

# Захват электронов на примесь в полупроводниках, определяемый пространственной диффузией

© В.Д. Каган

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: victor.kagan@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 12 июля 2004 г.)

Испуская или поглощая фононы, электроны в полупроводнике захватываются полем заряженной примеси или ионизируются из захваченного состояния. Процесс захвата определяется изменением электронной функции распределения как в импульсном, так и в координатном пространстве. Вычисляется коэффициент захвата в тех условиях, когда он определяется диффузионным перераспределением электронной плотности в поле заряженной примеси.

Работа поддержана грантом НШ-2242.2003.2.

Примеси в полупроводнике являются поставщиками электронов в зону проводимости, и концентрация электронов проводимости определяется балансом процессов захвата электронов в связанное состояние на примеси и освобождения из этого состояния. Уравнение баланса для изменения концентрации электронов  $n_e$

$$\frac{dn_e}{dt} = k_i n_{im} - k_r n_{im} n_e + G \quad (1)$$

включает члены ионизации и захвата на примесь с концентрацией  $n_{im}$  — коэффициенты ионизации  $k_i$  и захвата  $k_r$  — и член генерации  $G$ . Коэффициенты этого феноменологического уравнения должны определяться микроскопической кинетической теорией, последовательный вариант которой был развит недавно в работе автора [1]. В ней впервые получено кинетическое уравнение, включающее процессы перехода между свободными и связанными состояниями электрона на примеси, из которого выведено уравнение (1). Таким образом, было проведено микроскопическое вычисление коэффициентов  $k_i$ ,  $k_r$ .

Однако рассмотрение в [1] было проведено при одном существенном предположении, а именно: что функции распределения свободных и захваченных электронов  $f^{(1,2)}$  зависят только от полной энергии электрона  $E$ . При классическом описании движения электрона полная энергия является суммой кинетической энергии  $\epsilon_p$ , зависящей от импульса  $\mathbf{p}$ , и потенциальной энергии  $U(\mathbf{r})$ , зависящей от координаты  $\mathbf{r}$ ,

$$E = \epsilon_p + U(\mathbf{r}), \quad \epsilon_p = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (2)$$

Здесь  $m$  — эффективная масса электрона; для заряженной примеси определено выражение потенциальной энергии  $U(\mathbf{r}) = -e_1^2/r$ ,  $e_1^2 = \frac{ze^2}{\kappa}$ ,  $z$  — заряд примеси в единицах заряда электрона,  $\kappa$  — статическая диэлектрическая проницаемость решетки. Для свободных электронов энергия положительна, а для захваченных отрицательна, поэтому для захваченных электронов обозначим энергию как  $-E$ .

Процессы перехода между свободными и захваченными электронами определяются изменениями функций

распределения как в импульсном, так и в координатном пространстве. Изменение в координатном пространстве представляет собой пространственную диффузию. В настоящей работе мы определим условия, при которых этой диффузией можно пренебрегать, и проведем вычисление коэффициентов ионизации и захвата в условиях, когда пространственная диффузия играет такую же существенную роль, как и энергетическая релаксация.

Релаксация энергии в полупроводниках происходит в процессе электрон-фононных столкновений. Будем рассматривать не очень малые температуры, когда  $T \gg 3ms^2$ , где  $T$  — температура в энергетических единицах,  $s$  — скорость звука. И для свободных, и для захваченных электронов учет координатной зависимости нужен для частиц тепловых энергий, поэтому для таких частиц запишем обычные кинетические уравнения без слагаемых, описывающих переходы между свободными и захваченными частицами. Эти слагаемые нам потребуются позднее для вычисления коэффициентов ионизации и захвата.

У функции распределения свободных электронов, на которую действует силовое поле выделенной примеси, находящейся в начале координат, основная часть зависит от полной энергии и радиуса  $r$ , составляющего расстояние между электроном и примесью:  $f(r, E)$ . Имеется еще малая токовая часть

$$f_1(r, E) = \tau(\epsilon_p) \frac{\mathbf{p}}{m} (\nabla f(r, E) - \nabla U(\mathbf{r}) \partial f(r, E) / \partial E). \quad (3)$$

