01;05;06

О новом комбинационном механизме захвата горячих электронов в полупроводнике

© З.С. Качлишвили, М.Г. Хизанишвили, Э.Г. Хизанишвили

Тбилисский государственный университет им. И. Джавахишвили,
380028 Тбилиси, Грузия
e-mail: Usc@ictsu.tsu.edu.ge marina@ictsu.tsu.edu.ge

(Поступило в Редакцию 9 июня 2003 г.)

Предложен новый комбинационный механизм рекомбинации — ударнотепловой (УТ). Вычислено соответствующее сечение захвата. Установлены области электрических полей, для которых указанный механизм входит в силу и становится доминирующим над лэксовским каскадным механизмом. Вычисления проводились для n-типа образцов с разными концентрациями нейтральных атомов примеси N_0 и степенями компенсации K.

Хорошо известно, что в определенных условиях комбинационные механизмы захвата носителей заряда и ионизации примесей становятся доминирующими по сравнению с прямыми процессами. Примером этого служит, скажем, лэксовский каскадный процесс захвата [1]: электрон захватывается на один из высоковозбужденных уровней центров захвата, а затем опускается по квазинепрерывно расположенным уровням, испуская акустические фононы. Общеизвестно, что сечение захвата такого процесса больше, чем сечение прямого однофононного захвата Гуммеля–Лэкса [2]. Примерами же комбинационных механизмов ионизации примесных атомов можно привести фототермические, термополевые и электротермические процессы ионизации. Исследованию перечисленных комбинационных механизмов захвата и ионизации посвящено множество экспериментальных и теоретических работ (см., например, [3–9]).

В настоящем сообщении предлагается новый комбинационный механизм рекомбинации, сечение которого в определенных условиях становится больше сечения гигантских ловушек Лэкса. Физическая идея заключается в следующем [10,11]. При наличии нейтральных атомов примеси горячий электрон, испытывая неупругое рассеяние на них, теряет энергию на их возбуждение $1s \to 2p$, а сам захватывается на положительный центр. Очевидно, что неупругое рассеяние существенно облегчает захват электрона на высоковозбужденный уровень, а переход в основное состояние происходит каскадным механизмом.

Пусть имеется примесный полупроводник с концентрацией доноров N_D и акцепторов N_A. Тогда концентрация положительно заряженных центров $N_+ = N_A + n$, а $N_0 = N_D - N_A - n$ — концентрация нейтральных примесей. Здесь n — концентрация свободных электронов в зоне проводимости.

Очевидно, что возбуждение нейтральных центров $1s \to 2p$ могут осуществлять только те электроны, энергии которых $\varepsilon \geq \Delta\varepsilon$, где $\Delta\varepsilon$ — энергия возбуждения. В импульсном пространстве в простейшей модели спектра это те электроны, которые находятся вне сферы с радиусом $\Delta p = \sqrt{2m\Delta\varepsilon}$. Электроны с импульсом p, претерпевшие неупругое рассеяние, окажутся внутри маленькой сферы с радиусом $(p - \Delta p)$. Эти электроны могут 1) рассеиваться квазиупруго за время τ и выйти из этой сферы; 2) ускоряться в поле E за время $\tau_E = \Delta p/eE$ и снова приобрести импульс Δp; 3) быть захвачены за время τ_3 притягивающим N_+ центром. Для определенных значений электрического поля, концентрации N_+ и N_0 центров и температуры решетки могут быть выполнены следующие неравенства

$$\tau_3 < \tau, \quad \tau_E. \tag{1}$$

При выполнении этих неравенств электроны, как только окажутся внутри маленькой сферы, сразу же будут захвачены на N_+ центры за время τ_3, не успевая при этом квазиупруго рассеиваться или же ускоряться в поле до начального состояния.

Следовательно, в условиях (1), указанное сложное неупругое рассеяние горячих электронов (потеря энергии и сразу захват), по-видимому, можно рассмотреть как единое составное рассеяние. В таком случае время жизни электрона относительно комбинационного процесса захвата можно представить как сумму характерных времен возбуждения $1s \to 2p$ и захвата

$$\tau_{УТ} = \tau_0 + \tau_+, \tag{2}$$

где через $\tau_{УТ}$ обозначено время жизни относительно комбинационного захвата, который в дальнейшем будет упомянут как ударно-тепловой механизм захвата; через τ_0 и τ_+ обозначены характерные времена составляющих ударно-теплового механизма элементарных процессов, соответственно возбуждения и захвата.

