

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ВЕРОЯТНОСТЬ ТЕРМИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА С ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ

В работе получено выражение для вероятности перехода с рекомбинационного центра с учетом электрон-фононного взаимодействия. Показано, что с ростом тепловыделения, которое определяет величину дисперсии форм-функции перехода, вероятность перехода быстро возрастает. Это может приводить к высоким значениям обратного тока полупроводниковых структур, в области пространственного заряда которых содержатся вакансионно-примесные комплексы.

Ключевые слова: глубокие уровни, рекомбинация, электрон-фононного взаимодействия, вероятность перехода, термическая эмиссия.

Теоретические исследования вероятности термической эмиссии носителей заряда с участием квантов колебаний решетки исследовались в работах Тимашова [1, 2], Куджмаускаса [3, 4], Далидчика [5], Пастлера [6], Понса и Макрам-Эбейда [7–9]. Эти работы объединяет тот факт, что вероятность таких процессов в сильных электрических полях экспоненциально возрастает с квадратом напряженности электрического поля. Влияние электрического поля тем сильнее, чем больше величины параметров, характеризующие электрон-фононное взаимодействие, например, тепловыделение. В однокоординатной модели эта величина определяется произведением энергии колебания, участвующего в электронно-колебательных переходах, умноженной на количество фононов, необходимых для термализации.

В данной работе исследуется зависимость вероятности перехода от величины тепловыделения, которое в некоторой степени может характеризовать силу электрон-фононного взаимодействия.

1. Вероятность перехода с учетом электрон-фононного взаимодействия. Вероятность перехода W между невозмущенными состояниями 1 и 2 определяется квадратом абсолютного значения матричного элемента оператора возмущения \hat{H}° , вызывающего переход

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} | \langle 1 | \hat{H}^{\circ} | 2 \rangle |^2 \quad (1)$$

В отсутствие взаимодействия между электронами и решеткой такие процессы могли бы протекать без возмущений состояний осцилляторов. Но такое возмущение становится неизбежным, поскольку при изменении электронного состояния смещаются положения равновесия осцилляторов. Даже если возмущение, вызывающее электронный

переход, не действует непосредственно на нормальные колебания решетки, указанное смещение приводит к испусканию или поглощению фононов. Поэтому матричный элемент таких переходов должен включать в себя как электронные, так и колебательные волновые функции.

Вероятность перехода в первом порядке теории возмущения дается выражением [10]:

$$W = \sum_{n,n'} \rho_{1n} | \langle 1_n | \hat{H}^{\circ} | 2_{n'} \rangle |^2 \delta(E_{2n'} - E_{1n} - E_i) \quad (2)$$

где n и n' нумеруют колебательные состояния основного и возбужденного электронного термина, а ρ_{1n} – вероятность нахождения электрона в колебательном состоянии с индексом n термина 1 [10], которая с учетом распределения Больцмана имеет вид:

$$\rho_{1n} = \exp(-E_{1n}/kT) / \sum_{n \in \mathbb{C}} \exp(-E_{1n}/kT).$$

В адиабатическом приближении квантовомеханический вектор состояния можно записать в виде $| 2_{n'} \rangle = | 2^{\circ} \rangle | 2_{n'}^{\circ} \rangle$, где $| 2^{\circ} \rangle$ – вектор состояния электрона, и $| 2_{n'}^{\circ} \rangle$ – вектор состояния решетки. В первом порядке теории возмущения [11] $| 2^{\circ} \rangle$ не зависит от координаты осциллятора Q , также от Q не зависит и оператор возмущения. Это обычно называют приближением Кондона [11]. Его применимость основана на том, что электронная волновая функция слабо зависит от Q , а начальное и конечное состояния располагаются вблизи минимумов кривых, описывающих энергию колебаний, так что актуальный интервал значений Q мал. Поэтому мы можем разложить матричный элемент на чисто электронную составляющую и чисто колебательную, содержащую только интеграл перекрытия волновых функций осциллятора:

$$W = \sum_{n,n'} \rho_{1n} | \langle 1^{\circ} | \hat{H}^{\circ} | 2^{\circ} \rangle | | \langle 1_n^{\circ} | 2_{n'}^{\circ} \rangle |^2 \delta(E_{2n'} - E_{1n} - E_i) \quad (3)$$

Воспользуемся правилом $\int_{-\infty}^{\infty} F(x)\delta(y-x)dx = F(y)$.
Получаем:

$$w(E_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n,n^0} \rho_{in} |I^e | \hat{H}^0 | 2^e \langle I^e | 1_n^L | 2_{n^0}^L \rangle^2 \delta(E_{2n^0} - E_{1n} - \varepsilon) \delta(\varepsilon - E_i) d\varepsilon =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} |I^e | \hat{H}^0 | 2^e \langle I^e | 1_n^L | 2_{n^0}^L \rangle^2 \delta(E_{2n^0} - E_{1n} - \varepsilon) d\varepsilon =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} W_0(E_i - \varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \quad (4)$$

