Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1971

УДК 539.293

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧ

К ТЕОРИИ ЗАХВАТА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА ГЛУБОКИМИ ЛОВУШКАМИ В ГОМЕОПОЛЯРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ. ЗАХВАТ ГОРЯЧИХ ЭЛЕКТРОНОВ

В рамках обобщенной модели Луковского вычислены коэффициенты многофононного захвата носителей заряда глубокими нейтральными и одноименно заряженными ловушками в условиях нагрева электронного газа постоянным и однородным электрическим полем.

Рассмотрены случаи, когда справедливо приближение электронной температуры и когда функция распределения носителей заряда по энергиям дается формулой Б. И. Давыдова, обобщенной на предмет учета примесного рассеяния. В этих условиях получены явные выражения для температурной и полевой зависимости коэффициентов захвата.

§ 1. Введение. Исходные формулы

В предыдущей работе [1] было показано, что теорию безызлучательного захвата нейтральными и одноименно заряженными глубокими ловушками можно построить в рамках довольно простой полуфеноменологической модели: ловушка рассматривается как точечный силовой центр с дельтаобразным потенциалом притяжения и кулоновским потенциалом отталкивания [1]. При этом из опыта берется лишь один параметр, характеризующий данную ловушку,— глубина соответствующего уровня, после чего коэффициенты захвата вычисляются явно в зависимости от температуры, и от параметров материала. Расчет, выполненный в [1], был ограничен случаем термодинамически равновесного распределения носителей заряда по энергиям. В настоящей работе он обобщается на случай нагретых носителей заряда, функция распределения которых по энергиям отличается от фермиевской. Мы рассматриваем пространственно однородную систему: нагрев носителей вызывается постоянным и однородным электрическим полем, которое ответственно и за протекание тока через образец.

Основной интерес представляют температурная и полевая зависимости коэффициентов захвата, особенно — коэффициентов захвата носителей одноименно заряженными центрами. При этом скорость захвата относительно невелика; соответственно мы вправе — хотя бы для ориентировки — пренебречь, возмущением фононной функции распре-

[1] Как отмечалось в [1], это есть обобщение модели, предложенной в [2], на случай безызлучательных переходов при наличии кулоновского поля.

деления, считая ее равновесной. Далее, напряженность электрического поля обычно такова, что непосредственным его воздействием на волновые функции носителей заряда (как локализованных, так и свободных) можно пренебречь. Таким образом, роль внешнего электрического поля в рассматриваемой задаче состоит лишь в изменении вида функции распределения носителей заряда по энергиям $f(W)$. Во всем остальном задача не отличается от рассмотренной в [1], и мы можем непосредственно воспользоваться вычисленными там волновыми функциями и матричными элементами.

Будем для определенности рассматривать захват электронов. Коэффициент захвата c_n дается формулой (14) из [1]:

$$c_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \int d\vec{p}\, f(W)\, W_{p\lambda}\, p^{-1}. \tag{1}$$

Здесь m и $\vec{p}$ — эффективная масса и квазиимпульс захватываемого носителя, энергия которого есть W, функция $f(W)$ нормирована на единицу, $|\lambda|$ — энергия ионизации рассматриваемой ловушки. Величина $W_{p\lambda}$ пропорциональна вероятности захвата носителя с данным квазиимпульсом. Согласно [1] в случае нейтральной ловушки имеем

$$W_{p\lambda} = \frac{\sqrt{3\pi}\, E_1}{2\hbar|\lambda|\sqrt{2}} \left(\frac{mW}{M\hbar\omega_m}\right)^{1/2} \frac{\exp\left\{-\frac{(|\lambda| + W - a_\lambda)^2}{\delta^2}\right\}}{1+\varphi}, \tag{2}$$

