

**Неравновесная населенность и релаксация по
состояниям мелких примесей в
полупроводниках**

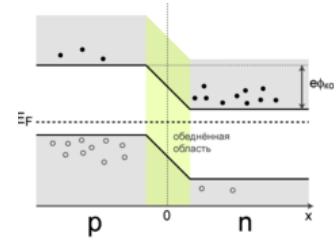
Е .Е. Орлова

Содержание

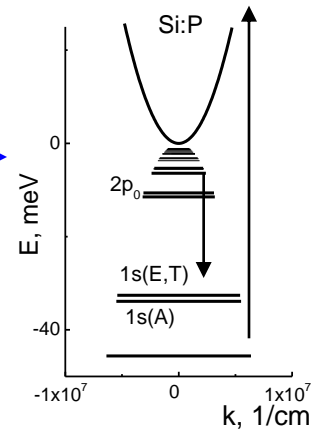
1. Почему интересны мелкие примесные центры в полупроводниках
2. Особенности спектра состояний мелких примесных центров
3. Равновесная населенность примесных состояний
4. Расчет неравновесной населенности примесных состояний
5. Каскадный захват при взаимодействии с акустическими фононами
6. Взаимодействие с междолинными и оптическими фононами
7. Особенности взаимодействия с свободными носителями заряда

Почему интересны мелкие примесные центры в полупроводниках

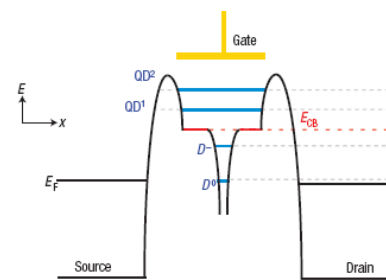
- Определяют тип и величину проводимости в полупроводниковых приборах



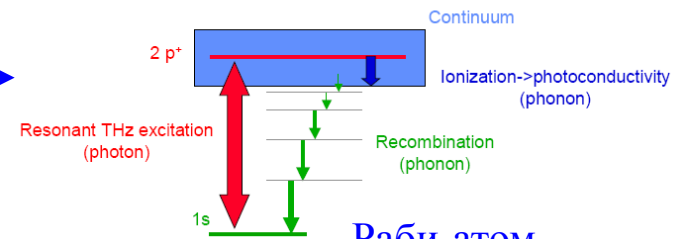
- Источники и детекторы терагерцового излучения на переходах мелких примесей



- Элементы памяти на базе отдельных примесных центров

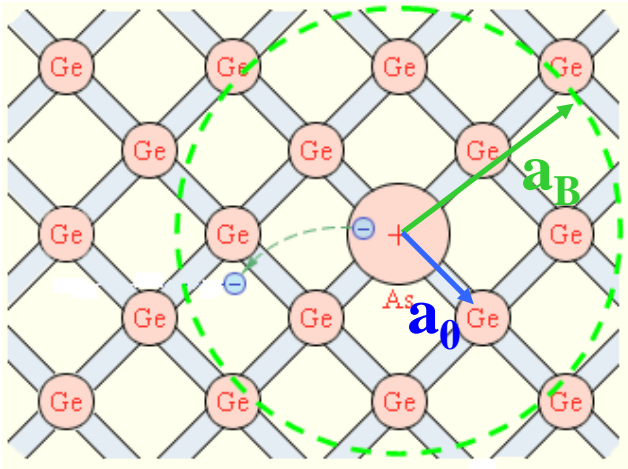


- Аналог свободных атомов – более плотная упаковка, большой матричный элемент оптических переходов позволяют изучать эффекты взаимодействия электронов с сильным излучением



Раби-атом -
донор в GaAs

Состояния мелких примесных центров



\mathbf{a}_B - Боровский радиус,

\mathbf{a}_0 - постоянная кристаллической решетки

$$\mathbf{a}_B \gg \mathbf{a}_0$$

↓
Приближение
эффективных масс

C. Kittel and A. Mitchell, Phys.Rev. 96, 1488 (1954).

$$\{T_j(-i\nabla) + V(\mathbf{r})\}\Phi_j(\mathbf{r}) = E\Phi_j(\mathbf{r}),$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_j C_j \Phi_j(\mathbf{r}) \psi_{n,j}(\mathbf{r})$$

$T_j(\mathbf{k})$ - определяется законом дисперсии
вблизи дна долины j

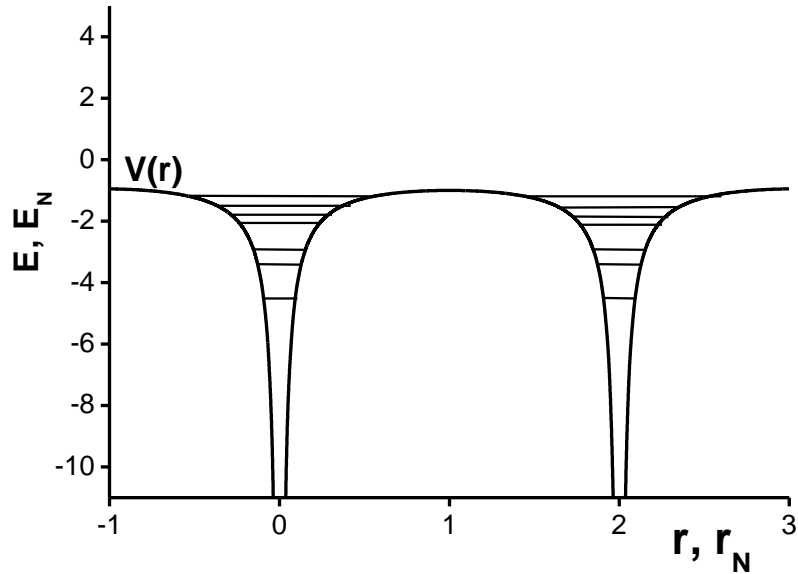
Блоховская волновая функция дна
долины j зоны n

В простой зоне с
изотропным законом
дисперсии:

$$E_n = E_B n^{-2}$$

$$E_B = \frac{e^4 m^*}{2\epsilon^2 \hbar^2}$$

Плотность состояний мелких примесных центров



$$\rho \sim E^{1/2}$$

$$\rho \sim |E|^{-5/2}$$

Схема уровней и потенциал кулоновских центров, $E_N = (4 N^+ / 3\pi) 1/3 e^2 / \epsilon$

N^+ - концентрация центров, r_N - среднее расстояние между центрами.

