

Излучательная рекомбинация горячих носителей в узкозонных полупроводниках

© Н.В. Павлов, Г.Г. Зегря[†]

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

(Получена 15 июня 2011 г. Принята к печати 17 июня 2011 г.)

Исследован механизм излучательной рекомбинации горячих носителей заряда в узкозонных полупроводниках на примере антимонида индия. Показано, что при высоких уровнях возбуждения СНСС-процесс оже-рекомбинации может привести к существенному разогреву носителей заряда. Найдены функция распределения горячих носителей и их концентрация. В рамках модели Кейна выполнен расчет скорости излучательной рекомбинации горячих носителей заряда, а также коэффициента усиления излучения. Показано, что при больших концентрациях носителей излучательная рекомбинация горячих электронов будет вносить существенный вклад в общую скорость излучательной рекомбинации.

1. Введение

При высоких концентрациях неравновесных носителей основным процессом безызлучательной рекомбинации в узкозонных полупроводниках является процесс оже-рекомбинации [1]. Этот процесс считается „вредным“, так как приводит к повышению порогового тока полупроводниковых лазеров и к уменьшению квантовой эффективности излучения. При изучении механизмов оже-рекомбинации [2] основное внимание уделялось расчету скорости протекания оже-процессов, а также способам уменьшения их вклада в пороговые характеристики приборов. Однако в ряде случаев оже-рекомбинация является причиной разогрева электронов, что может привести к появлению новых эффектов.

В данной работе рассматривается задача об излучательной рекомбинации горячих носителей в узкозонных полупроводниках. Механизмом разогрева носителей является оже-процесс типа СНСС (с участием двух электронов и тяжелой дырки). Ранее подобные задачи рассматривались для других механизмов разогрева электронов, таких как фотовозбуждение [3] и облучение образца быстрыми электронами [4].

Так как скорость оже-рекомбинации с ростом концентрации носителей растет быстрее, чем скорость излучательной рекомбинации или скорость рекомбинации, связанной с передачей энергии кристаллической решетке, то происходит накопление электронов вблизи уровня с энергией $2E_g$ (E_g — ширина запрещенной зоны; здесь и далее мы будем отсчитывать энергию от потолка валентной зоны). Так как концентрация горячих электронов быстро растет с увеличением концентрации инжектированных носителей, появляется возможность создания инверсной заселенности между уровнем с энергией $2E_g$ и валентной зоной.

Основной целью данной работы является нахождение скорости излучательной рекомбинации горячих носителей, а также доказательство возможности создания

инверсной заселенности в соответствующем диапазоне энергий.

Целями работы также являются:

- расчет матричного элемента для прямых оптических переходов горячих электронов с учетом непараболичности энергетических спектров носителей в рамках трехзонной модели Кейна,
- расчет функции распределения горячих электронов,
- расчет коэффициентов поглощения и усиления для переходов, обусловленных излучательной рекомбинацией горячих носителей.

2. Основные уравнения

Рассмотрим спонтанные прямые оптические переходы из зоны проводимости в зону тяжелых дырок. Закон сохранения квазиимпульса будет выглядеть следующим образом: $k_h = k_c$, где k_h, k_c — волновые векторы тяжелых дырок и электронов соответственно. Закон сохранения энергии будет иметь вид $E = E_c - E_h$, где E — энергия фотона, испускаемого в результате межзонной рекомбинации, а E_c, E_h — значения энергии электронов и тяжелых дырок соответственно. Так как в узкозонных полупроводниках эффективная масса электронов m_c намного меньше эффективной массы дырок m_h , то $|E_h| \ll |E_c|$ в диапазоне типичных для данных переходов значений волнового вектора, т. е. можно в законе сохранения энергии принять $E = E_c$. Тогда скорость прямых спонтанных оптических переходов зона-зона в единичном интервале энергий в единице объема кристалла за единицу времени с учетом законов сохранения энергии и квазиимпульса дается следующим выражением [5]:

$$r_{\text{sp}}(E_c) = \frac{4\sqrt{\kappa_\infty} e^2 E_c |M_{hc}|^2}{m^2 \hbar^2 c^3} \rho(E_c) f_e(E_c) [1 - f_e(E_h)]. \quad (1)$$

