекомбинацию в объеме, соответствует лишь часть $\tilde{J}$ потока $\tilde{J}_1$, которую можно найти путем решения краевой задачи с частично поглощающей поверхностью для кинетического уравнения с поверхностным источником (2). При этом по тем же причинам, что и в случае предыдущей вспомогательной задачи, истинный поток $\tilde{J}$ отличается от потока $\tilde{J}_D$ частиц диффузионной моды $\tilde{J}=\xi_2\tilde{J}_D$ (в диффузионном приближении $\xi_2 \approx 1$). Для нахождения S нам нужны именно диффузионные потоки, поэтому связь с $\tilde{J}_1$ удобно определить для $\tilde{J}_D$: $\tilde{J}_D = r\tilde{J}_1$.

Заметим, что при расчете введенных величин необходимо учитывать разброс у вылетающих из ямы частиц по скоростям и энергиям, что значительно затрудняет их вычисление. Однако в рамках некоторых моделей, например, для односкоростного кинетического уравнения можно получить и аналитические выражения для ξ_2 и r (см. [5]).

Далее, вернувшиеся в яму частицы могут повторно вылетать из нее. Учет эффектов многократного вылета из ямы можно осуществить, выписав уравнение баланса для потоков частиц в яму и из ямы в стационарных условиях. Это уравнение в терминах интересующих нас диффузионных потоков имеет следующий вид:

$$\xi_1 J_D = \xi_2 \tilde{J}_D + J, \qquad (3)$$

где J — поток частиц по шкале энергий в яме (см. [4]),

$$J = Agf_0 \frac{d}{d\varepsilon}\left(\frac{f}{f_0}\right), \quad f_0 = \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right), \quad A = \sum_i \frac{1}{2}\frac{\Delta_i^2}{\tau_i},$$

где τ_i — времена, а Δ_i — величины потерь энергии электроном в яме.

Величина S, по определению, равна

$$S = (J_D - \tilde{J}_D)/n_0, \quad n_0 = n + n_1, \qquad (4)$$

где n и n_1 — концентрации частиц диффузионной моды на краю ямы, соответствующие внешнему потоку (потоку в первой вспомогательной задаче) и потоку из ямы. Так как $n_1(z)$ имеет вид $\exp(-z/L)$, то $n_1=\tilde{J}_D/V_D$ ($V_D=L/\tau'$), где L — диффузионная длина, а τ' — время рекомбинации в объеме ПП.

Для того чтобы выразить S через введенные параметры, необходимо еще установить связь между потоком частиц в яме по шкале энергий J и их концентрацией в яме. В [4] было показано, что функцию распределения частиц по энергиям в яме можно представить в виде суммы двух слагаемых, одно из которых описывает движение вниз по шкале энергий попавших в яму и теряющих энергию электронов, а второе (равновесная функция распределения) — термализованные на дне ямы электроны. Поскольку поток J для равновесной функции распределения равен нулю, соотношение между потоком и концентрацией сильно зависит от степени термализации частиц в яме. Параметр $\varkappa$, определяющий эту степень вблизи верхнего края ямы и равный отношению равновесной части функции распределения к неравновесной, был определен в [4]. В случае малых потерь энергии

$$\varkappa = \frac{Ag\tau_0}{g_2 (kT)^2} \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right), \tag{5}$$

где E_0 — глубина ямы, индекс 2 означает, что $\varepsilon = -E_0$, τ_0 — эффективное время рекомбинации на дне ямы. Формула (5) допускает обобщение и на случай $\Delta \sim kT$ (см. [4]).

Используя приведенные формулы, нетрудно получить выражение для S

$$S = \tilde{S} \frac{1 + \delta (\xi_2 - \xi_1)}{1 + \delta (\xi_2 + \xi_1 \tilde{S}/V_D)}, \quad \delta = rkT (1 + \varkappa) \Delta_0 w/A. \tag{6}$$

Эта формула точно выражает S через введенные параметры при произвольном соотношении между временами рекомбинации и рассеяния. Причем в рамках отдельных моделей для этих параметров можно получить аналитические выражения.

Мы видим, что влияние ямы на S описывается достаточно большим числом независимых величин. Число возможных режимов рекомбинации, соответствующих различным соотношениям между параметрами, также не мало́. Мы рассмотрим здесь только некоторые из них. В большинстве случаев малыми потерями частиц на расстояниях порядка длины свободного пробега от внутреннего края ямы можно пренебречь и положить $\xi_{1,2} = 1$. При этом

$$S = \tilde{S}/[1 + \delta (1 + \tilde{S}/V_D)]. \tag{7}$$

Проведем оценки для случая $\Delta \sim kT$ и $\tilde{S} \sim \bar{v}$ ($\bar{v}$ — тепловая скорость), когда яма достаточно эффективно захватывает частицы. Будем предполагать также, что влиянием эффектов релаксации по энергиям в объеме ПП можно пренебречь.

Параметр r описывает ту долю выбрасываемых из ямы частиц, которые не возвращаются обратно в яму и рекомбинируют в объеме ПП, т. е. описывает эффективность инжекции. Он, как нетрудно оценить, мал: $r \sim V_D/\bar{v} \ll 1$, т. е. бо́льшая часть частиц возвращается обратно в яму.