Плотность состояний: ρ_c - континуума с параболическим законом дисперсии,

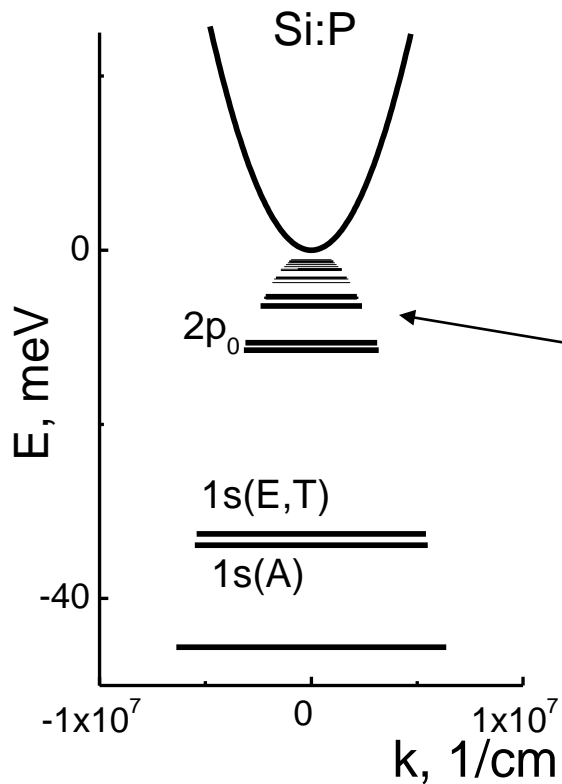
ρ_{loc} - локализованных состояний изолированного кулоновского центра,

ρ - средняя плотность состояний кулоновских центров с концентрацией N^+ .

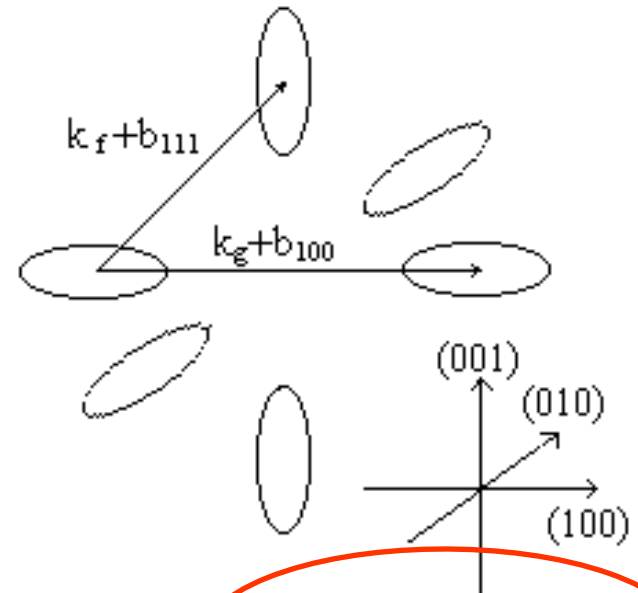
Волновые функции примесных состояний

C. Kittel and A. Mitchell, *Phys.Rev.* 96, 1488 (1954).

W. Kohn, J. M. Luttinger, *Phys.Rev.* 98, 915 (1955).



$$dK_j \sim |E|^{-1/2}$$



Волновой вектор j долины

$$\phi_f(\mathbf{r}) = \sum_{j=1} C_{f,j} u_j(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{r}} \Phi_{f,j}(\mathbf{r})$$

Огибающая

Равновесная населенность примесных состояний

Вероятность найти систему в состоянии с числом частиц n и энергией E пропорциональна Фактору Гиббса

(μ – химический потенциал T – температура) $\exp\left(\frac{n\mu - E}{T}\right)$

Статистическая сумма охватывает все возбужденные состояния, поскольку их заполнение не является независимым – не более одного связанного носителя заряда на центре:

$$Z = \sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T}\right) + 1 \longrightarrow F_i = \frac{\exp\left(\frac{\mu - E_i}{T}\right)}{\sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T}\right) + 1}$$

На границе зоны – скачок вероятности заполнения состояний:

$$\frac{F(E=0)}{F_i} = \frac{\sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T}\right) + 1}{\exp\left(\frac{\mu}{T}\right) + 1}$$

Этот скачок не приводит к возникновению усиления/поглощения, компенсируется таим же скачком числа свободных конечных состояний

$$\alpha_{k \rightarrow i} = \sigma_{i \rightarrow k} \left\{ F(E) N^+ - F_i N_I (1 - F(E)) \right\}$$

$$N^+ = N_I \left(1 - \sum_j F_j \right) = \frac{N_I}{1 + \sum_j \exp\left(\frac{\mu - E_j}{T}\right)} \quad F(E)/(1 - F(E)) = F_i N_I / N^+$$

Неравновесная населенность примесных состояний

Система уравнений баланса числа частиц на примесных уровнях

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \sum_{l \neq i} n_l W_{l,i} - n_i \sum_{l \neq i} W_{i,l}$$

+ Уравнение Больцмана для свободных носителей + Уравнение сохранения числа частиц = полная система

W_{ij} - Основные релаксационные процессы

Взаимодействие с фотонами

Соударения с свободными носителями (Оже)

Взаимодействие с фононами

Проблема: сколько возбужденных состояний следует учитывать?