Здесь  $\tau(\epsilon_p)$  — время релаксации импульса. Для функции распределения  $f(r, E)$  получаем усредненное по угловым переменным кинетическое уравнение

$$D(E + e_1^2/r) \sqrt{(E + e_1^2/r)} \left[ \partial^2 f / \partial^2 r + \frac{(2E + e_1^2/r)}{(E + e_1^2/r)} \partial f / r \partial r \right] + \partial / \partial E \left[ \frac{\sqrt{2}(E + e_1^2/r)^2}{l\sqrt{m}} (T \partial f / \partial E + f) \right] = 0, \quad (4)$$

где  $D(\epsilon_p) = \frac{2\epsilon_p}{3m} \tau(\epsilon_p)$ ,  $\epsilon_p = E + e_1^2/r$ ,  $l$  — энергетическая длина свободного пробега. Член, описывающий

энергетическую релаксацию, преобразован к дифференциальной форме, так как передача энергии при электрон-фононных столкновениях мала [2]. Считаем, что  $D \sim \sqrt{E + e_1^2/r}$ . Это выполняется при релаксации импульса электронов на фононах или на точечных примесях. Решения, которые нас интересуют, должны убывать на больших расстояниях. Отметим, что не зависящая от расстояния бoльцмановская функция  $f(r, E) = A \exp(-E/T)$  всегда является решением уравнения (4), так что для проявления влияния пространственной диффузии функция распределения на малых расстояниях должна быть неравновесной по энергии.

Если  $E \gg e_1^2/r$ , переменные в уравнении (4) разделяются, и общее решение представляется в следующем виде:

$$f(r, E) = a_0 \exp(-E/T) + \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} c_n L_n^{(1)}(E/T) \exp\left(-\left(E/T + \sqrt{nr}/l_d\right)\right), \quad (5)$$

где  $L_n^{(1)}$  — обобщенный полином Лагерра,  $l_d^2 = D(T) \times l\sqrt{m}/\sqrt{T}$ . Коэффициенты разложения определяются на основании энергетической зависимости функции распределения на расстояниях, меньших  $l_d$ . В решении (5) основную роль играет та часть, которая вообще не убывает с расстоянием, а как функция энергии имеет равновесный вид.

Если  $E \ll e_1^2/r$ , уравнение совершенно иное. Переменные в нем также разделяются, что позволяет интегрально связать  $f(r, E)$  с ее выражением  $\varphi(E)$  на малых расстояниях  $r_0$

$$f(r, E) = \int_0^{\infty} \varphi(E') dE' \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(E'-E)} \times \frac{K_0\left(\sqrt{\gamma r t(Tt-i)}\right)}{K_0\left(\sqrt{\gamma r_0 t(Tt-i)}\right)}, \quad \gamma = \frac{4e_1^2}{l_d^2}. \quad (6)$$

Квадратный корень в этом выражении определен так, чтобы при больших значениях переменной он был положительным.  $K_0$  — функция Макдональда, обеспечивающая убывание решения (6) при увеличении радиуса  $r$ . Из-за сингулярности  $K_0$  в начале координат мы вынуждены положить  $r_0$  малым, но конечным.

При  $\varphi(E) = A \exp(-E/T_e)$ ,  $T_e \neq T$  решение выражается более просто

$$f(r, E) = A e^{-E/T_e} \frac{K_0\left(\sqrt{\gamma r T_e^{-2}(T_e - T)}\right)}{K_0\left(\sqrt{\gamma r_0 T_e^{-2}(T_e - T)}\right)}. \quad (7)$$

Если устремить  $T_e$  к  $T$ , выражение (7) перейдет в равновесное, причем оно демонстрирует, как происходит этот переход. Мы считаем, что  $r \gg r_0$ , и приближение  $T_e$  к  $T$  должно компенсировать эту разницу и сократить

числитель и знаменатель в (7). Таким образом, не убывающим с расстоянием и равновесным по энергии оказывается только решение при задании граничного условия в виде функции энергии, чрезвычайно близкой к равновесной.

Поскольку  $r_0$  мало, в знаменателе (6) функцию  $K_0$  можно заменить на  $L = \ln(l_d T/e_1 \sqrt{r_0})$ , после чего выражение (6) представляется в упрощенном виде

$$f(r, E) = \int_0^{\infty} \frac{dE' \varphi(E')}{TL - R} \exp\left(\frac{E - E'}{2T} - \frac{1}{2}R\right), \quad R = \sqrt{\frac{\gamma r}{T} + \frac{(E - E')^2}{T^2}}. \quad (8)$$

Как и в (7), оказывается, что при задании произвольного граничного условия решение (8) убывает на расстояниях, больших  $l_d^2 E/e_1^2$ .