Здесь κ_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, m — масса свободного электрона, $f_e(E_c)$ и $f_e(E_h)$ — функции распределения электронов в зоне

[†] E-mail: Zegrya@theory.ioffe.ru

проводимости и в зоне тяжелых дырок, $\rho(E_c)$ — приведенная плотность состояний в зоне проводимости, а матричный элемент M_{hc} представляется выражением

$$|M_{hc}|^2 = |\langle \bar{u}_h(\mathbf{r}) | i\hbar\nabla | u_c(\mathbf{r}) \rangle|^2, \quad (2)$$

где $u_h(\mathbf{r})$, $u_c(\mathbf{r})$ — блоховские амплитуды для состояний тяжелых дырок и электронных состояний в зоне проводимости.

Суммарный темп излучательной рекомбинации получается интегрированием (1) по всем возможным энергиям перехода.

В узкозонных полупроводниках существенным является влияние непараболичности спектра электронов, поэтому для расчета матричного элемента (2) следует использовать трехзонную модель Кейна [2,6]. Представляя блоховские амплитуды $\bar{u}_h(\mathbf{r})$ и $u_c(\mathbf{r})$ в виде разложения по блоховским амплитудам краев зон [2,6] и производя суммирование, получаем

$$|M_{hc}|^2 = \frac{m^2 P^2}{\hbar^2} \frac{3E_c^2}{3E_c^2 + 2k^2 P^2}, \quad (3)$$

где P — кейновский матричный элемент, квадрат которого в трехзонной модели Кейна равен

$$P^2 = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 E_g}{m_c}.$$

Для дальнейших вычислений удобнее преобразовать выражение (3), выразив произведение kP из закона дисперсии для электронов [2,6]

$$E_c = \frac{E_g}{2} + \sqrt{\frac{E_g^2}{4} + \frac{2}{3} k^2 P^2}. \quad (4)$$

В итоге для матричного элемента оптического перехода с учетом непараболичности спектра электронов получаем следующее выражение:

$$|M_{hc}|^2 = \frac{m^2 P^2}{\hbar^2} \frac{E_c}{2E_c - E_g}. \quad (5)$$

3. Функция распределения горячих носителей

Так как функция распределения горячих носителей зависит только от энергии частиц E , можно воспользоваться уравнением Фоккера–Планка, которое в стационарном случае будет иметь вид [2]

$$\frac{\partial}{\partial E} I(E) = 0, \quad (6)$$

где $I(E)$ — поток частиц в пространстве энергий.

Поток электронов в зоне проводимости $I(E_c)$ представляет собой сумму двух составляющих: потока, обусловленного разогревом электронов вследствие оже-рекомбинации $I_a(E_c)$, и потока, обусловленного энергетической релаксацией носителей $I_e(E_c)$ (излучательной

рекомбинацией горячих носителей здесь можно пренебречь, так как это гораздо более медленный процесс, чем энергетическая релаксация). Далее будем считать функцию распределения горячих носителей малой по сравнению с единицей. В качестве критерия малости будем рассматривать неравенство $f_e(E_F) < 1/2$, где E_F — энергия Ферми для электронов в зоне проводимости. Далее будем рассматривать лишь случай, когда электроны вырождены, так как в случае невырожденных носителей концентрация горячих электронов очень мала и этот случай нас не интересует. Для InSb это соответствует концентрации носителей заряда $n > 4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Считая время релаксации и энергию оптического фонона не зависящими от энергий или концентраций частиц, получаем выражение для $I_e(E_c)$:

$$I_e(E_c) = \frac{1}{\tau_e} \int_{E_c}^{E_c + \hbar\omega^{\text{opt}}} f_e(E_1) \rho(E_1) dE_1, \quad (7)$$

где $\hbar\omega^{\text{opt}}$ — энергия оптического фонона, τ_e — время релаксации электронов по энергии.