Система уравнений для вероятностей маршрутов по примесным уровням

$$P_{i,j,k} = \frac{W_{i,j} + \sum_{l \neq i,j,k} W_{i,l} P_{l,j,k}}{\sum_l W_{i,l}}$$

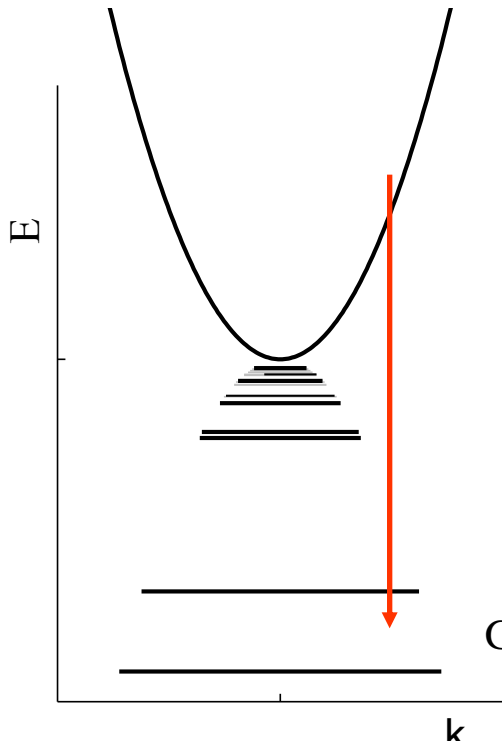
$P_{i,j,k}$ – вероятность, что носитель заряда с уровня i попадет на уровень j до того, как он достигнет уровня k .

Система эквивалентна стационарной системе уравнений баланса, но дает критерий для ограничения числа уравнений для заданной точности n_k

$$\frac{n_k}{n_j} = \frac{\bar{W}_{j,k}}{\bar{W}_{k,j}}$$

$$\bar{W}_{j,k} = W_{j,k} + \sum_{i \neq k,j} W_{j,i} P_{i,k,j}$$

История вопроса: Прямая рекомбинация



Одноквантовые и многоквантовые переходы при излучении акустических фононов

H. Gummel, M. Lax, Annals of physics 2, 28 (1957).

Прямая оптическая и Оже рекомбинация

N. Sclar and E. Burstein, Phys. Rev. 98, 1757 (1955):

«Сравнение с экспериментальными данными показывает, что ни один из рассмотренных механизмов не может объяснить наблюдаемые экспериментально постоянные времена»

TABLE II. Comparison of theoretical and experimental time constants.

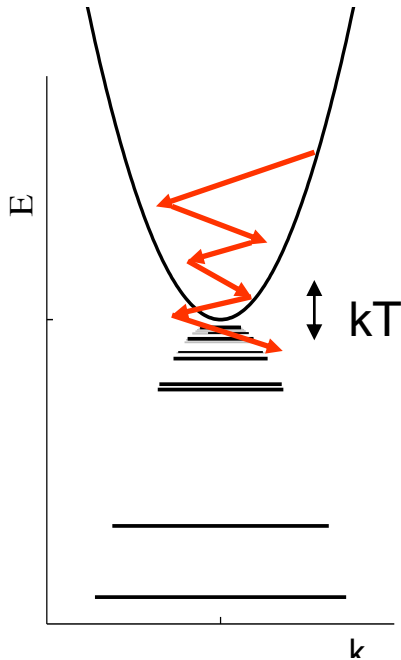
Specimen No.	Concentration of photoconductive centers $N - N_e$ (cm ⁻³)	Concentration of compensated centers N_e (cm ⁻³)	Conc. of free charge carriers in the presence of background radiation ^a n (cm ⁻³)	τ (theoretical) (sec)	τ (experimental) (sec)
Ge 132	4×10^{15} (<i>p</i>)	$10^{13} - 10^{15}$	2×10^{10}	$10^{-6} - 10^{-8}$	5×10^{-11}
Si I-123 ^b	2×10^{17} (<i>p</i>)	$10^{15} - 10^{17}$	6×10^7	$10^{-7} - 10^{-9}$	2×10^{-12}
Si I-103 ^b	4×10^{16} (<i>n</i>)	$10^{14} - 10^{15}$	1×10^8	$10^{-6} - 10^{-7}$	5×10^{-9}
Si (R and S) ^c	2×10^{16} (<i>p</i>)	10^{16}	5×10^8	4×10^{-8}	5×10^{-11}

^a Estimated by assuming mobility of 10^4 cm²/volt sec for the germanium at 4.2°K and 10^3 cm²/volt sec for the silicon.

^b Burstein, Oberly, and Davisson, Naval Research Laboratory Report No. 3880, 1952 (unpublished).

^c Data of Rollin and Simmons (reference 2) carried out at 20°K.

Каскадный захват



M. Lax, Phys.Rev 119, 1502 (1960):

«Мы объяснили огромные сечения захвата кулоновских центров захватом в высоковозбужденные состояния с последующим каскадным процессом, в котором определенная часть захваченных электронов достигает основного состояния»

Сечение каскадного захвата: $\sigma(E_0) = \int \sigma(E_0, U) dU P(U)$

Вероятность прилипания: $P(U) = \int_{U + \hbar\omega \geq 0} K(U, \hbar\omega) d(\hbar\omega) P(U + \hbar\omega)$

$$K(U, \hbar\omega) = \frac{1/l(U, \hbar\omega)}{\int [1/l(U, \hbar\omega)] d(\hbar\omega)}$$

Квазиклассический подход: вероятность излучения фонона для связанного электрона в любой точке орбиты та же, что и для свободного электрона соответствующей кинетической энергией

Приближение заданного (равновесного) распределения свободных носителей

$$P(U=kT) \approx 1 \quad P(U=0) = 0$$

Вывод: Основную роль в захвате играют переходы на состояния с $E_i = kT$

Теория каскадного захвата

В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич ФТП 12, 3 (1978).

«Кончено, вероятность прилипания стремится к нулю при уменьшении энергии связи, но не так быстро, как это считал Лэкс»

Описали захват как диффузию по энергии –
уравнение Фоккера-Планка:

$$\tilde{\rho} \frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial E}$$

$\tilde{\rho}$ – квазиклассическая плотность состояний примесного центра

J – поток носителей заряда в пространстве полной энергии $J = -B(E)f - D(E) \frac{\partial f}{\partial E}$

$B(E)$ – коэффициент энергетического динамического трения, $D(E)$ – коэффициент энергетической диффузии, рассчитываются квазиклассически

Этот подход позволил уточнить вероятности прилипания, зависимость сечения захвата от температуры, концентрации центров

Вывод: Основную роль в захвате играют переходы на состояния с $E_1 = ms^2 \ll kT$
(ms^2 составляет долю мэВ)

Переходы между примесными состояниями при взаимодействии с акустическими фононами.