где M — масса элементарной ячейки, $\omega_m = \frac{T_D}{\hbar}$ — предельная частота дебаевского фонона, E_1 — константа потенциала деформации, T — температура решетки в энергетических единицах;

$$a_\lambda = \frac{3\pi^2}{2} \frac{m|\lambda| E_1^2}{M(\hbar\omega_m)^2},\quad \delta^2 = \frac{3\pi^2}{2} \cdot \frac{m|\lambda|E_1^2}{M\hbar\omega_m}[1+\varphi(T)], \tag{3}$$

$$\varphi(T) = \left(\frac{4T}{\pi\hbar\omega_m}\right)^2 \int_0^{x_m} \frac{x\,dx}{e^x - 1}\left[\arcsin\frac{x}{\sqrt{x^2 + T_1^2/T^2}}\right]^2, \tag{4}$$

$x_m = \frac{T_D}{T}$, $T_1 = \sqrt{8ms^2|\lambda|}$, s — скорость звука в данном веществе.

В случае заряженной ловушки формула (23) работы [1] имеет вид

$$W_{p\lambda} = \frac{13{,}5\,\pi\sqrt{1+\varphi_c}\, E_1 W_B}{\hbar\lambda^2}\left(\frac{\hbar\omega_m}{Ms^2}\right)^{1/2} \frac{\exp\left\{-\frac{(|\lambda|+W-a_\lambda)^2}{\delta^2}\right\}}{\left[\exp\left(2\pi\sqrt{\frac{W_a}{W}}\right)-1\right]\left(1+\frac{W}{|\lambda|}\right)^2}. \tag{5}$$

Здесь $W_B = \frac{mZ^2 e^4}{2\varepsilon^2\hbar^2}$ — боровская энергия, Z — заряд ловушки в единицах $|e|$ ($Z > 0$), e — заряд электрона, ε — диэлектрическая проницаемость вещества,

$$a_\lambda = 0{,}07\,\frac{E_1^2}{Ms^2},\quad \delta^2 = 0{,}11\,\frac{\hbar\omega_m E_1^2}{Ms^2}[1+\varphi_c(T)], \tag{6}$$

$$\varphi_c = 8\left(\frac{T}{T_D}\right)^4 \int\limits_0^{x_m} \frac{x^3\,dx}{e^x - 1}. \tag{7}$$

Условия применимости формул (4) и (15) указаны в [1]. Они фактически выполняются, например, в опытах с n—Ge, легированным золотом или медью ($Z=2$, $W_b=0{,}04$ *эв*, $|\lambda|=0{,}04$ *эв* или $0{,}26$ *эв*).

§ 2. Функция распределения

Задача о влиянии внешнего поля на коэффициенты захвата проще всего решается в условиях, когда неравновесная функция распределения $f(W)$ имеет максвелловский вид с заменой температуры решетки T на электронную температуру T_e[1]. При этом формально остаются в силе все результаты [1] — следует лишь заменить в функции f (но отнюдь не в φ и не в φ_c !) аргумент T на T_e.

В ряде случаев, однако, приближение электронной температуры оказывается несправедливым. Как известно, в частности, так обстоит дело в условиях опытов [5—7]. Ориентируясь на эти исследования, мы будем рассматривать случай не слишком высоких температур и не слишком сильных греющих полей, когда выполняются неравенства:

$$T \ll \hbar\,\omega_0,\quad E < \bar{E},\quad \frac{eEv_0\,\tau_0}{\hbar\,\omega_0} \ll 1. \tag{8}$$

Здесь ω_0 — предельная частота оптического фонона[2], $v_0=\sqrt{\dfrac{2\hbar\,\omega_0}{m}}$ — скорость электрона, энергия которого равна $\hbar\omega_0$, τ_0 — характерное время испускания оптического фонона электроном, разогнанным до энергии $\hbar\omega_0$. В рамках принятой нами изотропной модели (4)

$$\tau_0 = \frac{\pi\sqrt{2}\;\hbar^2\rho\sqrt{\hbar\,\omega_0}}{D^2\,m^{3/2}}, \tag{9}$$