Предположим, что все электроны в зоне проводимости имеют одинаковую энергию, равную средней энергии электронов $\bar{E} \approx (3/5)E_F + (2/5)E_g$. Тогда поток, обусловленный оже-рекомбинацией, в интервале энергий $\bar{E} < E_c < 2\bar{E}$ от энергии не зависит и равен полной скорости оже-рекомбинации, т.е. $I_a = \gamma_n n^2 p$, где γ_n — коэффициент оже-рекомбинации, n, p — концентрации носителей заряда.

Уравнение (6) для полного потока в пространстве энергий с учетом (7) примет вид

$$\frac{\partial}{\partial E_c} \left[\frac{1}{\tau_e} \int_{E_c}^{E_c + \hbar\omega^{\text{opt}}} f_e(E_1) \rho(E_1) dE_1 - \gamma_n n^2 p \right] = 0. \quad (8)$$

Взяв производную, получаем

$$\frac{1}{\tau_e} [f_e(E_c + \hbar\omega^{\text{opt}}) \rho(E_c + \hbar\omega^{\text{opt}}) - f_e(E_c) \rho(E_c)] = 0, \quad (9)$$

т.е. подынтегральная функция равна константе. Отсюда сам интеграл из выражения (7) равен

$$\frac{1}{\tau_e} \int_{E_c}^{E_c + \hbar\omega^{\text{opt}}} f_e(E_1) \rho(E_1) dE_1 = \frac{f_e(E_c) \rho(E_c) \hbar\omega^{\text{opt}}}{\tau_e}.$$

Приравняв оба потока друг другу, можно найти выражение для функции распределения:

$$f_e(E_c) = \frac{\gamma_n n^2 p \tau_e}{\rho(E_c) \hbar\omega^{\text{opt}}}. \quad (10)$$

В области энергий $E_c > 2\bar{E}$ функция распределения равна нулю.

Отметим, что формулу (10) можно получить и без предположения, что все электроны в зоне проводимости

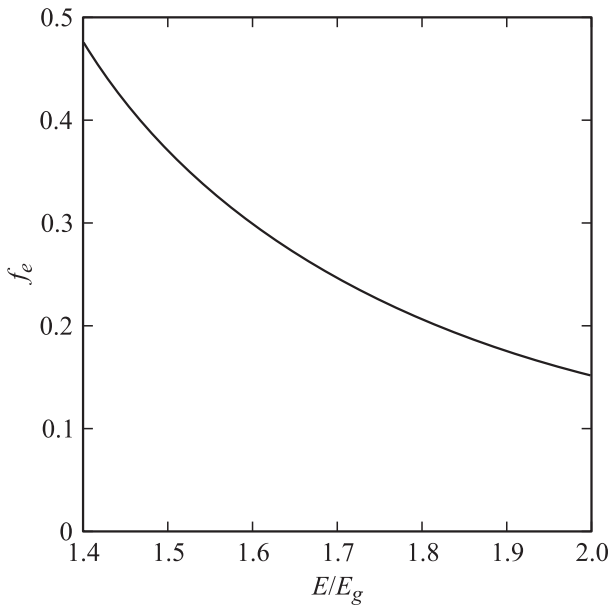


Рис. 1. Функция распределения горячих носителей при концентрациях носителей заряда $n = 2.1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $p = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

имеют одну и ту же энергию, но для этого должно быть выполнено условие $E_F < 2E_g$. Тогда, пренебрегая тепловым „хвостом“ функции распределения „холодных“ носителей, в интервале энергий $E_F < E_c < 2E_g$ можно, проведя аналогичные рассуждения, получить формулу (10). В этом случае полученная формула является весьма точной, и на ее основании может быть сделан вывод о возможности получения инверсии заселенностей для электронов с энергией $E_c = 2E_g$. При значениях энергии $E_c > 2E_g$ возникает расхождение с формулой (10) за счет того, что пары электронов с суммарной энергией, меньшей E_c , перестают давать вклад в поток I_a . Поэтому в интервале энергий $E < E_c < 2E_g$ формулу (10) можно использовать лишь для приближенной оценки суммарной скорости излучательной рекомбинации горячих носителей.