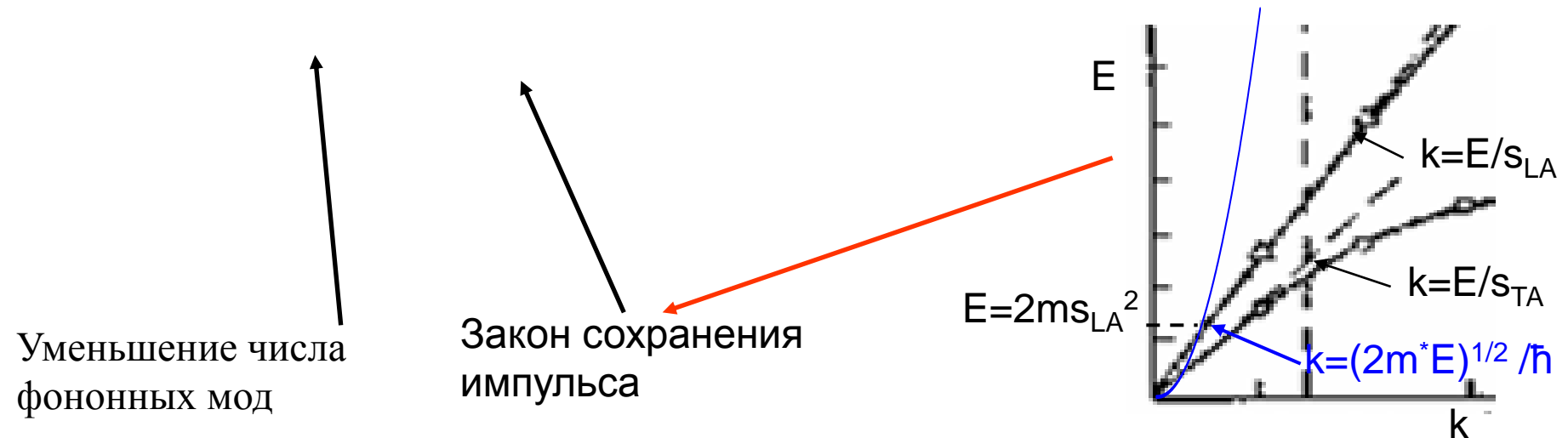
Однодолинная модель.

- Квазиклассическое приближение, зависимость вероятности перехода с уровня E_i от энергии фонона
[В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясиевич, ФТП 12, 3 (1978)]

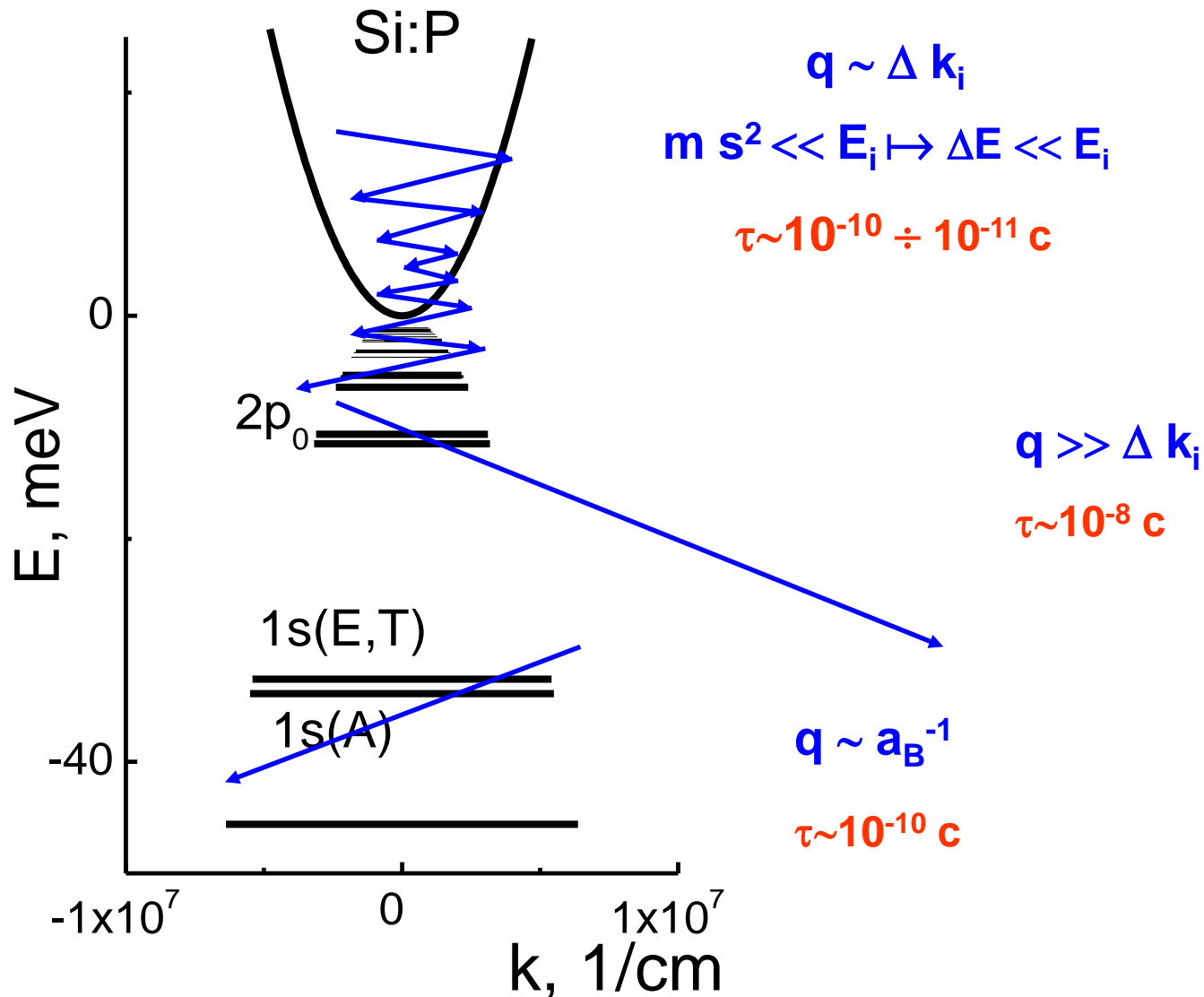
- Переходы между водородоподобными состояниями, $q \gg a_B^{-1}$
[G. Ascarelly and S. Rodriguez, Phys.Rev., 124, 1321 (1961); С.В. Мешков, Э.И. Раиба, ЖЭТФ, 76, 2207 (1979)]

