

вать не могут. С другой стороны, если радиус экранирования мал, то притяжение электрона к донору на больших расстояниях от последнего практически исчезает. Отсюда явствует, что уровни, которые в отсутствие экранирования были бы «водородными», должны исчезнуть, когда величина r_0 становится того же порядка, что и радиус соответствующей орбиты. В частности, при $r_0 \sim \epsilon \hbar^2 / me^2$ дискретные уровни должны исчезнуть вообще.

Согласно П.ХИ.6а и П.ХИ.6б радиус экранирования зависит от температуры и от концентрации экранирующих носителей заряда. Последняя может быть и неравновесной: инжектированные носители также принимают участие в экранировании, если их время жизни больше максвелловского времени релаксации. Таким образом, энергетическим спектром примесных уровней можно в известных пределах управлять, варьируя условия опыта. Исчезновение дискретных уровней в условиях сильной инжекции наблюдалось экспериментально: при увеличении уровня инжекции исчезали линии рекомбинационного излучения, связанные с переходами «донорный уровень — валентная зона».

§ 9. Механизмы рекомбинации

Как было показано в гл. IX, для описания рекомбинационных процессов необходимо задать коэффициент прямой междузонной рекомбинации α , значения энергий и факторов вырождения центров рекомбинации, а также по два коэффициента захвата α_n и α_p для каждого из уровней этих центров. Как видно из формул (IX.3.3) и (IX.4.3), коэффициенты захвата определяются вероятностями соответствующих процессов, а также видом функции распределения $f(p)$ в зонах проводимости и дырочной. В отсутствие равновесия по энергиям функция f отличается от фермиевской, чем и описывается возможное влияние нагрева носителей заряда на темп рекомбинации. В этом параграфе мы обсудим, какими физическими факторами определяются значения коэффициентов захвата и вид температурной их зависимости.

Важная роль ловушек в процессе рекомбинации определяется двумя факторами. Во-первых, захватываясь, например, из зоны проводимости на ловушку, электрон должен передать своему окружению в решетке меньшую энергию, нежели при непосредственном переходе в валентную зону. По этой причине вероятность первого процесса может оказаться заметно больше, чем второго.

Во-вторых, при захвате электрона или дырки на ловушку закон сохранения квазиимпульса может и не выполняться. Действительно, носитель заряда взаимодействует при этом не только с идеальной решеткой, но и с атомом примеси или иным структурным дефектом, образующим ловушку. По этой причине потенциальная его энергия уже не обладает свойством пространственной периодичности. Волно-

вая функция электрона на ловушке не имеет вида (III.2.15). Она локализована в пространстве и электрон в таком состоянии не характеризуется определенным квазиимпульсом. Неопределенность квазиимпульса особенно велика для глубоких ловушек, захватившись на которые носители заряда оказываются локализованными в сравнительно небольшой области пространства. С другой стороны, при малой силе взаимодействия с ловушкой, когда энергия ионизации ее невелика, область локализации расширяется, а неопределенность квазиимпульса Δp уменьшается. Какие именно значения Δp следует считать большими, а какие — малыми, зависит от характера задачи. При рассмотрении захвата электрона (или дырки) Δp надо сравнивать с «тепловым» квазиимпульсом p_T (если газ свободных носителей заряда не вырожден).

Как видно из рассуждений предыдущего параграфа, которые привели нас к формуле (8.4), линейный размер области локализации по порядку величины близок к $\hbar/\sqrt{m|E|}$, а неопределенность импульса — к $\sqrt{m|E|}$ *); под $|E|$ здесь надо понимать энергию ионизации данного локального уровня (для возбужденных уровней эта величина может быть заметно меньше энергии ионизации ловушки, определяемой как $E_c - E_t$ или — для дырки — как $E_t - E_v$).

Таким образом, при $|E| \ll kT$ неопределенность квазиимпульса мала, а при $|E| \gg kT$ — велика. В первом случае при рассмотрении процесса захвата электрон на ловушке можно рассматривать как «почти свободный» и закон сохранения квазиимпульса должен приближенно выполняться. Во втором случае даже приближенное сохранение квазиимпульса не имеет места. С точки зрения увеличения вероятности захвата это выгодно, так как теперь захват может происходить из любой точки зоны Бриллюэна.

