

К ТЕОРИИ РЕКОМБИНАЦИИ В АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ С КВАЗИНЕПРЕРЫВНЫМ СПЕКТРОМ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ

Беляев А. Д., Звягин И. П.

Исследована функция заполнения локализованных состояний в щели подвижности при учете энергетической зависимости коэффициентов захвата неравновесных носителей заряда. Рассмотрены система простых локальных центров и система центров, имеющих положительную энергию корреляции. Показано, что наиболее эффективные центры рекомбинации занимают сравнительно узкую полосу энергетического спектра, положение которой определяется соотношением коэффициентов захвата и концентраций неравновесных электронов и дырок. Найдено, что люкс-амперная характеристика может быть как сублинейной, так и суперлинейной в зависимости от вида плотности состояний.

Введение. Существование квазинепрерывного спектра локализованных состояний в щели подвижности аморфных полупроводников существенно усложняет рассмотрение процессов рекомбинации. Поэтому при изучении рекомбинации и фотопроводимости коэффициенты захвата часто предполагаются постоянными. Однако фактически энергетическая зависимость коэффициентов захвата может быть более сильной, чем соответствующая зависимость плотности состояний. Действительно, при безызлучательном многофононном захвате электронов на локальные центры зависимость коэффициентов захвата от энергии состояний является экспоненциальной. Так, при не слишком высоких температурах для коэффициентов захвата электронов и дырок $c_n(\epsilon)$, $c_p(\epsilon)$ имеем

$$\begin{aligned} c_n(\epsilon) &= c_{n0} \exp\left(-\frac{E_c - \epsilon}{\epsilon_n}\right), \\ c_p(\epsilon) &= c_{p0} \exp\left(-\frac{\epsilon - E_v}{\epsilon_p}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где c_{n0} , c_{p0} — предэкспоненциальные множители, E_c и E_v — пороги подвижности для зоны проводимости и валентной зоны, энергии ϵ_n и ϵ_p порядка энергии оптического фонона [1]. Отметим, что в случае высоких температур энергетическая зависимость коэффициентов многофононного захвата становится более резкой (близкой к гауссовой). Поскольку конкретный вид зависимостей $c_n(\epsilon)$ и $c_p(\epsilon)$ не сказывается на основных качественных выводах, в дальнейшем мы используем аппроксимацию (1) для сечений захвата. Выражения (1) предполагают, что коэффициенты захвата определяются энергией состояния, т. е. существуют лишь центры одного типа. В разделе 2 мы обсудим более общий случай, когда одной и той же энергии могут отвечать различные состояния дефектов, характеризующиеся разными коэффициентами захвата.

В работах [2, 3] отмечалось, что в случае квазинепрерывного распределения состояний в щели подвижности наиболее эффективным механизмом может быть прыжковая рекомбинация через «лестницы» энергетических уровней. По оценке [3], темп «лестничной» рекомбинации пропорционален множителю $\exp[-2(L_0 E_g / \epsilon_0)^{1/2}]$, где E_g — ширина щели подвижности, ϵ_0 — энергия по-