Параметр $\rho = kT\Delta_0 w/A \sim w\tau \lessgtr 1$ описывает конкуренцию между процессами выброса из ямы и процессами потерь энергии в ней, т. е. относительную вероятность выброса из ямы захваченных в нее частиц. В случае узкой ямы процессы захвата и выброса могут заметно отличаться от процессов потерь энергии в яме, а ρ может быть меньше или порядка единицы (см. [7]).

Параметр $\varkappa$ описывает степень термализации частиц вблизи верхнего края ямы. Для того чтобы он стал большим, необходимо, чтобы рекомбинация на дне ямы была достаточно мала. При этом захваченные в яму частицы, термализуясь на ее дне, накапливаются в яме и, поднимаясь по шкале энергий к ее верхнему краю, могут вылететь в объем ПП, так и не успев рекомбинировать в яме.

Таким образом, параметр δ, равный произведению рассмотренных величин, описывает конкуренцию между влиянием на S сразу трех независимых факторов. В изучаемой ситуации это влияние может стать заметным, а $S \ll \tilde{S}$, лишь при условии $\varkappa \gg 1$, т. е. в случае слабой рекомбинации на дне ямы.

Заметим, что ситуация, когда $\varkappa < 1$, а $S \sim \bar{v}$, т. е. близка к своему максимальному значению, нередко встречается в эксперименте [8].

Рассмотрим теперь другой предельный случай малых потерь энергии $\Delta \ll kT$, когда эффекты релаксации по энергиям могут оказывать существенное ограничивающее влияние на величину S. Для оценки этого эффекта определим $\tilde{S}$. Будем предполагать, что длина релаксации по энергиям l_ε превосходит длину релаксации по импульсам l, так что движение электронов по координатам и по шкале энергий можно описать в диффузионном приближении. Это движение описывается уравнением

$$\frac{d}{dz}\left[D(\varepsilon) \frac{d}{dz} f(\varepsilon, z) g(\varepsilon)\right] + \frac{d}{d\varepsilon}\left[A(\varepsilon) g(\varepsilon) f_0 \frac{d}{d\varepsilon}\left(\frac{f(\varepsilon, z)}{f_0}\right)\right] = 0, \tag{8}$$

означающим равенство нулю полного потока электронов (по шкале энергий и по координате). Здесь $D(\varepsilon)$ — коэффициент диффузии частиц с энергией ε. Рассмотрим встречающуюся в эксперименте [9] степенную зависимость функции $D(\varepsilon)$, $g(\varepsilon)$ и $A(\varepsilon)$ от энергии

$$D(\varepsilon)=D_0(\varepsilon/kT)^{1/2},\quad g(\varepsilon)=g_0(\varepsilon/kT)^{1/2},\quad A(\varepsilon)=A_0(\varepsilon/kT)^{1/2} \tag{9}$$

и перейдем к безразмерным переменным

$$\frac{d}{du}\left[ue^{-u}\frac{d}{du}(fe^{u})\right]+u\frac{d^2}{dx^2}f=0,\quad u=\frac{\varepsilon}{kT},\quad x=\frac{z}{l_\varepsilon},$$
$$l_\varepsilon^2=D_0(kT)^2/A_0\gg l^2. \tag{10}$$

Мы видим, что характерная длина релаксации по энергиям действительно превосходит l.

Предположим далее, что захват в яму происходит из узкой полоски энергий $\Delta\ll kT$. Поскольку $l_\varepsilon\gg l$, можно считать, что вблизи границы на расстояниях порядка l от нее релаксацией по энергиям можно пренебречь и записать граничное условие для плотности частиц fg (по шкале энергий) в виде (1) с

$$S=v(\Delta)S_0\delta(\varepsilon)\Delta, \tag{11}$$

где $v(\Delta)$ — скорость частиц с энергией Δ, S_0 имеет смысл усредненной по интервалу Δ обезразмеренной эффективной скорости поверхностной рекомбинации, а $\delta(\varepsilon)$ — δ-функция. В безразмерных переменных такое граничное условие выглядит следующим образом:

$$\frac{d}{dx}[uf(u,0)]=B[uf(u,0)]\big|_{u=u_1}\delta(u),\quad u_1=\frac{\Delta}{kT},$$
$$B=\bar{v}S_0l_\varepsilon\Delta/(D_0kT). \tag{12}$$

Его вид призван учесть то обстоятельство, что захват происходит из микроскопически узкой полоски энергий.

В качестве второго граничного условия потребуем обращения в нуль потока по энергиям при $u=0$, $x>0$ (т. е. пренебрежем рекомбинацией в объеме ПП). Тогда вдали от границы решение должно иметь вид $f_0(\alpha+\beta x)$, который и определяет $\tilde{S}$. Действительно, по определению,

$$\beta\int D(\varepsilon)g(\varepsilon)f_0d\varepsilon=\alpha\tilde{S}\int g(\varepsilon)f_0d\varepsilon. \tag{13}$$

Заметим теперь, что для наших целей достаточно найти связь асимптотики f при $x\to\infty$ с сингулярной при $x=0$ частью полного решения. Это можно сделать, переходя от исходной задачи к задаче с нулевыми граничными условиями с помощью ряда аддитивных подстановок, удовлетворяющих следующим условиям.

