

Особенности электролюминесценции эрбия в неупорядоченных полупроводниках, обусловленные различием заряда локализованных состояний

© А.Б. Шмелькин[¶], К.Д. Цэндин*

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 29 ноября 2006 г. Принята к печати 3 декабря 2006 г.)

Рассмотрено влияние заряда дефектов и доноров на процесс электролюминесценции. Было показано, что учет различия температурных и полевых зависимостей вероятности термостимулированных туннельных переходов электронов с D^- -дефектов и N^0 -доноров позволяет объяснить специфические температурные и полевые зависимости проводимости и электролюминесценции.

PACS: 71.23.-k, 71.23.Cq

1. Введение

Интенсивное исследование люминесценции эрбия в полупроводниковых матрицах, начавшееся в конце прошлого столетия, вызвано тем, что длина волны эрбиевой люминесценции 1.54 мкм, соответствующая переходу из первого возбужденного $^4I_{13/2}$ в основное $^4I_{15/2}$ состояние во внутренней $4f$ -оболочке иона эрбия Er^{3+} , попадает в минимум поглощения оптического волокна. Одним из направлений таких работ является исследование фотолюминесценции (ФЛ) и электролюминесценции (ЭЛ) ионов эрбия в халькогенидных стеклообразных полупроводниках (ХСП) [1,2] и в аморфном гидrogenизированном кремнии $\alpha\text{-Si:H(Er)}$ [3,4]. Интерес к этим матрицам вызван как простым и дешевым способом введения эрбия, так и сравнительно слабым температурным гашением эрбиевой люминесценции. В последнее время фотолюминесценцию эрбия наблюдали в ХСП, легированном эрбием методом сораспыления ХСП и летучих комплексных соединений эрбия [1,2].

Одной из центральных проблем при исследовании ФЛ и ЭЛ является проблема возбуждения ионов эрбия. Согласно результатам исследований, приведенным в работе [3], возбуждение ионов эрбия в $\alpha\text{-Si:H(Er)}$ происходит благодаря оже-процессу, при котором электрон из зоны проводимости захватывается нейтральным дефектом типа оборванной связи D^0 с образованием состояния D^- . Энергия перехода за счет кулоновского взаимодействия передается внутренней $4f$ -оболочке иона эрбия, переводя последний из основного состояния $^4I_{15/2}$ в первое возбужденное $^4I_{13/2}$. Эффективность этого процесса обусловлена близостью энергии перехода $D^0 + e \rightarrow D^-$ к энергии возбуждения эрбия. С другой стороны, в работе [4] показано, что уровень Ферми в $\alpha\text{-Si:H(Er)}$ определяется термодинамическим

взаимодействием дефектов типа оборванной связи и доноров (рис. 1).

Стационарное состояние системы при ЭЛ поддерживается многофононной туннельной ионизацией D^- -центров и доноров в электрическом поле, переводящей собственные дефекты типа оборванной связи из заряженного D^- -состояния в нейтральное D^0 -состояние, а доноры из N^0 -состояния в N^+ -состояние.

Эти ионизации определяют зависящую от поля концентрацию электронов в зоне проводимости и, соответственно, вид вольт-амперной характеристики, полевую и температурную зависимости эрбиевой электролюминесценции.

В настоящей работе показано, что особенности вольт-амперной характеристики, полевой и температурной зависимости эрбиевой электролюминесценции могут быть объяснены многофононной туннельной ионизацией электронов с отрицательно заряженных собственных дефектов D^- и нейтральных доноров N^0 , имеющих разное зарядовое состояние.

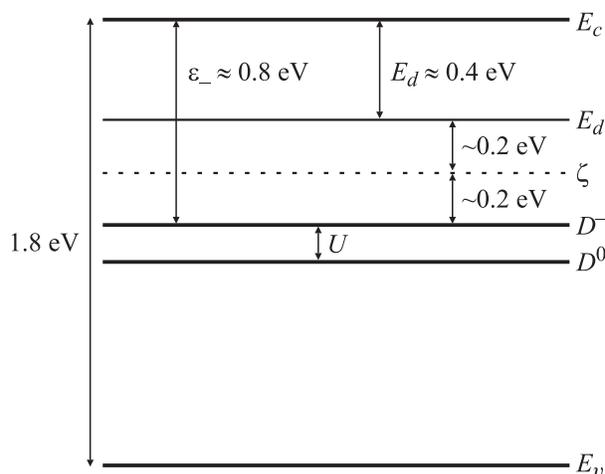


Рис. 1. Зонная диаграмма $\alpha\text{-Si:H(Er)}$ [4].