рядка энергии оптического фотона, $L_0 = \ln(8\epsilon_0/27\rho a^3 E_g^2)$, a — радиус локализа-ции электрона, ρ — плотность состояний (ПС) в щели подвижности, полагаемая при этой оценке не зависящей от энергии. В случае рекомбинации через глубокие локализованные состояния, лежащие вблизи середины щели подвижности, темп рекомбинации содержит множитель $\exp(-E_g/2\epsilon_0)$. Лестничная рекомбинация более эффективна при $\rho > \rho_c$, где $\rho_c \approx (8\epsilon_0/27a^3 E_g^2) \exp(-E_g/16\epsilon_0)$. Пола-гая для оценки $E_g = 1.6$ эВ, $\epsilon_0 = 3 \cdot 10^{-2}$ эВ, $a = 10^{-7}$ см, получаем $\rho_c \approx 10^{17}$ эВ $^{-1}$.см $^{-3}$. В ряде аморфных материалов, например в аморфном гидрированном кремнии приборного качества, ПС в щели подвижности может быть достаточно малой ($\rho \ll 10^{16}$ эВ $^{-1}$.см $^{-3}$), и можно ожидать, что вклад лестничной рекомбинации мал. Некоторая неопределенность приведенной выше оценки связана с тем, что параметр ϵ_0 известен недостаточно хорошо, а ρ_c существенно зависит от ϵ_0 . Так, при $\epsilon_0 = 0.02$ эВ находим $\rho_c \approx 10^{16}$ эВ $^{-1}$.см $^{-3}$, т. е. при таких ϵ_0 и при разумных значениях ПС в щели подвижности важную роль может играть лестничная рекомбинация. При наличии явно выраженных пиков ПС, когда эффективная область рекомбинации сужена, лестничная рекомбинация становится эффективной при больших значениях ПС. В дальнейшем мы ограничимся случаем, когда основную роль играет прямой захват носителей заряда из зон на локальные центры, пренебрегая туннельными переходами между глубокими локализован-ными состояниями.

1. А м о р ф н ы й п о л у п р о в о д н и к с п р о с т ы м и л о к а л ь н ы м и ц е н т р а м и

Рассмотрим случай, когда в щели подвижности имеется один тип однозаряд-ных локальных центров. Кинетика электронных переходов описывается урав-нениями

$$\frac{dn}{dt} = g - \int d\epsilon \rho(\epsilon) c_n(\epsilon) [n(1-f(\epsilon)) - n_1(\epsilon)f(\epsilon)], \quad (2)$$

$$\frac{dp}{dt} = g - \int d\epsilon \rho(\epsilon) c_p(\epsilon) [pf(\epsilon) - p_1(\epsilon)(1-f(\epsilon))], \quad (3)$$

где n и p — концентрации электронов и дырок в делокализованных состояниях соответствующих зон, g — темп межзонной генерации электронно-дырочных пар, $\rho(\epsilon)$ — ПС в щели подвижности, $f(\epsilon)$ — неравновесная функция заполне-ния локализованных состояний, $n_1(\epsilon)$ и $p_1(\epsilon)$ — факторы Шокли—Рида—Холла, $n_1(\epsilon) = N_c \exp[-(E_c - \epsilon)/T]$, $p_1(\epsilon) = N_v \exp[-(\epsilon - E_v)/T]$, T — тем-пература (в энергетических единицах).

Условие нейтральности имеет вид

$$n - n_0 + \int d\epsilon \rho(\epsilon) [f(\epsilon) - f_0(\epsilon)] = p - p_0, \quad (4)$$

где $f_0(\epsilon)$ — равновесная функция заполнения, n_0 и p_0 — равновесные концен-трации делокализованных электронов и дырок.

В стационарных условиях из (2) и (3) находим стационарную функцию за-полнения

$$f(\epsilon) = \frac{c_n(\epsilon)n + c_p(\epsilon)p_1(\epsilon)}{c_n(\epsilon)[n + n_1(\epsilon)] + c_p(\epsilon)[p + p_1(\epsilon)]}. \quad (5)$$

Введем демаркационные уровни для электронов ϵ_{dn} и для дырок ϵ_{dp} , опре-деляемые уравнениями

$$\begin{aligned} c_n(\epsilon_{dn}) n_1(\epsilon_{dn}) &= c_p(\epsilon_{dn}) p, \\ c_p(\epsilon_{dp}) p_1(\epsilon_{dp}) &= c_n(\epsilon_{dp}) n, \end{aligned} \quad (6)$$

которые отделяют «мелкие» уровни, с которых вероятность термического возбу-ждения носителя в зону превышает вероятность рекомбинации, от уровней рекомбинации [4].