Вычислим концентрации n и p на пороге инверсии горячих носителей при энергии перехода $2E_g$. Порогу инверсии соответствует соотношение для функций распределения горячих электронов и дырок

$$f_e(2E_g) = 1 - f_h(E_h), \quad (11)$$

где E_h — энергия тяжелой дырки с волновым вектором, соответствующим энергии электрона $2E_g$. Подставляя зависимость энергии Ферми тяжелых дырок от их концентрации, получим

$$\frac{\gamma_n n^2 p \tau_\varepsilon}{\rho(2E_g) \hbar \omega^{\text{opt}}} = \frac{1}{1 + \exp\left\{\frac{[\hbar^2(3\pi^2 p)^{2/3} - 4m_c E_g]/m_h kT}{\hbar \omega^{\text{opt}}}\right\}}. \quad (12)$$

Это трансцендентное уравнение нельзя решить в общем виде, поэтому найдем численные решения в двух наиболее важных случаях.

Пусть $n = p$, тогда пороговая концентрация носителей заряда будет равна $1.2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Однако в этом случае значение функции распределения есть $f_e(2E_g) = 0.54$, что свидетельствует о неприменимости формулы (10).

Пусть концентрация электронов будет равна $n = 2.1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Тогда пороговая концентрация дырок будет равна $p = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $f_e(2E_g) = 0.15$, $f_e(E_F) = 0.47$. График функции распределения при данных концентрациях носителей заряда приведен на рис. 1.

4. Скорость излучательной рекомбинации горячих носителей

Подставив в формулу (1) найденные значения матричного элемента (5) и произведение $\rho(E_c) f_e(E_c)$ (10), получим следующее выражение для скорости спонтанных оптических переходов горячих электронов:

$$r_{\text{sp}}(E_c) = \frac{4\sqrt{\kappa_\infty} e^2 P^2}{\hbar^4 c^3} \frac{\gamma_n n^2 p \tau_\varepsilon}{\hbar \omega^{\text{opt}}} \frac{E_c^2}{2E_c - E_g} [1 - f_e(E_h)], \quad (13)$$

где значения энергии принадлежат диапазону $E_F < E_c < (4/5)E_g + (6/5)E_F$ (здесь учтено, что $2\bar{E} = (4/5)E_g + (6/5)E_F$).

Суммарная скорость спонтанной излучательной рекомбинации горячих носителей заряда получается интегрированием (13) в этом диапазоне энергий:

$$R_{\text{sp}} = \int_{E_F}^{\frac{4}{5}E_g + \frac{6}{5}E_F} r_{\text{sp}}(E_c) dE_c. \quad (14)$$

Далее будем считать функцию распределения дырок ступенчатой. Тогда излучательная рекомбинация возможна вплоть до значения волнового вектора носителей, равного волновому вектору Ферми тяжелых дырок $k_{Fh} = (3\pi^2 p)^{1/3}$, а множитель $1 - f_e(E_h)$ равен единице. Соответствующая этому значению волнового вектора энергия электронов равна

$$E_c(k_{Fh}) = \frac{E_g}{2} + \sqrt{\frac{E_g^2}{4} + \frac{2}{3} k_{Fh}^2 P^2}.$$

Таким образом, в качестве верхнего предела интегрирования в (14) следует взять меньшую из энергий $2\bar{E}$ и $E_c(k_{Fh})$. В случае $2\bar{E} > E_c(k_{Fh})$ для суммарной скорости излучательной рекомбинации получится следующее выражение:

$$R_{\text{sp}} = \int_{E_F}^{E_c(k_{Fh})} r_{\text{sp}} dE_c = \frac{4\sqrt{\kappa_\infty} e^2 P^2}{\hbar^4 c^3} \frac{\gamma_n n^2 p \tau_\varepsilon}{\hbar \omega^{\text{opt}}} \times \left\{ \frac{1}{4} [(E_c(k_{Fh}) - E_g/2)^2 - (E_F - E_g/2)^2] + \frac{E_g}{2} (E_c(k_{Fh}) - E_F) + \frac{E_g^2}{8} \ln \frac{E_c(k_{Fh}) - E_g/2}{E_F - E_g/2} \right\}. \quad (15)$$