где ρ — плотность кристалла, D — параметр оптического потенциала деформации (порядка $2\cdot10^9$ *эв/см*). Наконец,

$$\bar{E} = \frac{\hbar\,\omega_0\,mV_0}{8\pi W_B\,Ma_B^3}\left(\frac{T}{ms^2}\right)^{1/2}\left(\frac{E_1}{W_B}\right)^2\frac{W_B}{ea_B},\quad a_B = \frac{\varepsilon\hbar^2}{Zme^2}. \tag{10}$$

Первое из условий (8) исключает появление «тепловых» оптических фононов, позволяя тем самым ввести представление о «пассивной» и «активной» областях энергии электрона [8]. Второе условие исключает возможность ухода свободных носителей заряда далеко в активную область (8), третье — не позволяет пренебречь рассеянием энергии (и тем более рассеянием импульса) в пассивной области (в рассматриваемых условиях рассеяние энергии и импульса в пассивной области происходит соответственно на акустических фононах и на тех же фононах и на заряженной примеси).

---

[1] Расчет электронной температуры как функции напряженности поля E неоднократно выполнялся разными авторами. Сводку результатов можно найти в [4].

[2] Условия типа (8) позволяют также исключить из рассмотрения взаимодействие свободных носителей заряда с фононами любой ветви, ответственными за междолинные переходы в полупроводниках типа германия (при этом под $\hbar\omega_0$ следует понимать энергию таких фононов). В сущности это и оправдывает принятую нами изотропную аппроксимацию.

По порядку величины мы имеем: $\hbar\omega_0=0{,}04$ *эв*, $V_0=10^{-22}$ *см*^{3}, $\rho=\dfrac{M}{V_0}=8$ *г/см*^{3}. Соответственно, $\bar{E}\simeq 4\cdot 10^3\left(\dfrac{T\,^0\mathrm{K}}{3000}\right)^{1/2}$ *в/см*, и первое и второе условия (8) можно переписать в виде: $T\ll 460°$K и $E\ll 4\cdot 10^3$ *в/см*.

В указанных условиях функцию распределения носителей заряда по энергиям легко найти методом Б. И. Давыдова (9).

Результат (получавшийся, по-видимому, многими авторами) имеет вид:

$$f(W)=B\exp\{-x+U(x)\}, \tag{11}$$

где B — нормировочный множитель,

$$U(x)=\frac{\alpha}{2}\ln(x^2+\alpha x+\beta)+\frac{\alpha^2}{2\sqrt{\alpha^2-4\beta}}\ln\left(\frac{\alpha+2x+\sqrt{\alpha^2-4\beta}}{\alpha+2x-\sqrt{\alpha^2-4\beta}}\right), \tag{12}$$

$$\alpha=\frac{3\pi}{16}\left(\frac{E\mu_L}{s}\right)^2,\quad \beta=6\,\frac{\mu_L}{\mu_i},\quad x=\frac{W}{T}, \tag{13}$$

μ_L и μ_i — значения подвижностей в слабом поле при наличии соответственно только акустического и только примесного рассеяния. Для электронов в германии

$$\mu_L\simeq 3{,}8\cdot 10^3\left(\frac{300}{T^0K}\right)^{3/2}\frac{\textit{см}^2}{\textit{в}\cdot\textit{сек}},\quad \mu_i=1{,}0\cdot 10^6\left(\frac{T^0K}{300}\right)^{3/2}\frac{10^{15}}{N}\,\frac{\textit{см}^2}{\textit{в}\cdot\textit{сек}}, \tag{14}$$

где $N=\sum\limits_i Z_i^2N_i$ есть эффективная концентрация заряженной примеси. Здесь индекс i нумерует типы примеси, N_i и Z_i суть соответственно концентрация и заряд (в единицах $|e|$) примесного атома данного типа.

Формула (11) справедлива в предположении, что $\alpha^2>4\beta$, которое в интересующих нас условиях всегда выполняется.

Подставляя (14) в (13) и полагая $s=5\cdot 10^5$ *см/сек*, находим

$$\alpha\simeq 2\cdot 10^2\left(\frac{75}{T}\right)^3\left(\frac{E}{300}\right)^2,\quad \beta=1{,}46\left(\frac{75}{T}\right)^3\frac{N}{10^{15}}. \tag{15}$$

Здесь, как и в аналогичных случаях в дальнейшем, величины N, E и T выражены соответственно в *см*$^{-3}$, *в/см* и °K.