Исходя из соотношения (2) и связи характерных времен с соответствующими вероятностями, для вероятности комбинационного УТ механизма захвата получаем

$$W_{\text{УТ}} = \frac{W_0 W_+}{W_0 + W_+}, \tag{3}$$

где сохраняется смысл индексов.

Как видно из выражения (3), условие (2) дает приведенную вероятность для комбинационного процесса: она меньше вероятности отдельных элементарных процессов, что физически вполне понятно.

Вероятность неупругого рассеяния электрона в единицу времени на нейтральные центры, при котором электрон переходит из состояния с энергией ε в состояние с энергией $(\varepsilon - \Delta\varepsilon)$, а примесный нейтральный центр — из $1s$ в $2p$, равна

$$W_0 = N_0 \sigma_0(\varepsilon) v(\varepsilon), \tag{4}$$

где

$$\sigma_0 = \pi a_0^2 \left(\frac{Ry}{\Delta\varepsilon}\right)^2 \left(\frac{E_1}{E_0}\right)^{3/2} \frac{\vartheta_{\chi_{\min}}(\alpha_0, \alpha_1)}{2l_0 + 1} \Phi(U) \tag{5}$$

представляет сечение неупругого рассеяния на нейтральный центр [12]; $v(\varepsilon)$ — скорость электрона,

$$\Phi(U) = \left(\frac{U}{U+1}\right)\left(\frac{C}{U+\varphi}\right); \tag{6}$$

Ry — единица Ридберга; $\vartheta_{\chi_{\min}}(\alpha_0, \alpha_1)$ — угловой фактор, зависящий от квантовых чисел угловых моментов состояния α_0 и α_1; l_0 — орбитальное квантовое число; значение параметров C и φ дается в [12].

Вероятность каскадного захвата электрона с энергией $(\varepsilon - \Delta\varepsilon)$ на положительный центр можно записать также в виде (4)

$$W_+ = N_+ \sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon) v(\varepsilon - \Delta\varepsilon), \tag{7}$$

где, согласно [13],

$$\sigma_+(\xi) = \frac{1}{3} \frac{4^6 \sigma_1}{\gamma^3 \xi (\xi/\gamma + \delta_0)^3} \left(1 - \exp\left(-\frac{\xi/\gamma + \delta_0}{8}\right)\right), \tag{8}$$

$$\xi = \frac{2\varepsilon}{mS^2}, \quad \gamma = \frac{2k_0 T}{mS^2},$$

S — скорость звука в полупроводнике, δ_0 — минимальная энергия связи, σ_1 — величина размерности сечения, m — эффективная масса электрона.

С учетом (4) и (7) выражение (3) принимает вид

$$W_{\text{УТ}} = \frac{N_0 v(\varepsilon)\sigma_0(\varepsilon) N_+ v(\varepsilon - \Delta\varepsilon)\sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)}{N_0 v(\varepsilon)\sigma_0(\varepsilon) + N_+ v(\varepsilon - \Delta\varepsilon)\sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)}. \tag{9}$$

Определим теперь дифференциальное эффективное сечение УТ процесса захвата, используя выражение (9). Из (9) видно, что $W_{\text{УТ}}$ пропорционально $N_0 N_+$. Тогда, исходя из общей связи вероятности и соответствующего дифференциального сечения и сохраняя пропорциональность между $W_{\text{УТ}}$ и $N_0 N_+$, с учетом размерности, по-видимому, можно написать, что

$$W_{\text{УТ}} = \sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon) v(\varepsilon) \frac{N_0 N_+}{N_0 + N_+}. \tag{10}$$

С использованием (9) и (10) для эффективного дифференциального сечения сложного УТ механизма захвата получаем

$$\sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon) = \frac{\sigma_0(\varepsilon)\sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)\sqrt{1 - \dfrac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon}}}{(1-K)\sigma_0(\varepsilon) + K\sqrt{1 - \dfrac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon}}\sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)} \tag{11}$$

при $N_A \gg n$. Здесь $K \equiv N_A/N_D$ — степень компенсации образца.

Как видим из (11), дифференциальное сечение комбинационного процесса зависит от степени компенсации образца и соотношения энергий возбуждения и свободного электрона. Рассмотрим частные случаи.

1. $K \ll 1$. Для любого соотношения между ε и $\Delta\varepsilon$ можно пренебречь в знаменателе (11) вторым слагаемым. Тогда получаем

$$\sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon) = \frac{\sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)\sqrt{1 - \dfrac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon}}}{(1-K)}$$

$$\approx \sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)\sqrt{1 - \frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon}}. \tag{11a}$$

а) При $\varepsilon \gg \Delta\varepsilon$

$$\sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon) \cong \sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon). \tag{11b}$$

б) При $\varepsilon \geq \Delta\varepsilon$ $\sigma_{\text{УТ}}$ дается выражением (11a).