Член, содержащий логарифм, намного меньше остальных, поэтому им можно пренебречь. Оставшиеся можно разложить на множители:

$$R_{sp} = \frac{3}{4} \frac{\sqrt{\kappa_{\infty}} e^2 E_g}{m_c \hbar^2 c^3} \frac{\gamma_n n^2 p \tau_{\epsilon}}{\hbar \omega^{opt}} \times [E_c(k_{Fh}) - E_F] [E_c(k_{Fh}) + E_F + E_g]. \quad (16)$$

Здесь мы учли, что

$$p^2 = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 E_g}{m_c}.$$

Если выражение (16) разделить на произведение nr , получится коэффициент излучательной рекомбинации горячих носителей

$$\gamma_{sp} = \frac{3}{4} \frac{\sqrt{\kappa_{\infty}} e^2 E_g}{m_c \hbar^2 c^3} \frac{\gamma_n n \tau_{\epsilon}}{\hbar \omega^{opt}} \times [E_c(k_{Fh}) - E_F] [E_c(k_{Fh}) + E_F + E_g]. \quad (17)$$

В противоположном случае $2\bar{E} < E_c(k_{Fh})$ мы получим

$$R_{sp} = \int_{E_F}^{2\bar{E}} r_{sp}(E_c) dE_c = \frac{3}{4} \frac{\sqrt{\kappa_{\infty}} e^2 E_g}{m_c \hbar^2 c^3} \frac{\gamma_n n^2 p \tau_{\epsilon}}{\hbar \omega^{opt}} \times \left(\frac{1}{5} E_F + \frac{4}{5} E_g \right) \left(\frac{11}{5} E_F + \frac{13}{5} E_g \right) \quad (18)$$

и

$$\gamma_{sp} = \frac{3}{4} \frac{\sqrt{\kappa_{\infty}} e^2 E_g}{m_c \hbar^2 c^3} \frac{\gamma_n n \tau_{\epsilon}}{\hbar \omega^{opt}} \times \left(\frac{1}{5} E_F + \frac{4}{5} E_g \right) \left(\frac{11}{5} E_F + \frac{13}{5} E_g \right). \quad (19)$$

Для концентраций носителей, соответствующих порогу инверсии ($n = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $p = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$), реализуется случай $2\bar{E} < E_c(k_{Fh})$, т.е. для расчета коэффициента излучательной рекомбинации нужно использовать формулу (19).

Для наглядности найдем скорость излучательной рекомбинации „холодных“ электронов (т.е. с энергией от E_g до E_F). По тому же алгоритму получаем

$$R_{sp}^{cold} = \frac{\sqrt{\kappa_{\infty}} e^2 P^2 \rho_0}{6 \hbar^4 c^3 E_g^{3/2}} (3E_F^4 - 2E_F^3 E_g + E_g^4). \quad (20)$$

При выводе (20) мы учли, что плотность состояний в зоне проводимости с учетом непараболичности спектра электронов равна

$$\rho(E) = \frac{\rho_0 (2E - E_g) \sqrt{E(E - E_g)}}{E_g^{3/2}}, \quad \rho_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{m_c^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}.$$

На рис. 2 показана зависимость коэффициента излучательной рекомбинации горячих электронов от их

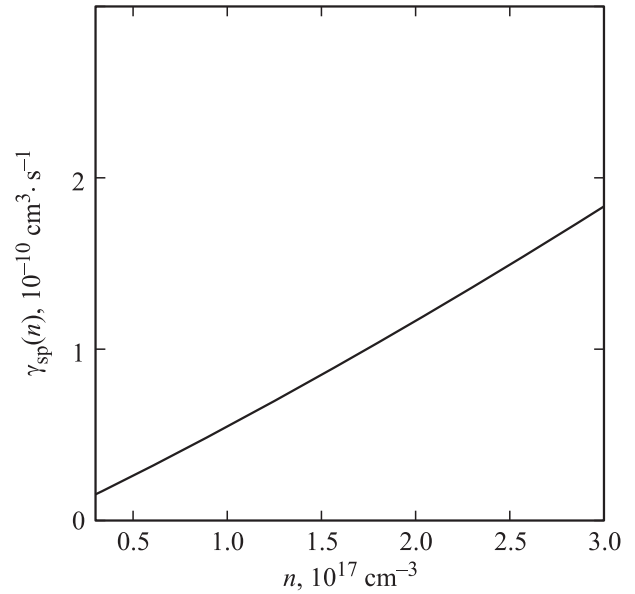


Рис. 2. Зависимость коэффициента излучательной рекомбинации горячих носителей от концентрации электронов.