[¶] E-mail: alibumbles@mail.ru

2. Модель

2.1. Ионизация глубоких D^- -центров и доноров N^0

В рамках адиабатического приближения, следуя приведенному в книге [5] подходу, электронные переходы рассматриваются как происходящие при фиксированном значении конфигурационной координаты x , а колебания самой примеси определяются потенциалом, создаваемым окружающими атомами с учетом усредненного поляризованного поля, наводимого локализованным электроном.

Потенциал $U_1(x)$ соответствует случаю, когда электрон связан на примеси, а потенциал $U_2(x)$ — ионизированной примеси и свободному электрону с нулевой кинетической энергией. Энергия, разделяющая оба потенциала, равна энергии связи электрона ε_b , зависящей от конфигурационной координаты x ;

$$U_1(x) = U_2(x) - \varepsilon_b(x). \quad (2)$$

Ограничимся рассмотрением наиболее простой и широко используемой в теории многофоновых переходов модели двух одинаковых сдвинутых парабол, впервые введенной Хуангом и Рис. В рамках этой модели энергия связи электрона зависит от конфигурационной координаты линейно, тогда

$$U_2 = \frac{M\omega^2 x^2}{2}, \quad (2a)$$

$$U_1 = \frac{M\omega^2(x - x_0)^2}{2} - \varepsilon_T, \quad (2b)$$

где M — масса примеси, а ω — частота колебаний, ε_T — термическая энергия ионизации.

Эмиссия электрона происходит на уровне колебательной энергии $\varepsilon_T + \mathcal{E}$ (энергия \mathcal{E} отсчитывается от минимума потенциала U_2) благодаря туннелированию дефекта из конфигурации, соответствующей основному состоянию, в конфигурацию ионизированной примеси. Вероятность термоактивированного туннельного перехода $P(\mathcal{E})$ дефекта с колебательной энергией $\varepsilon_T + \mathcal{E}$ при температуре T определяется соотношением [6]

$$P(\mathcal{E}) \propto \exp(-\psi), \quad (36)$$

$$\psi(\mathcal{E}) = \frac{\varepsilon_T + \mathcal{E}}{kT} + 2|S(\mathcal{E})|, \quad (36)$$

где $S(\mathcal{E})$ — действие, умноженное на i/\hbar . Первый член в (36) описывает заселенность колебательного уровня, а второй — определяет туннелирование дефекта из основного состояния в ионизированное. Из-за экспоненциальной зависимости $P(\mathcal{E})$ от энергии \mathcal{E} туннелирование имеет место в узком диапазоне энергий, близких к оптимальной энергии туннелирования \mathcal{E}_0 . Это значение энергии определяется минимумом показателя экспоненты $\psi(\mathcal{E})$.

Величина $\hbar d|S|/d\mathcal{E}$ определяет время туннелирования через барьер τ , которое, согласно [5], может быть разбито на две части τ_1 и τ_2 , являющиеся временами туннелирования под потенциалами U_1 и U_2 соответственно:

$$\tau = \tau_2 \pm \tau_1 = \frac{\hbar}{2kT}. \quad (4)$$

Знак минус соответствует слабой электрон-фононной связи, а плюс — сильной.

В случае слабого электрон-фононного взаимодействия, положив при вычислении τ_1 $\mathcal{E}_0 = 0$ (для низких температур $\mathcal{E} \ll \varepsilon_T$ [7]), в [5] получено

$$\tau_1 = \frac{1}{2\omega} \ln \frac{\varepsilon_T}{\varepsilon_{\text{opt}} - \varepsilon_T}, \quad (5)$$

где ε_{opt} — оптическая энергия ионизации.

Кратко опишем следуя [5] влияние электрического поля на вероятность эмиссии электрона, связанной с термоактивированным туннельным переходом дефекта.

В однородном электрическом поле потенциал с постоянным наклоном надо добавить к потенциалу ямы, связывающей электрон на примеси. При ионизации дефекта D^- потенциал ямы соответствует потенциалу D^0 -центра, поскольку именно он действует на ионизируемый электрон. Потенциал нейтрального состояния D^0 можно считать потенциалом малого радиуса и аппроксимировать его прямоугольной ямой. В таком случае электрон в поле может туннелировать через образовавшийся треугольный барьер при отрицательном значении энергии $-\varepsilon$ (рис. 2), которому соответствует смещенный вниз по энергии адиабатический потенциал $U_{2\varepsilon} = U_2 - \varepsilon$.