2. $K \leq 1$.

а) При $\varepsilon \gg \Delta\varepsilon$

$$\sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon) \cong \sigma_0(\varepsilon). \tag{11c}$$

б) При $\varepsilon \geq \Delta\varepsilon$ для $\sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon)$ получается опять выражение (11c). Это связано с тем, что в рассмотренном случае слагаемые в знаменателе (11) содержат величины одного порядка малости $(1-K)$ и $\sqrt{1 - (\Delta\varepsilon/\varepsilon)}$, но $\sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)$ имеет резкий максимум при $\varepsilon \geq \Delta\varepsilon$ (см. (8)).

На рис. 1 приведена энергетическая зависимость отношения $\sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon)/\sigma_+(\varepsilon)$ (см. (11) и (8)) для разных степеней компенсации образца.

Как и следовало ожидать, для малых значений степени компенсации (кривые *1–3*) сечение УТ механизма захвата определяется $\sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)$ зависимостью и является убывающей функцией энергии захватываемого электрона. С ростом степени компенсации (кривые *4–6*) в $\sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon)$ зависимости все шире становится область, где определяющим является $\sigma_0(\varepsilon)$ (растущая часть кривых).

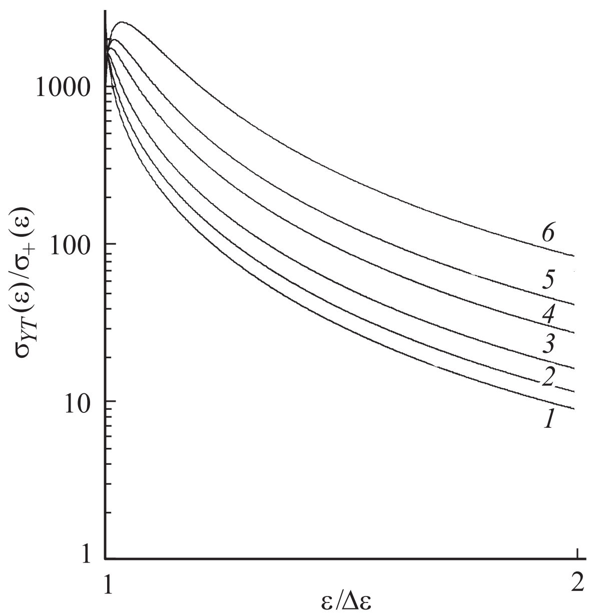

Рис. 1. Зависимость соотношения $\sigma_{\text{УТ}}(\varepsilon)/\sigma_+(\varepsilon)$ от $\varepsilon/\Delta\varepsilon$ при разных значениях степени компенсации образца: $K = 0.1$ (*1*), 0.3 (*2*), 0.5 (*3*), 0.7 (*4*), 0.8 (*5*), 0.9 (*6*).

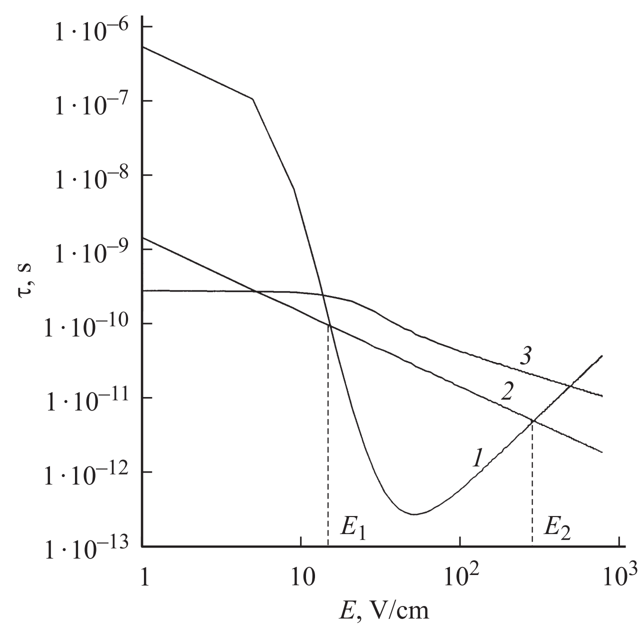

Рис. 2. Соотношение времен жизни: τ_3 (*1*), τ_E (*2*) и τ (*3*) для образца с $N_0 = 5 \cdot 10^{15}\,\text{см}^{-3}$ и $K = 0.5$.