S-состояния
$$W_{n,n'} = \frac{64\Xi^2}{\pi\hbar\rho_c S^2 a_B^2} \frac{1}{(nn')^3 (qa_B)^5}$$

Неопределенность импульса примесных состояний и дисперсия фононов:



Релаксация по донорным состояниям в кремнии в однодолинном приближении



Взаимодействие с оптическими и междолинными фононами

Оптические фононы

$\hbar\omega$ 36 мэВ Ge, 64 мэВ Si,
 $0 < q < 1/a_0$

Рекомбинация – возможна на
состояния $\hbar\omega - E_i > 0$,
пороговый характер – при $kT > \hbar\omega - E_i$

Внутрицентровые переходы –
резонансные при $dE \approx \hbar\omega$

Характерные времена 10^{-12} сек

междолинные фононы

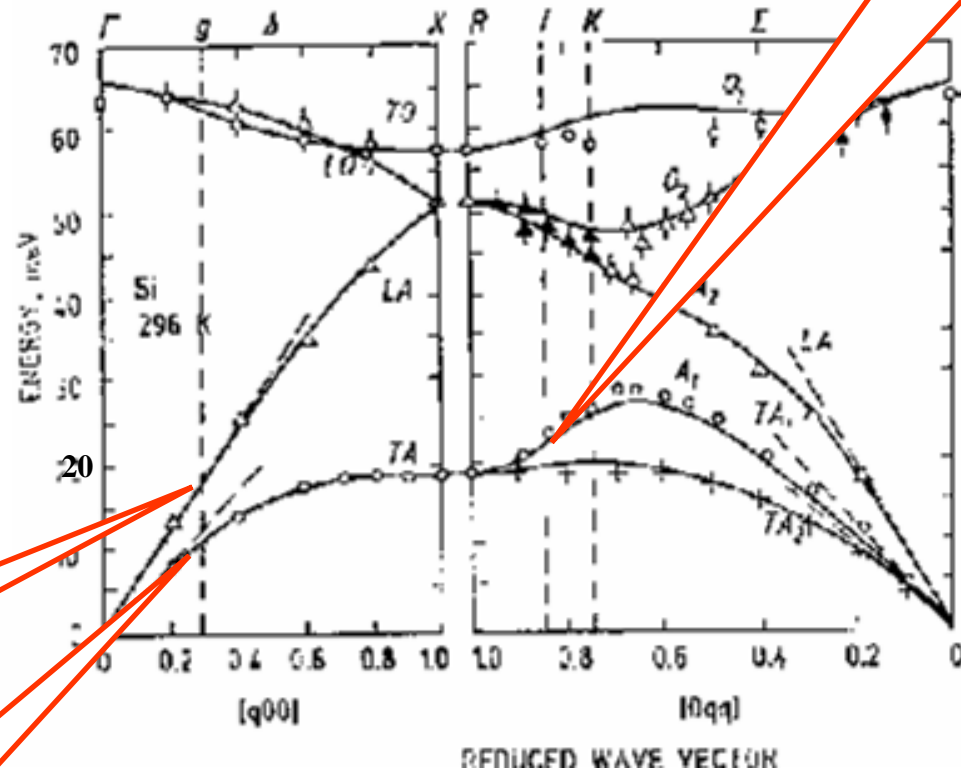
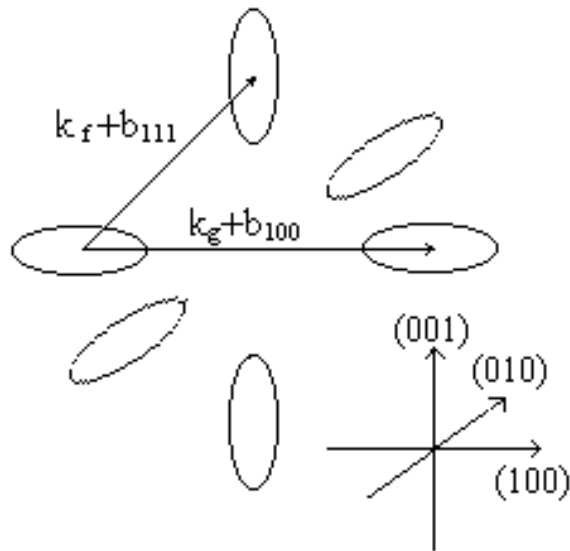
$\hbar\omega(q)$ 15-20 мэВ, Si
 $q \approx q$ intervalley

Рекомбинация – возможна на
состояния $\hbar\omega - E_i > 0$,
пороговый характер – при $kT > \hbar\omega - E_i$

Внутрицентровые переходы –
резонансные при
 $dE \approx \hbar\omega(q \approx q \text{ intervalley } \pm \Delta q)$, Δq
– неопределенность импульса
примесного состояния