§ 3. Коэффициенты захвата

В условиях применимости максвелловской функции распределения с электронной температурой T_e расчет легко выполняется на основании результатов (1). В случае нейтральной ловушки мы получаем

$$c_n=\frac{\pi^2\sqrt{3}\,\hbar^2}{(mT_e)^{3/2}}\left(\frac{m}{M}\right)^{1/2}\frac{E_1\,\delta^{3/2}(1+\varphi)}{|\lambda|\,(\hbar\omega_m)^{1/2}}\,\frac{a^{3/2}}{16}\,e^{-\sigma+a^2/8}\times$$
$$\times\left\{K_{3/4}\left(\frac{a^2}{8}\right)-\left(\frac{3}{4}+\frac{2}{a^2}\right)K_{1/4}\left(\frac{a^2}{8}\right)\right\}. \tag{16}$$

Здесь

$$a=2\,\frac{|\lambda|-a_\lambda}{\delta}+\frac{\delta}{T_e},\quad \sigma=\frac{(|\lambda|-a_\lambda)^2}{\delta^2}, \tag{17}$$

a_λ и δ даются формулами (3), $K_{3/4}$ и $K_{1/4}$ — функции Макдональда (явное выражение для c_n, приведенное в [1] (формула (22) справедлива асимптотически при $a \gg 1$).

Для заряженной примеси в этих же условиях находим

$$c_n = \frac{108\,\pi^4\,\hbar^2 E_1 W_B T_e^*}{\lambda^2 (2\pi m T_e)^{3/2}} \left(\frac{\hbar\omega_m}{Ms^2}\right)^{1/2} \sqrt{1+\varphi_c(T)}\; e^{-\sigma} I, \tag{18}$$

где

$$T_e^* = \frac{T_e W_c}{T_e + W_c},\quad W_c = \frac{\delta^2}{2(|\lambda| - a_\lambda)},\quad \sigma = \frac{(|\lambda| - a_\lambda)^2}{\delta^2}, \tag{19}$$

a_λ и δ даются формулами (6), I — интеграл, табулированный в [1] формула 25. Теперь он зависит от параметра $2\pi\left(\frac{W_B}{T_e^*}\right)^{1/2}$.

В условиях (11) формулы (1) и (5) дают

$$c_n = \frac{108\,\pi^4 \sqrt{1+\varphi_c}\, E_1 W_B T}{\hbar\lambda^2} \left(\frac{\hbar\omega_m}{Ms^2}\right)^{1/2} e^{-\sigma} \times$$

$$\times \int_0^\infty dx \exp\left\{-x + U(x) - \frac{T}{W_c}x - \frac{T^2}{\delta^2}x^2\right\} \times$$

$$\times \left[\exp(\gamma x^{-1/2}) - 1\right]^{-1} \left(1 + \frac{T}{|\lambda|}\right)^{-2}, \tag{20}$$

где δ, W_c и σ даются формулами (6) и (19),

$$\gamma = 2\pi\left(\frac{W_B}{T}\right)^{1/2} \cong 15{,}6\left(\frac{75}{T}\right)^{1/2} \tag{21}$$

(последняя оценка дана для случая $W_B = 0{,}04$ *эв*, что в германии отвечает значению $Z=2$).

В нескольких предельных случаях интеграл в (20) можно вычислить аналитически [1].