Найдем теперь условия, при которых выполняются неравенства (1). Из вышеприведенных рассуждений легко можно убедиться, что доминирующими механизмами рассеяния импульса являются рассеяния на нейтральных и ионизированных атомах примеси, а рассеяние энергии происходит на акустических фононах. В этих условиях симметричная часть функции распределения принимает вид [10]

$$f_0(x) = \exp\left\{-\int^{x} \frac{dx}{1 + \dfrac{E^2}{E_0^2}\dfrac{1}{\sqrt{x} + \dfrac{l_N^0}{l_1^0}\dfrac{1}{x}}}\right\}, \tag{12}$$

где

$$\frac{1}{E_0^2} = \frac{e^2 \cdot l_N^0 \cdot l_a^0}{3(k_0 T)^2}; \tag{13}$$

l_1^0 и l_N^0 — не зависимые от энергии электрона части длин свободного пробега по импульсу при рассеянии на ионах и на нейтральных примесных центрах соответственно; l_a^0 — длина свободного пробега по энергии, которая учитывает только рассеяние на акустических колебаниях решетки.

Для проведения конкретных расчетов запишем явно выражения для времен, входящих в систему неравенств (1). Время захвата электрона τ_3 на притягивающем N_+ центре после рассеяния на нейтральном атоме примеси, а значит после потери энергии $\Delta\varepsilon$, дается как

$$\tau_3 = \frac{1}{N_+\langle\sigma_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon) \cdot v_+(\varepsilon - \Delta\varepsilon)\rangle}. \tag{14}$$

Усреднение скорости рекомбинации $\langle\sigma \cdot v\rangle$ проводим с помощью функции распределения (12) в соответствии

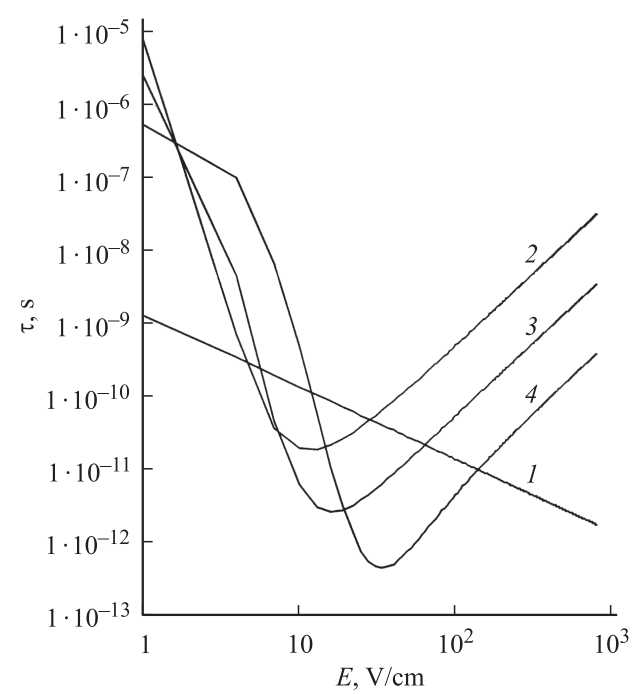

Рис. 3. Времена жизни τ_E (*1*) и τ_3 (*2–4*) для образца с $N_0 = 5 \cdot 10^{14}\,\text{см}^{-3}$ и разными степенями компенсации K: *2* — 0.1, *3* — 0.5, *4* — 0.9.

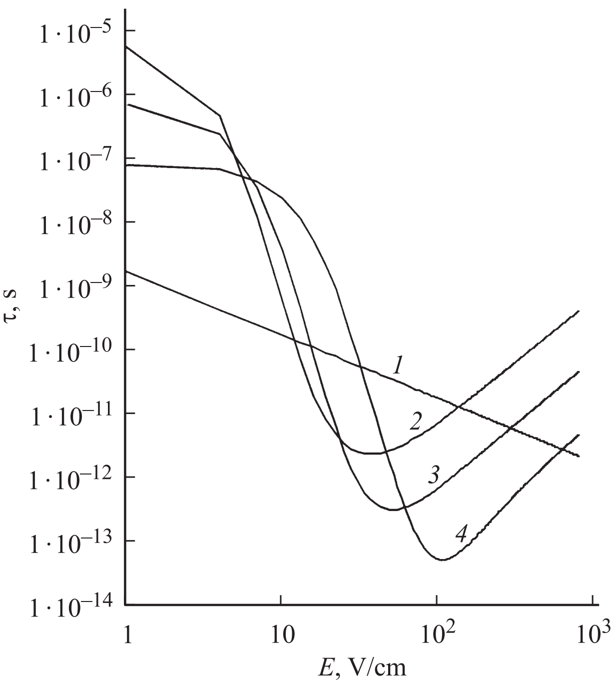

Рис. 4. Времена жизни τ_E (*1*) и τ_3 (*2–4*) для образца с $N_0 = 5\cdot10^{15}$ см$^{-3}$ и разными степенями компенсации (значения K те же, что и на рис. 3).