Характерные времена до 10^{-12} сек

Междолинные фононы в кремнии



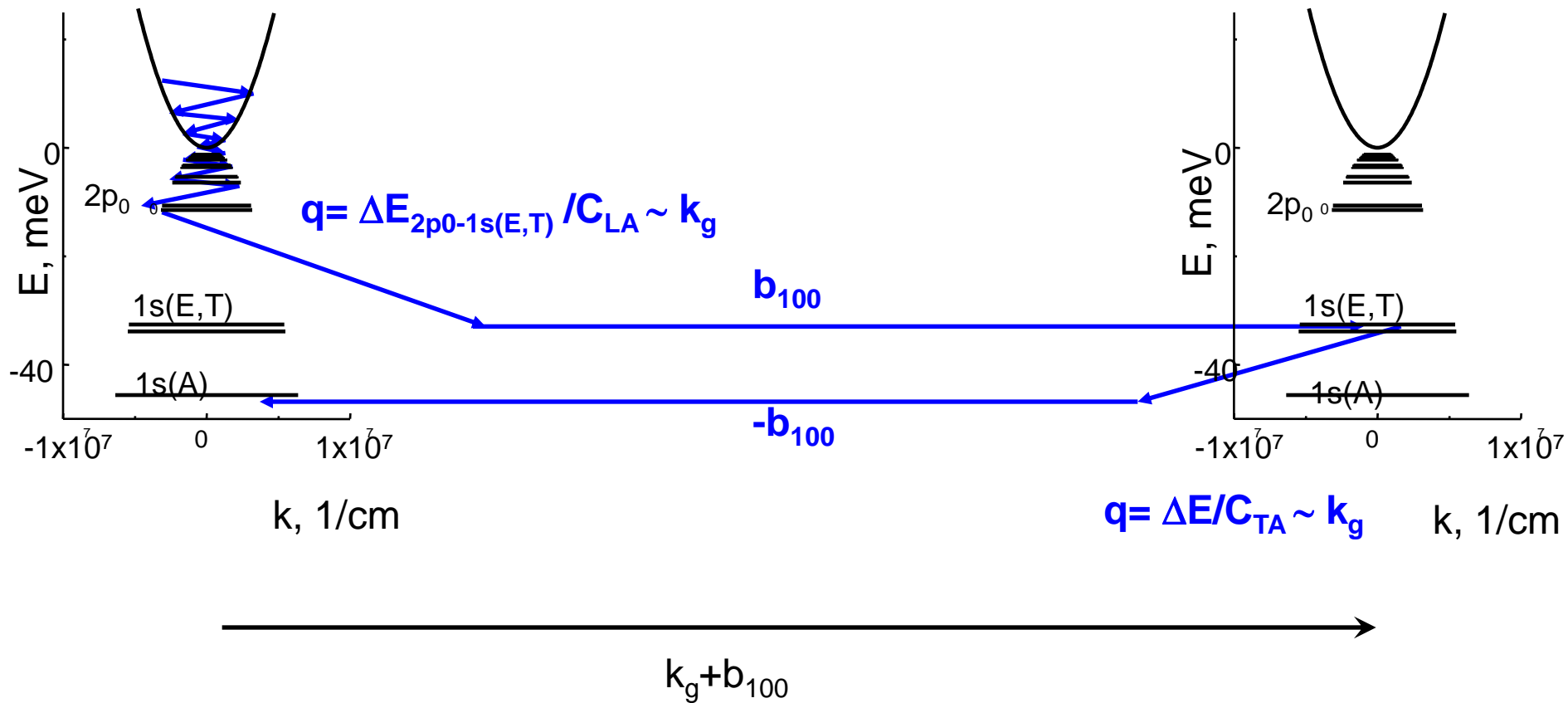
f-TA фононы

g-LA фононы

g-TA фононы

A.Dargys, J.Kundrotas, Handbook on physical properties of Ge Si GaAs and InP, Science and encyclopedia publishers, Vilnius, Lithuania, 1994

Релаксация по донорным состояниям в кремнии с учетом многодолинных переходов



Соударения с свободными носителями

W. Pickin, Phys. Rev. B 20, 2451 (1979); L. Reggiani and V. Mitin, Rivista del Nuovo Cimento 12, 1 (1989):

«Во всех случаях, когда существенна ударная ионизация, она носит каскадный характер»

K. Omidvar, Phys. Rev. 140, A38 (1965).

$$\sigma_{i,j}^{Auger} = \frac{8\pi}{a_B^2 k_0^2} \int_{k_0-k_1}^{k_0+k_1} |\mathcal{F}_{i,j}(k)|^2 k^{-3} dk \quad \mathcal{F}_{i,j}(k) = \int \Phi_i^*(\mathbf{r}) e^{ikz} \Phi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

k_0 и k_1 - начальный и конечный волновые вектора свободного носителя заряда, удовлетворяющие закону сохранения энергии.

Трудоёмкость расчета – использование феноменологического описания:

$$\sigma^{Auger}(E) = 2.25 \sigma_0 (E/E_I - 1)(E/E_I)^{-5/4}$$

Сечения ионизации для атома водорода

K. Omidvar, Phys. Rev. 140, A26 (1965).

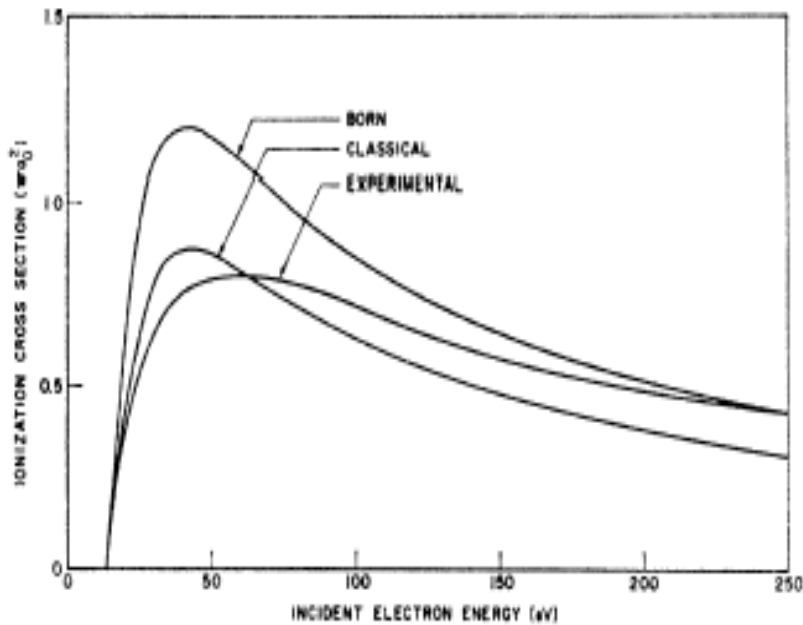


FIG. 1. Ionization of the ground state of the hydrogen. The theoretical curves, Born and classical, are compared with the experimental curve.