Траектория для туннелирования дефекта в конфигурационном пространстве при этом сокращается и высота барьера уменьшается. В случае относительно слабых электрических полей и высоких температур, когда поле вносит лишь поправки к термической ионизации и ε много меньше, чем \mathcal{E}_0 , оптимальная энергия туннелирования дефекта \mathcal{E}_0 останется неизменной, а поправку к показателю экспоненты ψ можно найти, варьируя по ε действие $S(\mathcal{E}_0, \varepsilon)$, в определении которого энергия U_2 заменена на $U_{2\varepsilon}$.

В результате

$$\psi(\mathcal{E}_0, \varepsilon) = \psi|_{\varepsilon=0} + 2\varepsilon \left. \frac{d|S_{2\varepsilon}|}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}, \quad (6)$$

где $S_{2\varepsilon}$ — часть действия, соответствующая туннелированию под потенциалом $U_{2\varepsilon}$.

Таким образом, вероятность туннелирования дефекта равна [5]

$$e(\varepsilon) = e_T \exp\left(\frac{2\varepsilon\tau_2}{\hbar}\right), \quad (7)$$

где e_T — вероятность туннелирования в отсутствие электрического поля.

Однако вероятность туннелирования электрона через треугольный барьер, высота которого также

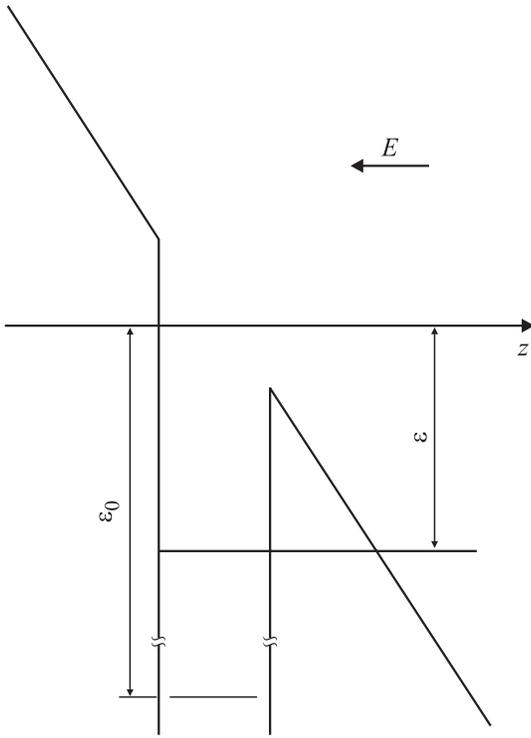


Рис. 2. Потенциальная яма D^0 -центра во внешнем электрическом поле.

определяется ε , резко падает пропорционально $\exp(-4\varepsilon^{3/2}\sqrt{2m^*}/3\hbar qE)$, где E — напряженность электрического поля, m^* — эффективная масса электрона, q — заряд электрона.

Вероятность туннельной ионизации для вылета электрона с энергией $-\varepsilon$ определяется следующим соотношением [5]:

$$e(E, \varepsilon) \propto \exp\left(\frac{2\varepsilon\tau_2}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m^*}\varepsilon^{3/2}}{3\hbar qE}\right). \quad (8)$$

Оптимальная энергия вылетающего электрона $-\varepsilon_m$ определяется из условия максимальности произведения экспонент и оказывается равной

$$\varepsilon_m = \frac{\tau_2^2 q^2 E^2}{2m^*}. \quad (9)$$

В итоге, подставляя найденное значение ε_m в (8), получаем выражение для вероятности многофононной ионизации как функции электрического поля [5]

$$e(E) = e_T \exp\left(\frac{E^2}{E_c^2}\right), \quad E_c^2 = \frac{3m^*\hbar}{\tau_2^3 q^2}. \quad (10)$$

Как видно из (10), вероятность ионизации растет экспоненциально с квадратом напряженности электрического поля. Рассмотренный выше механизм термостимулированной туннельной ионизации соответствует ионизации D^- -центра, когда ионизуемый электрон оставляет после себя нейтральный центр D^0 , потенциал которого в электрическом поле и изображен на рис. 2.