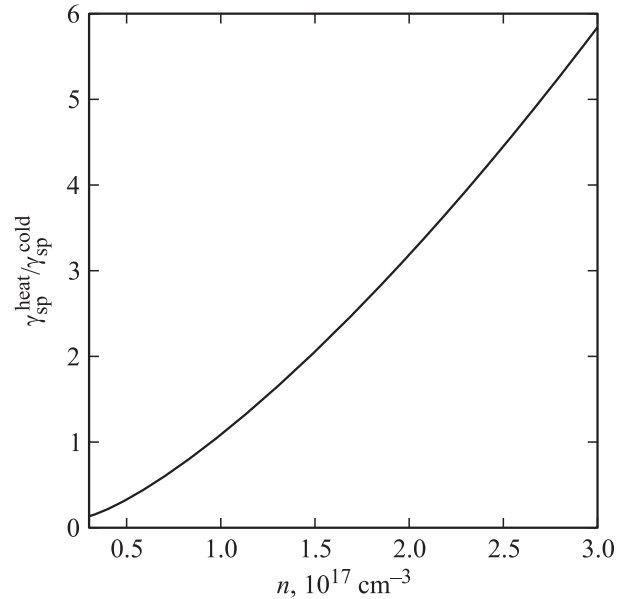


Рис. 3. Отношение коэффициентов излучательной рекомбинации горячих и „холодных“ носителей для различных концентраций электронов.

концентрации при $p = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. При концентрации электронов $n = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $\gamma_{sp} \approx 2 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$, а соответствующее этому значению время излучательной рекомбинации горячих носителей равно $\tau \approx 2 \cdot 10^{-10} \text{ с}$. График обрывается при значении $n = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, так как при более высокой концентрации электронов нарушается условие малости функции распределения.

На рис. 3 показано отношение $\gamma_{sp}^{heat} / \gamma_{sp}^{cold}$ для коэффициентов излучательной рекомбинации горячих и холодных носителей. Видно, что в области concentra-

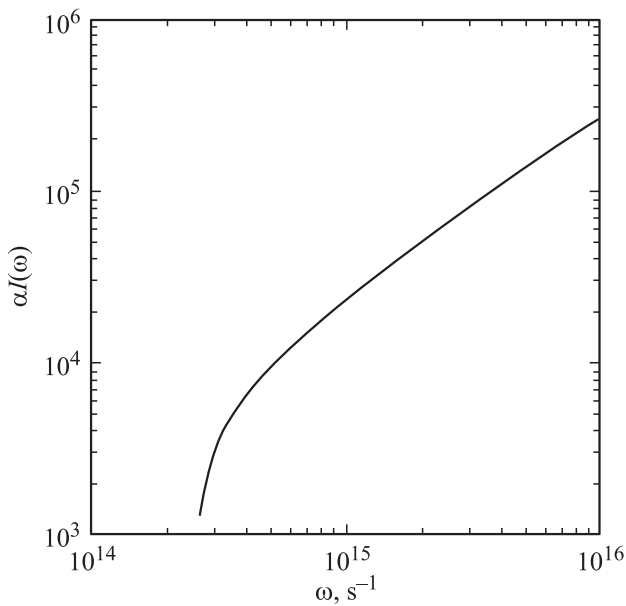


Рис. 4. Зависимость коэффициента поглощения от частоты оптического перехода с учетом непараболичности энергетического спектра носителей.

ций $n > 10^{17} \text{ см}^{-3}$ излучательная рекомбинация горячих носителей становится доминирующим каналом излучательной рекомбинации.