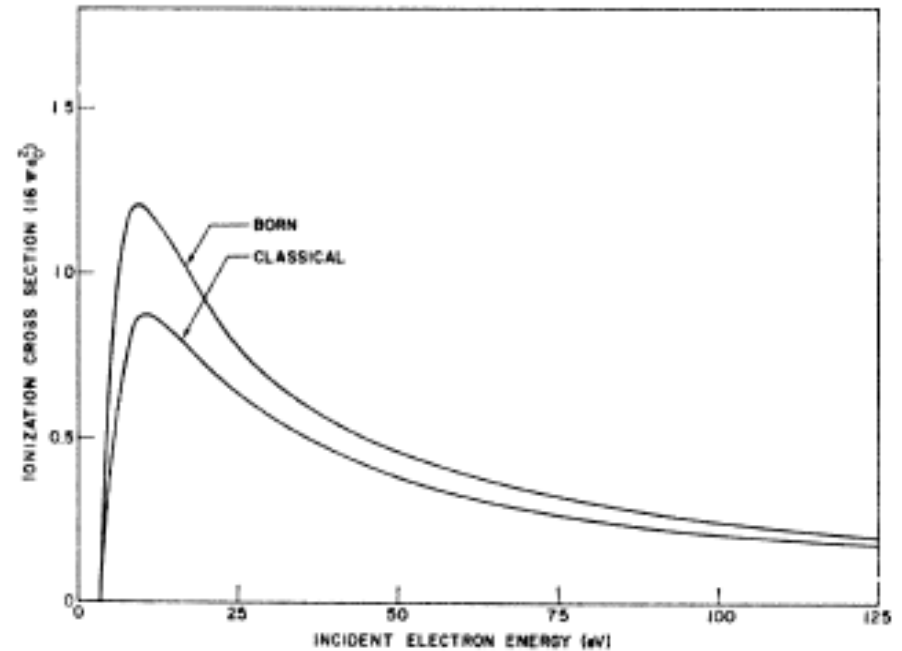


FIG. 4. Ionization of the hydrogen in the $n=2$ level, averaged over all sublevels.

максимум сечения прямой ионизации в растёт с уменьшением разности энергий ионизации уровней E_i приблизительно как E_i^{-2} .