Если же ионизируется N^0 -центр, то после ионизации он остается заряженным, т.е. в состоянии N^+ , и необходимо учитывать поправки к вероятности ионизации, связанные с кулоновским взаимодействием между электроном и этим заряженным N^+ -донором. В этом случае, согласно [5], вероятность ионизации выглядит следующим образом:

$$e(E) = e_T \exp\left(\frac{E^2}{E_c^2}\right) \exp\left[\frac{2\sqrt{2m^*Ry^*}}{qE\tau_2} \ln\left(\frac{12E^2}{E_c^2}\right)\right], \quad (11)$$

где $Ry^* = q^4 m^*/2\kappa^2 \hbar^2$ — эффективная энергия Ридберга. Последняя экспонента в (11) и учитывает кулоновское взаимодействие между электроном и заряженным N^+ -донором (кулоновская поправка).

2.2. Статистика носителей заряда в поле с учетом влияния зарядовых состояний дефектов D^- и доноров N^0

В сильном электрическом поле механизмом увеличения проводимости в светодиоде является термостимулированная туннельная ионизация (ТСТИ) электронов с D^- -дефектов и N^0 -доноров. Для описания влияния ТСТИ наведем следующую систему уравнений:

$$\frac{nN_{D^0}}{N_{D^-}} = N_c \exp\left(-\frac{\varepsilon_-}{kT} + \frac{E^2}{E_{c1}^2}\right), \quad (12a)$$

$$\frac{nN_+}{N_0} = N_c \exp\left(-\frac{E_d}{kT} + \frac{E^2}{E_{c2}^2} + \frac{2\sqrt{2m^*Ry^*}}{qE\tau_2} \ln\left(\frac{12E^2}{E_{c2}^2}\right)\right), \quad (12b)$$

$$n + N_{D^-} = N_+, \quad (12в)$$

$$N = N_0 + N_+, \quad (12г)$$

$$N_D = N_{D^-} + N_{D^0}, \quad (12д)$$

где n — концентрация электронов, N_0 , N_+ — концентрации нейтральных и ионизированных доноров соответственно, N_{D^-} , N_{D^0} — концентрации D -центров в различных зарядовых состояниях, N_c — эффективная плотность состояний на краю зоны проводимости, E_{c1} и E_{c2} — характерные электрические поля для D^- -дефектов и N^0 -доноров из выражения (10).

Зависимость концентрации электронов от приложенного электрического поля модифицируется в результате увеличения прозрачности барьера (здесь для простоты положено, что характерные поля E_{c1} и E_{c2} приблизительно равны):

$$n = N_c \exp\left(-\frac{\xi}{kT} + \frac{E^2}{E_c^2} + \frac{\sqrt{2m^*Ry^*}}{qE\tau_2} \ln\left(\frac{12E^2}{E_c^2}\right)\right). \quad (13)$$