с условиями поставленной задачи

$$\langle\sigma(x-\Delta x)\cdot v(x-\Delta x)\rangle = \frac{\int\limits_{\Delta x}^{\infty}\sigma(x-\Delta x)\cdot v(x-\Delta x)\cdot\sqrt{x}\cdot f_0(x)dx}{\int\limits_{0}^{\infty}\sqrt{x}\cdot f_0(x)dx}. \quad (15)$$

Что касается величин τ_E и τ, расположенных в правой части неравенств (1), имеем

$$\tau_E = \frac{\sqrt{2\Delta x\cdot m\cdot(k_0T)}}{eE},$$

$$\tau = \frac{\pi\hbar\rho}{2\sqrt{2}m^{5/2}E_c^2(k_0T)^{1/2}}\,(\bar{x})^{-1/2}. \quad (16)$$

Задачу решаем графически. Область электрического поля, для которой система неравенств (1) является выполнимой $\Delta E\equiv E_2-E_1$, находим как точки пересечения кривых τ_3 и τ_E, поскольку неравенство $\tau_3<\tau$ выполняется в более широкой области изменения E, чем неравенство $\tau_3<\tau_E$ (рис. 2).

С изменением K и N_0 резко меняются значения E_1 и E_2. На рис. 3 и 4 приведены области ΔE, в которой справедливы неравенства (1) для $N_0 = 5\cdot10^{14}$ и $5\cdot10^{15}$ см$^{-3}$.

Как видно из рис. 3 и 4, с ростом K и N_0 неравенства (1) выполняются в более высоких электрических полях. Это и неудивительно, поскольку чем интенсивнее протекают процессы рассеяния на ионных и нейтральных центрах примеси, тем более высокие поля нужны для достижения определенных значений средней энергии электронов, в частности энергии $\Delta\varepsilon$, обязательной для осуществления неупругих процессов рассеяния.

Резюмируя полученные результаты, заключаем: для определенного значения концентрации нейтральных и ионизированных атомов примеси при низких температурах всегда существует область приложенного электрического поля ΔE, в которой УТ механизм захвата горячих электронов является доминирующим механизмом.

Работа выполнена при финансовой поддержке МНТЦ (грант № G-394).

Список литературы

[1] *Lax M.* // Phys. Rev. 1960. Vol. 119. N 5. P. 1502.
[2] *Gummel H., Lax M.* // Ann. Phys. 1957. N 2. P. 28.
[3] *Абакумов В.Н., Яссиевич И.Н.* // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. Вып. 2. С. 657–663.
[4] *Берман Д.В., Домашева Т.И., Юков А.Г.* // ФТП. 1973. Т. 7. № 10. С. 1882.
[5] *Карпус В., Перель В.И.* // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 91. Вып. 6. С. 2319.
[6] *Крючков С.В., Сыродоев Г.А.* // ФТП. 1991. Т. 25. Вып. 4. С. 655.
[7] *Джакели В.Г.* // Сообщ. АН ГССР. 1992. Т. 145. С3. С. 525–528.
[8] *Крылов П.Н.* // ФТП. 2000. Т. 34. Вып. 3. С. 304–314.
[9] *Джакели В.Г., Качлишвили З.С., Хизанишвили Э.Г.* // Изв. вузов. Томск, 1999.
[10] *Kachlishvili Z.S.* // Phys. Stat. Sol. (a). 1976. Vol. 33. P. 15.
[11] *Джакели В.Г., Качлишвили З.С., Хизанишвили М.Г. Хизанишвили Э.Г.* // Сообщ. АН Грузии. 1999. Т. 160. № 3.
[12] *Вейнштейн А.А., Собельман И.И., Юков Е.А.* М.: Наука, 1979. С. 320.
[13] *Gegechkory T.O., Jackeli V.G., Kachlishvili Z.S.* // Phys. St. Sol. (b). 1982. Vol. 112. N 2. P. 379–390.