Сечения возбуждения для атома водорода

K. Omidvar, Phys. Rev. 140, A38 (1965).

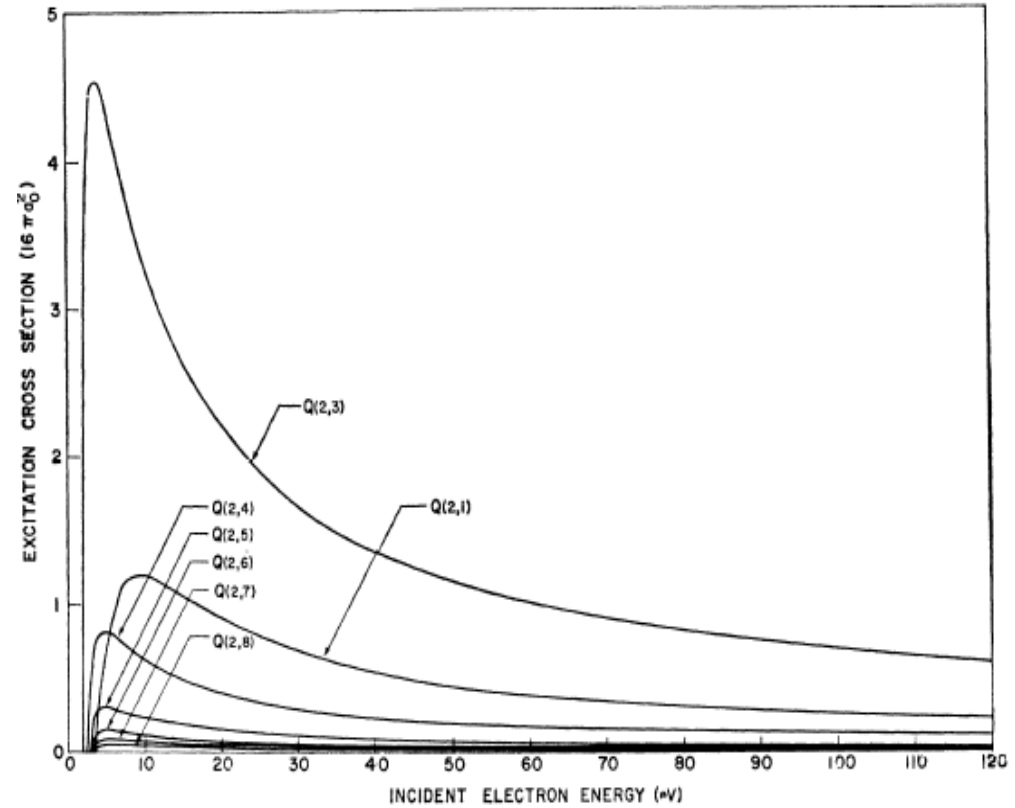
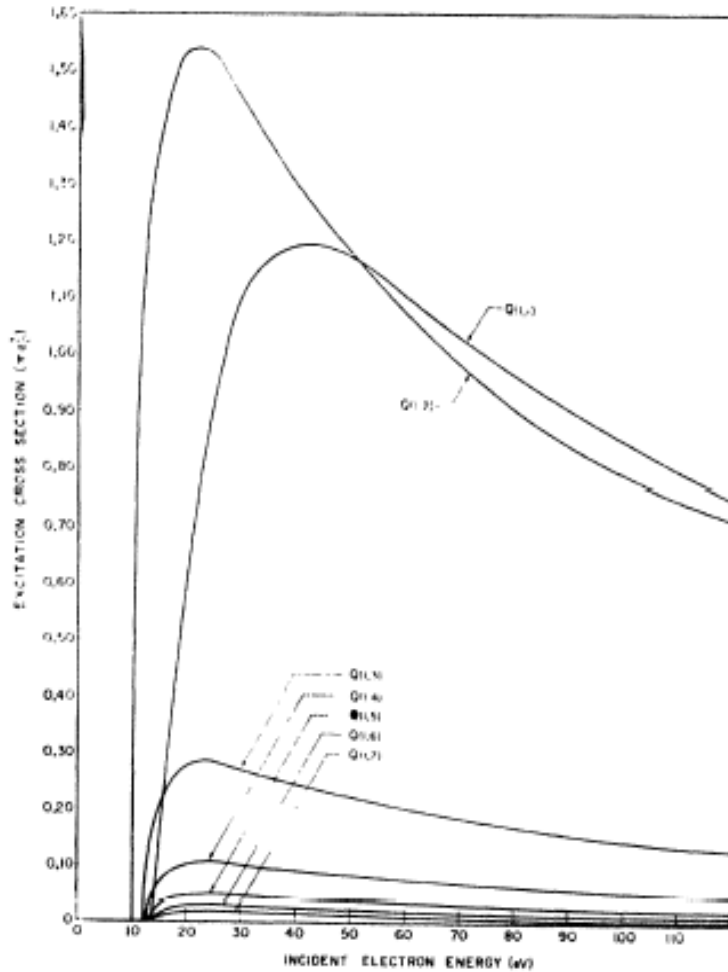
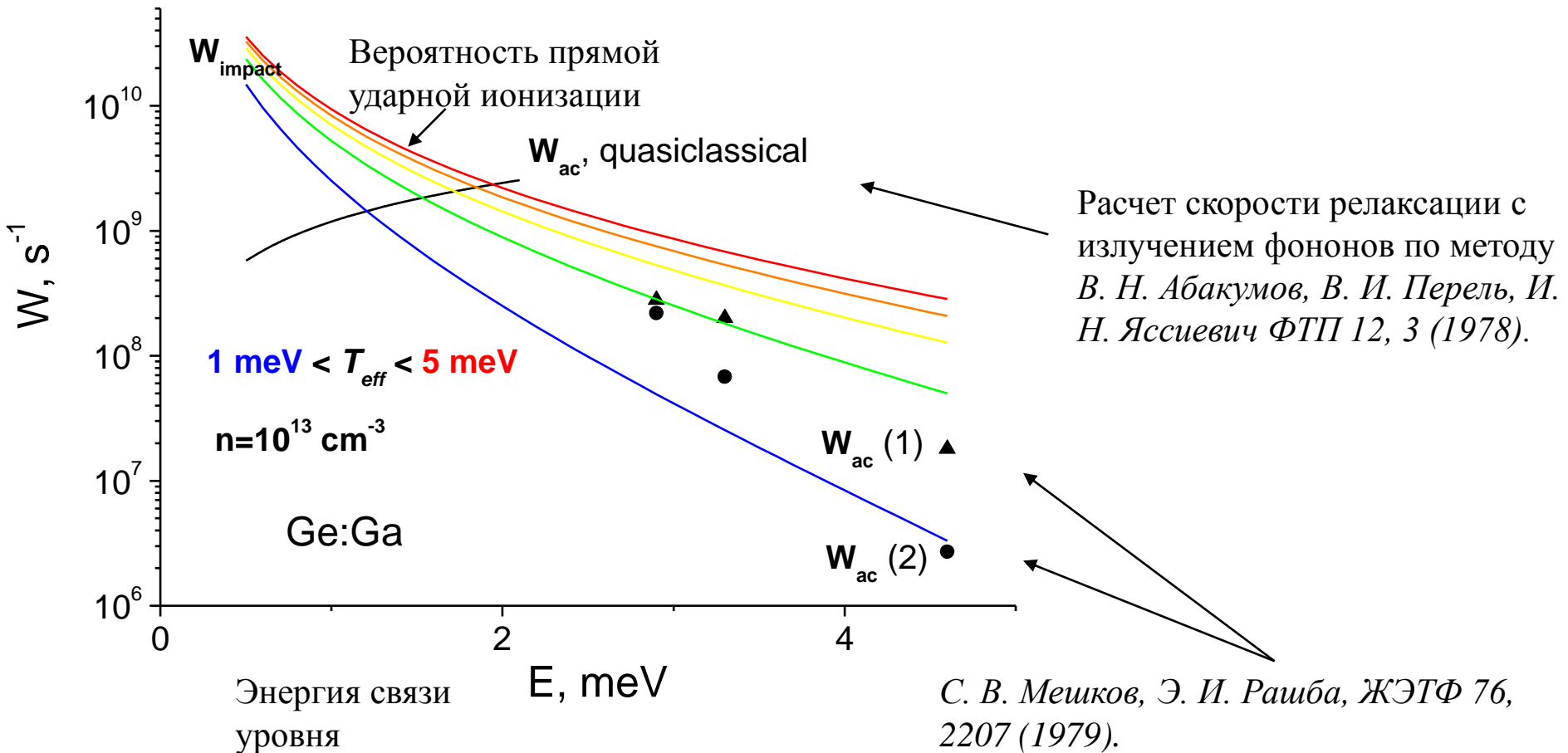


FIG. 2. Excitation of the ground state of the hydrogen to the $n=2, 3, 4, 5, 6, 7$ states. $Q(1,i)$ is the cross section of the ground state for ionization by electron collision.





максимум сечения возбуждения растет с уменьшением разности энергий уровней ΔE приблизительно как ΔE^{-3} .

Влияние ударных процессов на каскадный захват

При $T_{eff} \sim E_i$ возрастает роль ударной ионизации уровней с энергией E_i .
 В этом случае каскадный захват может оказаться неэффективным, роль одноквантовых процессов при этом возрастает.



Содержание

1. Почему интересны мелкие примесные центры в полупроводниках 
2. Особенности спектра состояний мелких примесных центров 
3. Равновесная населенность примесных состояний 
4. Расчет неравновесной населенности примесных состояний 
5. Каскадный захват при взаимодействии с акустическими фононами 
6. Взаимодействие с междолинными и оптическими фононами 
7. Особенности взаимодействия с свободными носителями заряда 