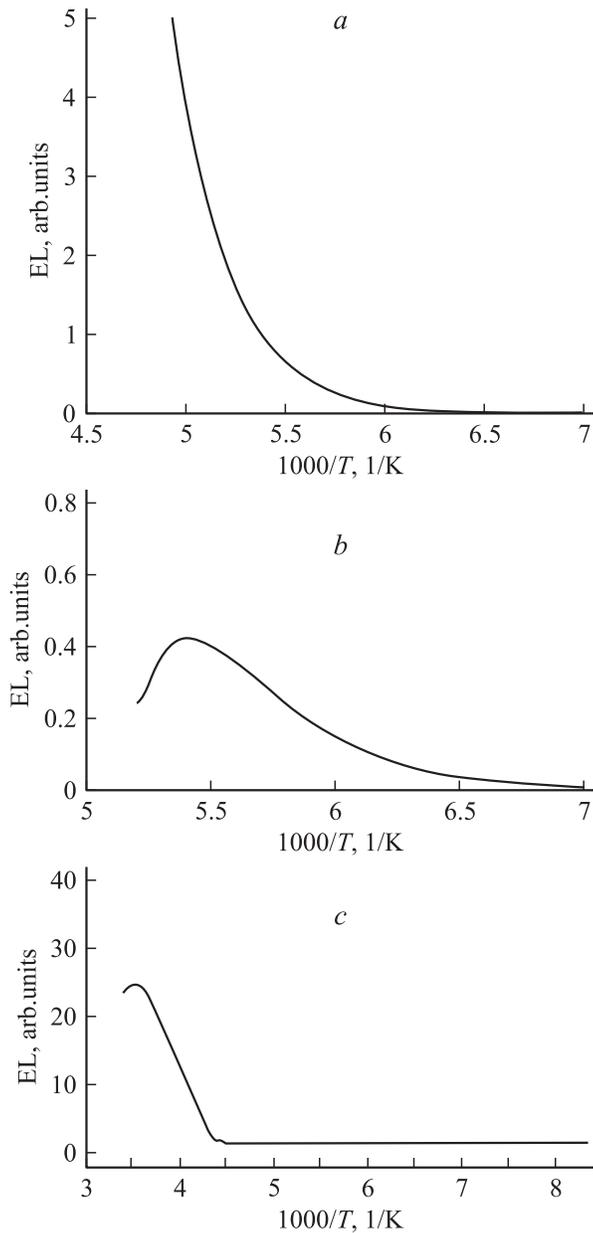


Рис. 3. Зависимость интенсивности электролюминесценции от температуры при постоянном токе без (а) и с (б) учетом кулоновской поправки; (с) — экспериментальные данные [4].

Используя (13), можно по формулам (14) и (15) рассчитать напряжения на образце и интенсивности электролюминесценции при постоянной плотности тока j , т.е. в условиях, соответствующих экспериментальным данным [4]:

$$j = q\mu n(E, T)E, \quad (14)$$

$$I_L = c_A n(E, T) N_{D0} t / t_r, \quad (15)$$

где μ — подвижность электронов, I_L — интенсивность электролюминесценции, c_A — коэффициент, описывающий вероятность захвата электрона посредством оже-процесса, t и t_r — полное и радиационное времена

жизни иона эрбия в возбужденном состоянии соответственно [4].

Рассчитанные зависимости напряжения на образце и интенсивности электролюминесценции от температуры при постоянном токе, с учетом кулоновской поправки и без нее приведены на рис. 3 и 4. Теоретические расчеты проводились при следующих значениях параметров: $\tau_1 = 10^{-14}$ с, $Ry^* = 0.136$ эВ, $m^* = 9.11 \cdot 10^{-28}$ г, $j = 1$ А/см².

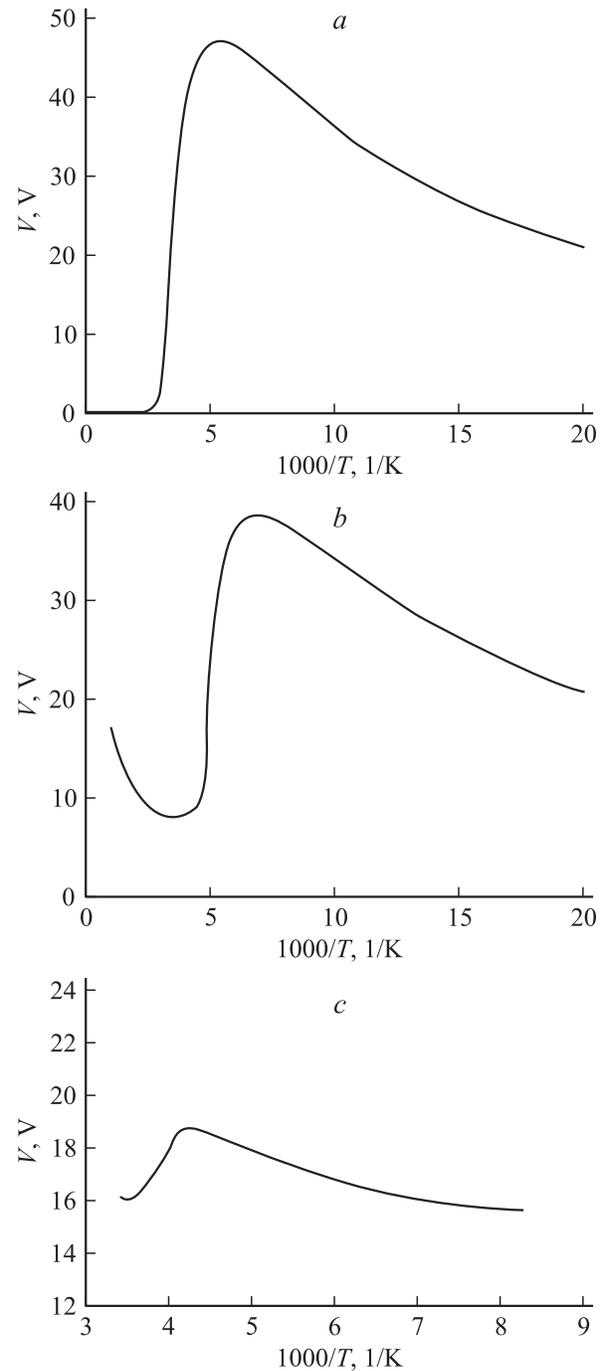


Рис. 4. Зависимость напряжения на образце от температуры при постоянном токе без (а) и с (б) учетом кулоновской поправки; (с) — экспериментальные данные [4].