Для захваченных электронов применимо уравнение (4), в котором  $E$  нужно заменить на  $-E$ . Ввиду положительности кинетической энергии  $E < e_1^2/r$ , так что для захваченных электронов возможны только решения вида (6).

Для вычисления  $k_i$ ,  $k_r$  следует использовать полученный нами в [1] интеграл электрон-фононных столкновений, в результате которых происходят переходы между состояниями свободных и захваченных частиц. Интегрирование этого выражения по всему фазовому пространству позволяет вывести уравнение баланса (1), что определяет выражения для коэффициентов  $k_i$ ,  $k_r$  через функции распределения свободных и захваченных частиц  $f^{(1,2)}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$

$$k_r = \frac{1}{16\pi^5 \hbar^4 n_e} \int d\mathbf{p} d\mathbf{r} d\mathbf{q} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) |c_{\mathbf{q}}|^2 \times f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) (n_{\mathbf{q}} + 1) \Theta\left(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \frac{e_1^2}{r}\right) \Theta\left(\frac{e_1^2}{r} - \varepsilon_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}}\right), \quad k_i = \frac{1}{16\pi^5 \hbar^4} \int d\mathbf{p} d\mathbf{r} d\mathbf{q} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) |c_{\mathbf{q}}|^2 \times f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) n_{\mathbf{q}} \Theta\left(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \frac{e_1^2}{r}\right) \Theta\left(\frac{e_1^2}{r} - \varepsilon_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}}\right), \quad (9)$$

$\mathbf{q}$  и  $\omega_{\mathbf{q}} = sq$  — волновой вектор и частота фонона,  $c_{\mathbf{q}}$  — константа электрон-фононного взаимодействия,  $n_{\mathbf{q}} = (e^{\hbar\omega_{\mathbf{q}}/T} - 1)^{-1}$  — фононная функция распределения Планка. Функции  $\Theta(x) = 1(x > 0)$  и  $\Theta(x) = 0(x < 0)$ , входящие в (9), являются математическим выражением условий того, что электрон с импульсом  $\mathbf{p}$  свободный и его энергия положительна, а электрон с импульсом  $\mathbf{p} - \hbar\mathbf{q}$  захваченный и его энергия отрицательна. При выводе (9) предполагалось, что переходы между свободными и захваченными электронами, происходящие вблизи каждой примеси, на зависят друг от друга. Это возможно только при следующих требованиях к концентрации примесей:

$$\frac{e_1^2}{3ms^2} \gg n_{\text{им}}^{-\frac{1}{3}} \gg \frac{e_1^2}{T}. \quad (10)$$

Упрощая выражения (9), получаем

$$k_r = \frac{1}{2\pi l \hbar^3 n_e m s^4} \int_0^\infty dE \int_E^\infty dE' \frac{E'^2}{1 - e^{-E'/T}} \times \int_0^{8e_1^2 m s^2 / E'^2} r^2 dr f^{(1)}(r, E),$$

$$k_i = \frac{1}{2\pi l \hbar^3 m s^4} \int_0^\infty dE \int_E^\infty dE' \frac{E'^2}{e^{-E'/T} - 1} \times \int_0^{8e_1^2 m s^2 / E'^2} r^2 dr f^{(2)}(r, E' - E). \quad (11)$$

Подстановка в интеграл (11) решений уравнения (4) показывает определяющую роль параметра  $e_1^2/l_d T$ . Если этот параметр мал, следует использовать решение (5). Однако в этом решении главной является функция, не зависящая от координат, и мы приходим к теории, рассмотренной в [1].

Если же этот параметр велик, роль пространственной диффузии в процессе захвата существенна и нужно использовать решения вида (6), из которых для простоты ограничимся решением (7). Выпишем основное неравенство

$$e_1^2(T_e - T)/l_d T_e^2 \gg 1. \quad (12)$$

Для вычисления коэффициента захвата используем неравновесную функцию  $\varphi(E) = [n_e \hbar^3 \sqrt{2\pi^3}/(m T_e)^{3/2}] \times \exp(-E/T_e)$ , причем электронная температура  $T_e$  не является аномально близкой к  $T$ . Подставляя эту функцию в (11), получаем

$$k_r = \frac{4\sqrt{\pi} l_d^3 T_e^{5/2}}{3L l m s (T_e - T)^{3/2}} \int_0^\infty x^2 K_0(x) dx. \quad (13)$$