Случай слабого поля и малой концентрации примеси:

$$\left(\frac{\gamma}{2}\right)^{2/3} \gg \alpha,\ \beta. \tag{22}$$

При этом

$$F \equiv \frac{c_n(E)}{c_n(0)} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{(\gamma/2)^{2\alpha/3}}{\Gamma(\alpha + 3/2)}, \tag{23}$$

где Γ — гамма-функция. В частности, при $\alpha \ll 1$ это дает

$$F = 1 + \left[0{,}72 + \frac{1}{3}\ln\left(\frac{W_B}{T}\right)\right]\alpha. \tag{23'}$$

Случай низких температур и не слишком слабого поля:

$$\beta \ll \alpha \ll \left(\frac{\gamma}{2}\right)^{2/3} \left(\frac{W_c}{T}\right)^{5/3} \text{ и } \alpha \gg 1. \tag{24}$$

---

[1] Мы будем вычислять не само выражение (20), а отношение $\frac{c_n(E)}{c_n(0)} \equiv F(E)$. Именно оно представляет наибольший интерес для ряда приложений.

Тогда

$$F \simeq \frac{T}{(T^*)^{5/6} W_B^{1/6} \alpha^{1/4}} \exp\left\{-\frac{2,5\,\pi^{4/5}}{\alpha^{1/5}}\left(\frac{W_B}{T}\right)^{2/5} - \right.$$

$$\left. - \frac{T}{W_c}\alpha^{2/5} + \left(\frac{T_0}{T^*}\right)^{1/3}\right\}, \tag{25}$$

где, как и в [1],

$$T^* = T\,W_c\,(T + W_c)^{-1},\; T_0 = 27\pi^2 W_B.$$

Случай достаточно сильного поля и достаточно **глубокой ловушки.** Пусть

$$\left(\frac{W_c}{\delta}\right)^2 + \frac{1}{2\alpha}\left(\frac{W_c}{T}\right)^2 \ll 1, \quad W_c^2 \ll (2\pi)^2 W_B^2, \tag{26}$$

$$\alpha\frac{W_c}{T} \gg \beta, \quad \alpha \gg \frac{W_c}{T}.$$

Тогда

$$U(x) \simeq x - \frac{x^2}{2\alpha} - \frac{\beta}{\alpha}\ln \alpha x + \text{const}$$

и для отношения коэффициентов захвата легко находим

$$F = \frac{\sqrt{\pi}\left(\frac{W_c}{T} + 1\right)^{5/6}}{4\cdot 2^{1/3}(2\alpha)^{\frac{3}{4}-\frac{\beta}{2\alpha}}\,\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{\beta}{2\alpha}\right)} \exp\left\{-\frac{\beta}{\alpha}\ln\left(\frac{\pi W_c W_B^{1/2}}{T^{3/2}}\right) - \right.$$

$$\left. - \frac{3}{2}\left(2\pi^2\frac{W_B}{W_c}\right)^{1/3} + \left(\frac{T_0}{T^*}\right)^{1/3}\right\}. \tag{27}$$

Неравенства (26) реализуются, по-видимому, в случае захвата электронов атомами двукратно отрицательно заряженной меди в германии.

Заметим, что при сравнении теории с опытом удобно выражать экспериментальные данные именно в зависимости от параметров α, β и γ, ибо температура входит во все эти три параметра. Согласно (23), (25) и (27) имеет место своего рода закон подобия: вариации температуры, напряженности поля и глубины ловушки при неизменных параметрах α, β и γ не изменяют отношения сечений захвата.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., **12**, № 5, 1971.
2. Lucovsky G. Solid state Commun., **3**, 299, 1965.
3. Майер Дж., Гепперт-Майер М. Статистическая механика. М., ИЛ, 1952, стр. 248.
4. Конвелл Э. М. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях. М., «Мир», 1970.
5. Жданова М. Г., Алексеева В. Г. «Физика твердого тела», **5**, 546, 1963.
6. Жданова Н. Г., Калашников С. Г. «Физика твердого тела», **6**, 440, 1964.
7. Алексеева В. Г., Жданова Н. Г., Каган М. С., Калашников С. Г., Ландсберг Е. Г. «Физика и техника полупроводников», **3**, 1410, 1969.
8. Восилюс И. И., Левинсон И. Б. ЖЭТФ, **50**, 1661, 1966.
9. Давыдов Б. И. ЖЭТФ, **7**, 1062, 1937.

Поступила в редакцию
4.5 1970 г.

Кафедра
полупроводников