Теперь вычислим коэффициент усиления, обусловленный излучательной рекомбинацией горячих носителей, при энергии перехода $\hbar\omega = 2E_g$. Он будет равен [5]

$$g(2E_g) = \frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{\pi^2 e^2 P^2 \rho_0}{\sqrt{\kappa_\infty} \hbar c E_g} [f_e(2E_g) - f_e(E_h)], \quad (21)$$

где E_h находится из закона сохранения квазиимпульса $k_c = k_h$.

При концентрациях носителей $n = 2.1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $p = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ значение коэффициента усиления равно $g(2E_g) = 20.4 \text{ см}^{-1}$. Данное значение больше характерного значения внутренних потерь лазерной структуры, и это позволяет сделать вывод о возможности лазерной генерации на данной частоте.

Для широкого класса задач по изучению оптических свойств полупроводников требуется знание зависимости коэффициента поглощения от частоты оптического перехода ω . Ранее эта зависимость вычислялась лишь вблизи дна зоны проводимости без учета непараболичности энергетического спектра носителей и имела вид $\alpha(\omega) \propto \sqrt{\hbar\omega - E_g}$. Однако из общего выражения для коэффициента усиления [5], считая валентную зону полностью заполненной, а зону проводимости пустой, можно получить выражение для коэффициента поглощения для любых значений частоты оптического перехода ω с учетом непараболичности:

$$\alpha(\omega) = \frac{3\sqrt{2}}{2} \frac{e^2}{\hbar^2 c} \sqrt{\hbar\omega(\hbar\omega - E_g)}. \quad (22)$$

На рис. 4 приведена зависимость коэффициента поглощения в InSb от частоты оптического перехода. Отметим, что при частотах $\hbar\omega \gg E_g$ зависимость коэффициента поглощения от частоты становится линейной.

5. Заключение

В данной работе были получены следующие результаты:

- рассчитана функция распределения горячих носителей; показано на примере антимонида индия, что в узкозонных полупроводниках возможно достижение существенной концентрации горячих электронов вследствие их разогрева путем оже-процесса СНСС;

- рассчитан матричный элемент для прямых межзонных оптических переходов горячих носителей в рамках трехзонной модели Кейна;

- рассчитан коэффициент излучательной рекомбинации горячих носителей; показано, что излучательная рекомбинация горячих носителей может быть существенной, а при определенных условиях и доминирующим каналом излучательной рекомбинации;

- рассчитан коэффициент усиления, обусловленный излучательной рекомбинацией горячих носителей; из полученного значения для коэффициента усиления при энергии перехода $2E_g$ и концентрациях носителей $n = 2.1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $p = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ можно сделать вывод о возможности лазерной генерации на данной частоте;

- рассчитан коэффициент поглощения для любой частоты оптического перехода с учетом непараболичности энергетического спектра носителей.

Список литературы

- [1] Л.Е. Воробьев, С.Н. Данилов, Г.Г. Зегря, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин, И.Н. Ясевич, Е.В. Берегулин. *Фотоэлектрические явления в полупроводниках и размерно-квантованных структурах* (СПб., Наука, 2001).
- [2] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясевич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб., Изд-во ПИЯФ, 1997).
- [3] О.А. Аллаберенов, Н.В. Зотова, Д.Н. Наследов, Л.Д. Неуймина. *ФТП*, **4**, 1939 (1970).
- [4] М. Банси-Грийо, Э. Грийо, Н.В. Зотова, М. Эже. *ФТП*, **10**, 53 (1976).
- [5] В.П. Грибковский. *Теория поглощения и испускания света в полупроводниках* (Минск, Наука и техника, 1975).
- [6] Б.Л. Гельмонт, Г.Г. Зегря. *Основы зонной теории полупроводников* (Л., Изд-во ФТИ, 1989).

Редактор Л.В. Шаронова

Radiative recombination of hot carriers in narrow gap semiconductors

N.V. Pavlov, G.G. Zegrya

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Hot carriers radiative recombination in narrow gap semiconductors is described. It is shown that CHCC Auger process may be account for carriers heating at high excitation level. The hot electron distribution function and electron concentration are obtained. Calculations of the hot carriers radiative recombination rate and the radiation gain coefficient are produced with three-band Kane model. It is shown that hot carriers radiative recombination may be a sufficient way of radiative recombination in the terms of high carrier concentrations.