В области $\varepsilon > \varepsilon_{dn}$ функция заполнения имеет вид

$$f(\varepsilon) \approx \frac{n}{n + n_1(\varepsilon)} = \left(1 + \exp \frac{\varepsilon - F_n}{T}\right)^{-1}, \quad (7)$$

где квазиуровень Ферми для электронов F_n определяется условием $n_1(F_n) = n$. При $\varepsilon < \varepsilon_{dp}$ для функции заполнения получаем

$$f(\varepsilon) \approx \frac{p_1(\varepsilon)}{p + p_1(\varepsilon)} = \left(1 + \exp \frac{\varepsilon - F_p}{T}\right)^{-1}, \quad (8)$$

где F_p — квазиуровень Ферми для дырок, $p_1(F_p) = p$. В области энергий между ε_{dn} и ε_{dp} имеем

$$f(\varepsilon) \approx \frac{c_n(\varepsilon) n}{c_n(\varepsilon) n + c_p(\varepsilon) p} = \left(1 + \exp \frac{\varepsilon_q - \varepsilon}{\varepsilon_{np}}\right)^{-1}, \quad (9)$$

где $\varepsilon_{np} = (\varepsilon_n^{-1} + \varepsilon_p^{-1})^{-1}$, а уровень ε_q определяется условием $c_n(\varepsilon_q) n = c_p(\varepsilon_q) p$.

Подставляя (5) в (2) или (3), получим для стационарного темпа рекомбинации R :

$$R = (np - n_0 p_0) \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_c} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{c_n(\varepsilon) c_p(\varepsilon)}{c_n(\varepsilon) [n + n_1(\varepsilon)] + c_p(\varepsilon) [p + p_1(\varepsilon)]}. \quad (10)$$

Учитывая, что рекомбинация в основном идет через уровни, находящиеся между демаркационными уровнями, и считая, что $np \gg n_0 p_0$, находим

$$R \approx np \int_{\varepsilon_{dp}}^{\varepsilon_{dn}} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{c_n(\varepsilon) c_p(\varepsilon)}{c_n(\varepsilon) n + c_p(\varepsilon) p}. \quad (11)$$

В качестве примера рассмотрим полупроводник n -типа с ПС, показанной на рис. 1, в котором равновесный уровень Ферми F_0 находится вблизи минимума ПС. При малых уровнях возбуждения имеем $\varepsilon_q < \varepsilon_{dp} < \varepsilon_{dn} < F_p < F_n$. Уровни $\varepsilon < \varepsilon_{dp}$ заполнены преимущественно электронами, термически возбужденными из валентной зоны, уровни $\varepsilon_{dp} < \varepsilon < F_n$ — электронами, захваченными из зоны проводимости, а уровни $\varepsilon > F_n$ остаются пустыми из-за термического выброса электронов в зону проводимости. Получающаяся функция заполне-

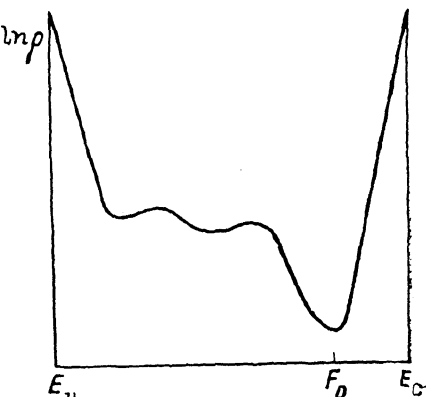


Рис. 1. Плотность состояний, используемая при качественном анализе.

ния схематически представлена на рис. 2. Неравновесные дырки в основном остаются в делокализованных состояниях, а неравновесные электроны захватываются на уровни $F_0 < \varepsilon < F_n$. Таким образом, число свободных дырок растет значительно быстрее, чем число свободных электронов, так что нейтральность обеспечивается равенством концентраций неравновесных свободных дырок и неравновесных локализованных электронов.