Вероятность захвата на ловушку определяется начальным и конечным состояниями носителей заряда, а также способом отвода энергии, высвобождаемой при захвате. Иначе говоря, чтобы вычислить коэффициенты a_n и a_p , надо задать:

а) волновую функцию системы «решетка + свободный носитель заряда»;

б) волновую функцию системы «решетка + захваченный носитель»;

в) вид оператора энергии взаимодействия носителя заряда с его окружением в решетке.

Для достаточно мелких ловушек волновые функции носителей заряда можно найти с помощью метода эффективной массы (§ IV.4). В задаче о рекомбинации, однако, часто бывают интересны более глубокие центры захвата — с энергиями ионизации, сравнимыми с шириной запрещенной зоны. Теория таких центров в настоя-

*) В применении к глубоким ловушкам эта оценка имеет лишь ориентировочное значение, ибо методом эффективной массы там пользоваться нельзя.

щее время еще не завершена. По этой причине не всегда удается и полностью рассчитать коэффициенты захвата α_n и α_p . Все же, как мы увидим, температурная их зависимость в ряде важных случаев может быть установлена.

Пункт в) составляет, по существу, часть общей задачи об энергетическом спектре полупроводника. Действительно, в принципе энергия, высвобождаемая при захвате носителя заряда, может быть передана любым элементарным возбуждениям системы «электроны + решетка». В зависимости от конкретной природы этих возбуждений говорят о том или ином механизме рекомбинации (или механизме захвата). Как и при переходах зона—зона (§ IX.1), наиболее интересными здесь оказываются процессы с передачей энергии фотонам, фононам и другим носителям заряда (излучательный, фононный и ударный механизмы).

Механизм захвата существенно зависит от зарядового состояния ловушки до захвата (заряженная или нейтральная) и от знака заряда ловушки относительно захватываемой частицы (имеется ли кулоновское притяжение захватываемой частицы или ее отталкивание). Рассмотрим эти случаи порознь.

При захвате с притяжением сечения захвата очень велики. Этот случай мы имеем, например, при захвате дырок на акцепторные центры Cu^- , Cu^{--} , Au^- и Au^{--} в германии. Сечения захвата для дырок у таких центров при комнатных температурах обычно лежат в пределах $10^{-16} \div 10^{-13}$ см² и увеличиваются при понижении температуры. Измерения интенсивности рекомбинационного излучения показывают, что фотоны уносят только очень малую часть освобождаемой энергии, так что переходы оказываются в основном безызлучательными.

Наблюдаемый порядок величины сечений и их температурную зависимость можно хорошо объяснить в предположении, что энергия передается колебаниям решетки, однако с помощью своеобразного процесса. Дело в том, что энергия, освобождаемая при захвате, обычно лежит в пределах $0,1 \div 1$ эВ. Это заметно превышает максимальную энергию фонона, благодаря чему для высвобождения всей энергии необходимо участие нескольких фононов. Вероятность одновременного их испускания может оказаться небольшой. Как показывают расчеты, таким путем не всегда удается объяснить наблюдаемые величины сечений. Напротив, ряду экспериментальных данных хорошо соответствует предложенный М. Лэксом каскадный механизм захвата, в котором фононы испускаются последовательно во времени и по одному. Рис. 17.2 поясняет этот процесс. В случае притягивающих сил рассматриваемый примесный атом создает, кроме основного, еще и несколько возбужденных уровней (подобно, например, уровням электрона в атоме водорода). Поэтому электрон из зоны может быть сначала захвачен на один из высоких возбужденных уровней, так что освобождаемая энергия может быть унесена

только одним фононом (переход 1). Из этих возбужденных состояний часть электронов выбрасывается обратно в зону (переход 2), но часть из них переходит на более низкие уровни энергии, опять с испусканием только одного фонона (переход 3). Опускаясь таким образом по цепочке возбужденных уровней, электрон попадает на самый глубокий уровень основного состояния. Отметим, что для

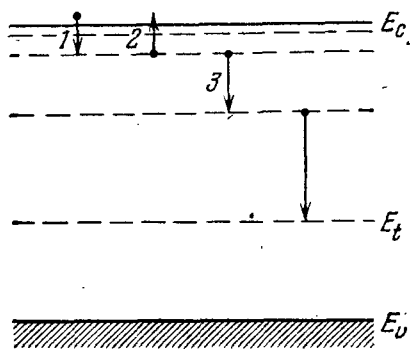


Рис. 17.2. Схема каскадного процесса захвата электрона на притягивающую ловушку.