где $W_0(E_i - \varepsilon)$ – вероятность чисто электронного перехода, а $g(\varepsilon)$ – функция, содержащая информацию о вкладе в вероятность перехода фоновой подсистемы. Покажем, что $g(\varepsilon)$ с точностью до постоянного коэффициента равняется форм-функции оптического перехода $f(h\nu)$:

$$f(h\nu) = \sum_{n,n^0} \rho_{in} |I_n | \hat{M} | 2_{n^0} \rangle^2 \delta(E_{2n^0} - E_{1n} - h\nu) =$$

$$= \sum_{n,n^0} \rho_{in} |I^e | \hat{M} | 2^e \langle I^e | 1_n^L | 2_{n^0}^L \rangle^2 \delta(E_{2n^0} - E_{1n} - h\nu) =$$

$$= |I^e | \hat{M} | 2^e \langle I^e | 1_n^L | 2_{n^0}^L \rangle^2 \delta(E_{2n^0} - E_{1n} - h\nu) =$$

$$= |M_{12}^0(h\nu)|^2 g(h\nu) \quad (5)$$

Таким образом, выражение (4) можно переписать в виде:

$$w(E_i) = \int_{-\infty}^{\infty} W_0(E_i - \varepsilon) \frac{f(\varepsilon)}{|M_{12}^0(\varepsilon)|^2} d\varepsilon \quad (6)$$

В пределах оптической полосы перехода $1 \rightarrow 2$ матричный элемент дипольного взаимодействия можно считать независимым от энергии [12], следовательно:

$$w(E_i) = \int_{-\infty}^{\infty} W_0(E_i - \varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (7)$$

здесь матричный элемент дипольного взаимодействия входит в нормировочный коэффициент $f(\varepsilon)$.

Теперь рассмотрим случай, когда энергетический спектр состоит из двух групп близких уровней $(1_i, 2_j)$, разделенных большой энергетической щелью. Предположим, что время релаксации внутри группы 1 значительно меньше времени жизни по отношению к переходам $1 \rightarrow 2$. Тогда согласно [30] выражение для вероятности квантовомеханического перехода с учетом электрон-фононного взаимодействия в общем виде может быть записано в виде:

$$W = \sum_{i,j} \int_{-\infty}^{\infty} W_{0i,j}(E_{ii,j} - \varepsilon) f_{i,j}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (8)$$

где $W_{0i,j}(E_{ii,j} - \varepsilon)$ – вероятность чисто электронного перехода с i -подуровня мультиплета исходного состояния центра, на j -подуровень конечного состояния мультиплета, а $f_{i,j}(\varepsilon)$ – выраже-

ние для форм-функции оптического перехода с i – подуровня мультиплета исходного состояния центра на j -подуровень конечного состояния мультиплета, $\sum_{i,j}$ – суммирование по всем подуровням мультиплетов.

Таким образом, получено общее выражение, которое позволяет вычислять полевые и температурные зависимости вероятностей электронно-колебательных переходов, при условии, что известна форм-функция оптического перехода.

2. Моделирование вероятности термического перехода. При средних электрических полях эмиссия электронов с центров рекомбинации ускоряется за счет эффекта Френкеля, связанного с понижением потенциального барьера рекомбинационного центра в электрическом поле. В этом случае скорость эмиссии может быть представлена в виде [13]:

$$e_n^t = r_n c_n N_c \exp[-(E_i - \gamma F^{1/2})/kT] \quad (9)$$

$e_n^t(x)$ – скорости термической эмиссии электронов и дырок; c_n – коэффициенты захвата электронов и дырок на центры рекомбинации; r_n – факторы вырождения уровня глубокого центра для электронов и дырок, данные факторы изменяются в пределах от 0.5 до 2. N_c – эффективная плотность состояний в зоне проводимости и валентной зоне; E_i – энергетическое положение центра рекомбинации в запрещенной зоне относительно зоны проводимости; E_c – энергии зоны проводимости и валентной зоны; k – постоянная Больцмана; T – температура p - n -перехода.

В случае, когда электрон-фононное взаимодействие обусловлено локальным или квазилокальным колебанием, слабо связанным с колебаниями основной решетки, в качестве форм-функции можно использовать формулу Гаусса. Это может иметь место для вакансионно-примесных комплексах в полупроводниках. Данные комплексы представляют квазимолекулу в полупроводниковой матрице. Квазилокальное колебание является характеристическим для такого комплекса. В этом случае вероятность перехода (8) примет вид:

$$W = \frac{r_n c_n N_c}{\sigma \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-(\varepsilon - \gamma F^{1/2})/kT] \exp\left[-\frac{(E_i - \varepsilon)^2}{2\sigma^2}\right] d\varepsilon \quad (10)$$

где $\sigma = \sqrt{S \hbar \omega kT}$; S – фактор Хуанга и Рис, показывающий количество фононов, участвующих в тепловыделении; $\hbar \omega$ – энергия фонона локального колебания.