3. Сравнение теории с экспериментом

Рассмотрим теперь экспериментальные данные. В [4] исследовалась следующая структура. На подложке монокристаллического кремния n -типа толщиной 300 мкм осаждана пленка α -Si:H(Er) толщиной $d \approx 1$ мкм и диаметром 1 мм. Электрические контакты наносились напылением алюминия на пленку и подложку.

В результате исследований электролюминесценции аморфного гидрогенизированного кремния, легированного эрбием, в диапазоне температур 77–300 К было обнаружено, что с ростом температуры интенсивность эрбиевой люминесценции возрастает и при температуре, близкой к комнатной, наблюдается ее максимум (рис. 3, c).

По нашему мнению, этот максимум соответствует теоретическому максимуму на рис. 3, b .

Температурная зависимость напряжения, прикладываемого к образцу для наблюдения ЭЛ, представлена на рис. 4, c [4]. Из сравнения этих экспериментальных данных и теоретических результатов, приведенных на рис. 4, b и c , видно, что экспериментально наблюдаемая характерная температурная зависимость с минимумом при высоких температурах правильно воспроизводится именно при учете различия в зарядовых состояниях ионизуемых D^- -дефектов и N^0 -доноров.

Таким образом, из приведенных графиков можно заключить, что учет различия в ТСТИ D^- -дефектов и N^0 -центров позволяет правильно объяснить экспериментальные данные, полученные для α -Si:H(Er).

В ХСП уровень Ферми определяется, как правило, не взаимодействием собственных дефектов и доноров, а взаимодействием собственных заряженных дефектов D^- и D^+ . В этом случае дефект в состоянии D^+ является аналогом донора N^+ . Поэтому можно ожидать, что эрбиевая ЭЛ в ХСП должна демонстрировать зависимости, сходные с рассмотренными выше.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-03-33113). Рекомендована к печати программным комитетом Международной конференции „Аморфные и микрокристаллические полупроводники-2006“.

Список литературы

- [1] С.А. Козюхин, А.Р. Файрушин, Э.Н. Воронков. ФТП, **39** (8), 1011 (2005).
- [2] В.Х. Кудоярова, С.А. Козюхин, К.Д. Цэндин, В.М. Лебедев, Е.А. Бабенко. В сб.: *Труды V Международной конференции „Аморфные и микрокристаллические полупроводники“* (СПб., 2006) с. 188.
- [3] М.С. Бреслер, О.Б. Гусев, Б.П. Захарченя, В.Х. Кудоярова, А.Н. Кузнецов, Е.И. Теруков, В. Фус, И.Н. Яснеевич. ФТТ, **38** (4), 1189 (1996).
- [4] О.Б. Гусев, М.С. Бреслер, Б.П. Захарченя, А.Н. Кузнецов, П.Е. Пак, Е.И. Теруков, К.Д. Цэндин, И.Н. Яснеевич. ФТТ, **41** (2), 210 (1999).

- [5] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Яснеевич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб., ПИЯФ РАН, 1997).
- [6] Л.Д. Ландау. Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1989).
- [7] С.Д. Ганичев, И.Н. Яснеевич, В. Преттл. ФТТ, **39** (11), 1905 (1997).

Редактор Л.В. Беляков

Features of erbium electroluminescence in disordered semiconductors, caused by distinction of the localized charge states

A.B. Shmelkin, K.D. Tsendin*

Saint-Petersburg State Polytechnical University,
195251 St. Petersburg, Russia

* Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract In the present paper influence of a charge of defects and donors on process of an electroluminescence is considered. It has been shown that taking into account the difference between temperature and field dependences of the probability of thermally activated tunneling of electrons from D^- defects and N^0 -transitions allows us to explain the specific temperature and field dependences of conductivity and electroluminescence.