наиболее глубоких возбужденных уровней однофононные процессы могут быть и невозможны, так как расстояние между уровнями увеличивается по мере возрастания их глубины (см. рис. 17.2). Однако это уже не играет никакой роли, так как, попав на глубокие возбужденные уровни, электрон уже фактически захвачен и в конце концов (хотя, быть может, и с большим временем жизни в возбужденном состоянии) попадает на основной уровень. Из сказанного также видно, что коэффициенты захвата должны увеличиваться

при понижении температуры, так как при этом уменьшается вероятность обратного выброса электронов с возбужденных уровней. Явный вид этой зависимости оказывается степенным. Так, при захвате дырок отрицательно заряженными примесными центрами в германии и кремнии

$$\alpha_p \sim T^{-m}. \quad (9.1)$$

Число m в этой формуле меняется в пределах от ≈ 1 до ≈ 5 в зависимости от природы материала и примеси.

При фононном механизме захвата коэффициенты захвата α_n и α_p не должны зависеть от концентрации электронов и дырок. Опыт показывает, что во многих полупроводниках это действительно так. Однако, когда концентрация электронов n (или, соответственно дырок) становится очень большой, α начинает увеличиваться с возрастанием n приблизительно пропорционально n . Так, например, в германии при комнатных температурах α начинает зависеть от n при $n \gtrsim 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Это показывает, что при больших концентрациях электронов и дырок основным механизмом захвата становится уже не фононный, а ударный. Схема ударного механизма захвата неосновного носителя заряда на ловушку показана на рис. 17.3 для полупроводника n -типа (а) и p -типа (б). Как и раньше, в обоих случаях по вертикали, снизу вверх, отложена полная энергия электрона. В случае а) (захват дырки) электрон переходит с уровня

ловушки E_t на один из пустых уровней вблизи края валентной зоны E_v . Выделяемая при этом энергия, равная приблизительно $(E_t - E_v)$, передается одному из основных носителей — электрону (которых много), и последний возбуждается на более высокий уровень энергии E' в зоне проводимости. В случае б) электрон переходит

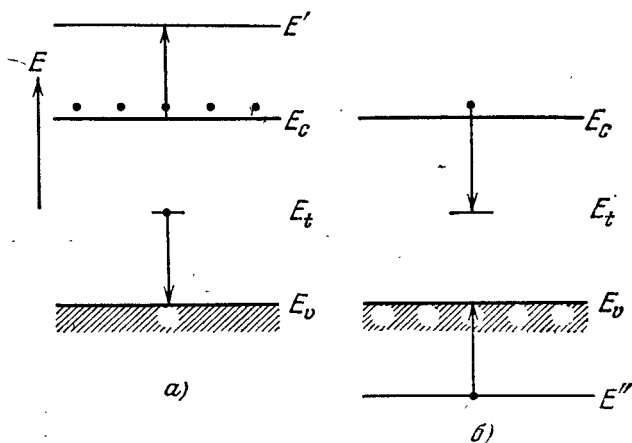


Рис. 17.3. Схема ударного процесса захвата неосновного носителя заряда на ловушку: а) захват дырки в полупроводнике n -типа, б) захват электрона в полупроводнике p -типа.

с одного из уровней вблизи E_c на уровень E_t , а выделяемая энергия $(E_c - E_t)$ расходуется на ускорение свободной дырки, переходящей на уровень E'' .

Процессы захвата имеют другой характер, когда ловушка несет заряд того же знака, что и захватываемая частица. Здесь на больших расстояниях на частицу действует кулоновская сила отталкивания, а на малых расстояниях преобладают более короткодействующие силы притяжения. Поэтому потенциальная энергия частицы в поле ловушки $V(r)$ имеет вид, показанный на рис. 16.6, и, чтобы частица попала в область сил притяжения и была захвачена, она должна преодолеть потенциальный барьер вокруг центра.