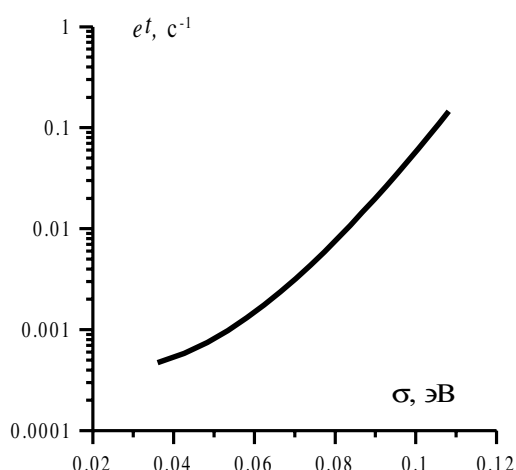


Рисунок 1. Зависимость величины вероятности перехода от дисперсии форм-функции

Результаты расчета вероятности перехода от величины тепловыделения приведены на рисунке 1. С ростом величины тепловыделения вероятность перехода возрастает экспоненциально. Величина обратных токов в первом приближении пропорциональна вероятности перехода с рекомбинационного центра в разрешенные для проводимости зоны. В связи с этим, приборов, содержащих рекомбинационные центры, у которых достаточно сильно влияние электрон-фононного взаимодействия, величина обратных токов будет выше. Это снижает эффективность фотоприемников, а также допустимую мощность преобразования силовыми полупроводниковыми приборами. Поэтому важна не только концентрация рекомбинационных центров в области пространственного заряда таких приборов, но и их природа. Крайне нежелательно присутствие вакансионно-примесных комплексов, на ионизацию которых существенную роль оказывает электрон-фононное взаимодействие.

7.03.2014

Список литературы:

1. Тимашов, С.Ф. О термическом поглощении в сильном электрическом поле ниже края поглощения / С.Ф. Тимашов // ФТТ. 1972. – Т.14. – С. 2621.
2. Тимашов, С.Ф. О термической ионизации глубоких центров в слое объемного заряда в полупроводниках / С.Ф. Тимашов // ФТТ, 1972. – Т.14. – с.171.
3. Куджмаускас, Ш.П. Теория туннелирования электронов из глубоких примесных уровней в зону проводимости в сильных электрических полях с учетом многофононных процессов / Ш.П. Куджмаускас // Лит. Физ. Сб., 1976. – №4. – Т. 19. – С. 459.
4. Kiveris A., Kudzmauskas S., Pipynys P. Release of electrons from trap by an a electric field with phonon participation // Phys. Stat. Sol., 1976, v.37, p.321.
5. Далидчик, Ф.И. Многофононные туннельные процессы в однородном электрическом поле / Ф.И. Далидчик // ЖЭТФ, 1978. – Т. 74. – В. 2. – С.472.
6. Passler R. Temperature dependences of the nonradiative multiphonon carrier-capture and injection properties of deep trap in semiconductors // Phys. Stat. Sol., 1978, v.85, p.203.
7. Pons D., Makram-Ebeid S. Phonon assisted tunnel emission of electrons from deep levels in GaAs. // J.Phis. (France)/ 1979, v.40, No 12, p. 1168.
8. Makram-Ebeid S. Effect of electric field on deep-level transients in GaAs and GaP // Appl. Phys. Lett., 1980, v.37, No 5, p.464.
9. Makram-Ebeid S., Lannoo M. Quantum model for phonon assisted tunnel ionization of deep levels in semiconductors // Phys. Rev., 1982, v.25, No 10, p. 6406.
10. Makram-Ebeid S., Lannoo M. Electric-field-induced phonon-assisted tunnel ionization from deep levels in semiconductors // Phys. Rev. Lett., 1982, v.48, No 18, p. 1281.
11. Берсукер, И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений / И.Б. Берсукер. – Издательство «Химия», Ленинградское отделение, 1976. – 350с.
12. Перлин, Ю.Е., Эффекты электронно-колебательного взаимодействия в оптических спектрах примесных парамагнитных ионов / Ю.Е. Перлин // УФН, 1963. – Т. 80. – В. 4. – с.553.
13. Булярский, С.В. Генерационно-рекомбинационные процессы в активных элементах / С.В. Булярский, Н.С. Грушко. – М.: МГУ, 1997. – 462 с.

Сведения об авторах:

Булярский С.В., заведующий кафедрой инженерной физики Ульяновского государственного университета, заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор,
e-mail: bulyar2954@mail.ru

Жуков А.В., заместитель проректора по научной работе Ульяновского государственного университета, доцент кафедры инженерной физики, кандидат физико-математических наук, доцент
e-mail: zhukovav@ulsu.ru

Игошина А.А., студентка инженерно-физического факультета высоких технологий Ульяновского государственного университета
432000, г. Ульяновск, ул. Л.Толстого 42