1. Просуммированный по энергиям поток по координате должен быть постоянным (по x). В результате такой подстановки в уравнении появятся объемные источники, генерирующие (в целом по энергиям) нулевое число частиц. Решение задачи с такими источниками и нулевыми граничными условиями должно обладать и нулевой асимптотикой.

2. Подстановки не должны приводить к появлению сингулярных при $x=0$ источников, т. е. не должны изменять сингулярную часть решения. Решения с такими источниками и нулевыми граничными условиями дадут в рассматриваемом приближении пренебрежимо малый вклад в (12).

Функция, удовлетворяющая этим требованиям, имеет вид

$$f(u,x)=\beta e^{-u}\left[-1/(u^2+x^2)^{1/2}+(x^2+u^2)^{1/2}/u-x/u+x-e^{-x/u}(2-u+x/u)\right]+\alpha f_0. \tag{14}$$

С ее помощью нетрудно получить выражение для $\tilde{S}$

$$\tilde{S}=(\beta/\alpha)D_0/l_\varepsilon,\quad \beta/\alpha=u_1B(1+B). \tag{15}$$

Заметим, что мы определили только отношение β/α. Абсолютное значение параметра β задает величину сохраняющегося при принятых предположениях потока по координате. Поскольку $\tilde{S}$ не зависит от величины потока, мы можем считать β произвольным.

Мы видим, что режим рекомбинации определяется величиной B. Рассмотрим ее более подробно. Покажем, что B можно представить в виде отношения двух характерных потоков: диффузионного и поверхностного. Характерный поток по координате определяется первым слагаемым в (14); по порядку величины он равен $D_0 g_0 kT/l_\varepsilon$. Поток на поверхность из полоски энергий $\sim \Delta$ для этого же слагаемого равен по порядку величины $\bar{v}\ S_0 g_0 \Delta$. Отношение этих двух потоков и есть B [несоответствие потоков в граничном условии компенсируется вторым слагаемым из (14)].

Если $B \ll 1$, то искомый поток ограничивается только условиями отбора с самой поверхности; функция распределения при этом близка к равновесной вплоть до границы, а $\tilde{S}$ определяется просто отношением плотностей состояний и скоростей в областях энергий $\varepsilon \sim kT$ и $\varepsilon \sim \Delta$ соответственно: $\tilde{S}=(\Delta/kT)^2 \bar{v}\ S_0$. В этом случае процессы релаксации по энергиям не оказывают ограничивающего влияния на $\tilde{S}$.

Во втором предельном случае $B \gg 1$, когда процессы диффузии не могут обеспечить требуемую граничным условием поставку частиц к поверхности, фактором, ограничивающим рост величины $\tilde{S}$, будет релаксация по энергиям. При этом $\tilde{S}$ достигает своего максимального значения

$$\tilde{S} = (\Delta/kT)\, D_0/l_\varepsilon. \tag{16}$$

Итак, мы показали, что скорость захвата электронов в приповерхностную энергетическую яму из объема ПП определяется конкуренцией между процессами рекомбинации в яме, процессами транспорта к ней и процессами собственно захвата в яму и выброса из нее. Если рекомбинация на дне ямы достаточно эффективна [$\varkappa \ll 1$ см. (5)], то S не зависит от процессов рекомбинации в яме и достигает максимальных значений, определяемых процессами транспорта частиц к яме. При этом максимально достижимые значения S порядка тепловой скорости $\bar{v}$. Например, для модели односкоростного кинетического уравнения с полностью поглощающей поверхностью и изотропным рассеянием в объеме $S=\bar{v}/\xi$, $\xi=2,\ 13\ldots$

В случае малых потерь энергии в объеме ПП эффекты релаксации по энергиям могут оказывать заметное ограничивающее влияние на S.

Автор выражает благодарность Л. П. Питаевскому за критические замечания.

Список литературы

[1] Питаевский Л. П. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. В. 5. С. 1326—1332.
[2] Абакумов В. И., Перель В. И., Яссиевич И. Н. // ЖЭТФ. 1972. Т. 72. В. 2. С. 674—686.
[3] Захаров В. Е., Карпман В. И. // ЖЭТФ. 1962. Т. 43. В. 2. С. 490—499.
[4] Дмитриев С. Г. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 9. С. 1685—1689.
[5] Кейз К., Цвайфель П. Линейная теория переноса. М., 1972. 384 с.
[6] Дмитриев С. Г. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 8. С. 1460—1463.
[7] Дмитриев С. Г. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 11. С. 1954—1957.
[8] Aspnes D. E. // Surf. Sci. 1983. V. 132. N 1-3. P. 406—421.
[9] Калашников С. Г., Бонч-Бруевич В. Л. Физика полупроводников. М., 1977. 672 с.

Институт радиотехники и электроники
АН СССР
Москва

Получена 25.12.1986
Принята к печати 9.06.1989