Отсюда можно было бы ожидать, что сечения захвата у отталкивающих ловушек будут на много порядков меньше, чем у незаряженных и притягивающих ловушек, и что они должны быстро уменьшаться при понижении температуры (как $\exp(-V_0/kT)$).

Опыт показывает, что сечения захвата притягивающих центров, как правило, действительно больше сечений отталкивающих центров. Однако при сравнении отталкивающих и нейтральных центров оказывается, что в ряде случаев сечения S_n^- и S_n^0 имеют одинаковый порядок величины (здесь нижний индекс указывает, какая частица

захватывается, а верхний индекс — зарядовое состояние центра до захвата). Это наблюдается, например, в германии для атомов Au, Cu и Ni при комнатных температурах. При понижении температуры сечения захвата, как и можно было ожидать, уменьшаются, однако гораздо слабее, чем следует из классических представлений.

Такое сравнительно слабое влияние потенциального барьера объясняется квантовомеханическим туннельным эффектом. Так как толщина потенциального барьера сопоставима с длиной волны электронов, то достигают центра не только те электроны, энергия которых $E > V_0$, но и электроны с меньшими энергиями, $E < V_0$, что ослабляет влияние барьера как на величину сечений захвата, так и на их температурную зависимость. Последняя (в случае захвата электронов отрицательно заряженными атомами золота и меди в германии) удовлетворительно описывается формулой

$$\alpha_n \sim \exp[-(T_0/T)^{1/3}]. \quad (9.2)$$

Здесь

$$T_0 = \frac{27\pi^2 m e^4 Z^2}{2\epsilon^2 \hbar^2 k}, \quad (9.3)$$

Z — заряд отталкивающего центра в единицах e , а эффективная масса $m \simeq 0,2m_0$ (в Ge).

Однако и здесь энергия, освобождаемая при захвате, должна быть отведена от центра, чтобы частица могла остаться на центре.

В случае нейтральных и тем более отталкивающих центров наиболее эффективный каскадный фононный процесс, по-видимому, невозможен, так как нет оснований считать, что такие центры имеют нужный богатый спектр возбужденных уровней. Поэтому остаются в первую очередь многофононный и излучательный процессы. Вероятность многофононного перехода оказывается конечной благодаря отмечавшемуся в § 3 изменению положений равновесия и собственных частот нормальных колебаний при захвате (или обратном выбросе) носителя заряда. Действительно, при этом формулы (XII.5.15a) и (XII.5.15b) уже неприменимы, поскольку функции φ_n , $\varphi_{n'}$ в начальном и конечном состояниях принадлежат разным осцилляторам. Интегралы $\mathcal{F}_{nn'}^{\pm}$ (XII.5.12) оказываются отличными от нуля при любых значениях разности $n - n'$, что и означает возможность испускания (или, при обратном выбросе, поглощения) любого числа фононов. Все же вероятность процесса заметно убывает с увеличением необходимого числа фононов $|n - n'|$ *). По этой причине в зависимости от глубины ловушки и условий опыта главную роль может играть либо фононный, либо излучательный механизм захвата. Если при захвате электрона из зоны проводимости освобождаемая энергия ($E_c - E_t$) может быть унесена неболь-

*) Обзор теории многофононных переходов можно найти в статье [8].

шим числом фононов, то доминирующим процессом может быть безызлучательный фононный захват. Если, напротив, для этого требуется много фононов, то вероятность фононного механизма уменьшается и тогда основным процессом может стать излучательный захват. Так обстоит дело, например, в кремнии при захвате электронов на нейтральные атомы акцепторов III группы (бор, галлий) при низких температурах. Энергетические уровни этих акцепторов расположены вблизи края валентной зоны, и при захвате на них электрона освобождается большая энергия, равная приблизительно ширине запрещенной зоны кремния $E_g \simeq 1$ эВ, которая намного больше максимальной энергии фононов в кремнии. Поэтому такие захваты оказываются главным образом излучательными.