Это выражение отличается от соотношения  $k_r^{(L)} = 4\pi \times e_1^2 D(T)/T$ , предложенного Ланжевеном [2,3]. Основная причина различия состоит в том, что коэффициент Ланжевена не является коэффициентом захвата. Коэффициентом захвата является величина, входящая в уравнение (1). Именно она измеряется экспериментально. Эту величину мы вычисляли теоретически. Выражение (11), определяющее коэффициент захвата, — единое для всех случаев рассмотрения. В [1] мы использовали его для условий, противоположных неравенству (12), а здесь — в условиях, когда это неравенство выполнено. Коэффициент Ланжевена — это отношение величины потока электронов через сферу, окружающую заряженную примесь, к концентрации этих электронов. Принятие этой величины за коэффициент захвата — произвольное и неоправданное допущение. В главе 7 работы [2] изложена теория Ланжевена и предприняты попытки

ее обобщения. Но при этом всегда коэффициентом захвата называется величина нормированного потока частиц через сферу, окружающую примесь. Поскольку эта величина коэффициентом захвата не является, все эти рассмотрения неудовлетворительны.

Величину электронной неравновесности мы считаем не аномально малой:  $(T_e - T)/T_e \sim 1$ . Тогда отношение коэффициента Ланжевена к коэффициенту захвата, определяемому формулой (13), равно  $e_1^2 s \sqrt{m}/l_d T_e^{3/2}$ . Оно содержит произведение большой величины  $e_1^2/l_d T_e$  и малой величины  $\sqrt{m s^2/T_e}$ , так что это отношение может быть величиной любого порядка.

Вычисление  $k_i$  проводится аналогично вычислению  $k_r$ , но в функции  $\varphi(E)$  концентрацию задаем равновесной  $n_{e0}$ , а температуру  $T_e$  — аномально близкой к  $T$ :  $T_e = T + 3ms^2$ . Более того, для энергий, превышающих энергию  $E_1$  ( $E_1 \sim T$ ), пренебрежем различием температур и сохраним его только для меньших энергий. Окончательное выражение содержит два слагаемых

$$k_i = \frac{4n_{e0}}{9l} \left( \frac{64\sqrt{2\pi} m e_1^6 s^2}{E_1^3 \sqrt{T}} + \frac{\sqrt{3\pi} l_d^3 T^{5/2}}{3L m^{5/2} s^4} \times \int_0^Q x^2 K_0(x) dx \right), \quad Q = 96 \left( \frac{e_1 m s^2}{l_d E_1 T} \right)^2. \quad (14)$$

Выражения для коэффициента ионизации различны в зависимости от величины параметра, включающего диффузионную длину и учитывающего неравновесность функции распределения для малых энергий. Если  $e_1^2/l_d T \gg T/3ms^2 \gg 1$ , то

$$k_i = \frac{256\sqrt{2\pi} m n_{e0} e_1^6 s^2}{9E_1^3 l \sqrt{T}}. \quad (15)$$

Это выражение определяется большими энергиями и не содержит характеристик неравновесности функции распределения. Если же  $T/3ms^2 \gg e_1^2/l_d T \gg 1$ ,

$$k_i = \frac{4\sqrt{3\pi} n_{e0} l_d^3 T^{5/2}}{27L l m^{5/2} s^4} \int_0^\infty x^2 K_0(x) dx. \quad (16)$$

Это выражение аналогично формуле (13) с учетом различия неравновесности для свободных и захваченных электронов.

В ранее предложенных теориях [2] вычислялся коэффициент захвата, определяемый пространственной диффузией. Однако он не совпадает с коэффициентом, входящим в уравнение баланса, т. е. не является экспериментально измеряемым коэффициентом захвата. В настоящей работе влияние пространственной диффузии на процессы захвата и освобождения электронов заряженной примесью рассмотрено в рамках кинетической теории, построенной в [1]. Указанное влияние проявляется только при выполнении определенных условий. Эти условия включают неравновесность функций распределения свободных и захваченных электронов. Получены выражения для коэффициентов захвата и ионизации, которые входят в уравнения баланса электронной концентрации.

Автор благодарит С.В. Ганцевича и М.И. Мурадова за многочисленные обсуждения работы.

## Список литературы

- [1] В.Д. Каган. ФТТ **47**, 2, 210 (2005).
- [2] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясиевич. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. Изд-во ПИЯФ, СПб (1997). 375 с.
- [3] M.P. Langevin. Ann. Chem. Phys. **28**, 289; 433 (1903).