С ростом темпа оптической генерации электронно-дырочных пар F_n остается вблизи минимума ПС, а уровни F_p и ε_q движутся навстречу друг другу, и при $F_p < \varepsilon_q$ ситуация качественно меняется. В области $F_p < \varepsilon < \varepsilon_q$ доминирует захват дырок. При этом функция заполнения существенно отличается от функции заполнения, полученной в предположении о том, что коэффициенты захвата не зависят от энергии [5] (рис. 3). В последнем случае квазиуровни Ферми F_{nt} и F_{pt} определяются соотношениями $c_n n_1(F_{nt}) = c_n n + c_p p$ и $c_p p_1(F_{pt}) = c_n n + c_p p$.

Для функции распределения, представленной на рис. 3, условие нейтральности можно приближенно записать в следующем виде:

$$\int_{F_p}^{\varepsilon_q} d\varepsilon \rho(\varepsilon) = \int_{F_0}^{F_n} d\varepsilon \rho(\varepsilon). \quad (12)$$

Нетрудно видеть, что при $\varepsilon_q > F_p$ при условии, что в области рекомбинации $|d \ln \rho(\varepsilon)/d\varepsilon|^{-1} \gg \varepsilon_n, \varepsilon_p$, рекомбинация наиболее эффективна в окрестности уровня ε_q в полосе энергий ширины $\varepsilon_n + \varepsilon_p$. Из (11) получаем

$$\begin{aligned} R &\approx c_n(\varepsilon_q) n \rho(\varepsilon_q) (\varepsilon_n + \varepsilon_p) = c_p(\varepsilon_q) p \rho(\varepsilon_q) (\varepsilon_n + \varepsilon_p) = \\ &= c_{n0}^{\varepsilon_n} c_{p0}^{\varepsilon_p} e^{-\frac{E_g}{\varepsilon_n + \varepsilon_p}} \rho(\varepsilon_q) (\varepsilon_n + \varepsilon_p) p^{\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_n + \varepsilon_p}} n^{\frac{\varepsilon_n}{\varepsilon_n + \varepsilon_p}}. \end{aligned} \quad (13)$$

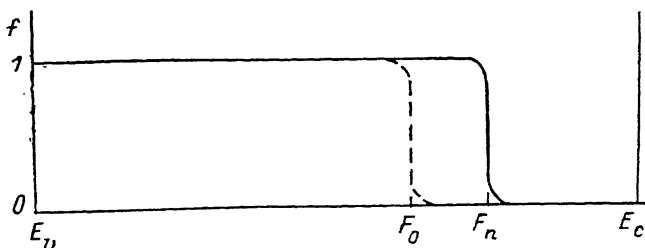


Рис. 2. Функция заполнения однозарядных локальных центров при малом уровне возбуждения.

Штриховая линия — равновесная функция заполнения.

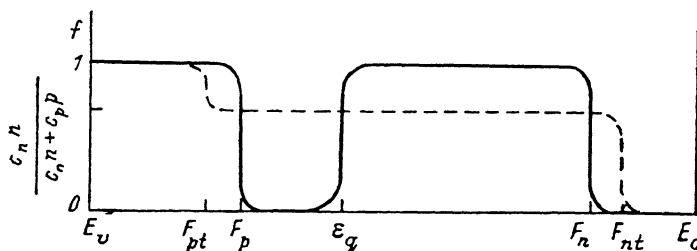


Рис. 3. Функция заполнения однозарядных локальных центров при высоком уровне возбуждения.

Штриховая линия — функция заполнения в случае постоянных коэффициентов захвата [5].

Дифференцируя уравнение нейтральности (12) по n , находим

$$\frac{dp}{dn} = \gamma \frac{p}{n}, \quad (14)$$

где

$$\gamma = \frac{\rho(F_n)T + \rho(\varepsilon_q)\varepsilon_{np}}{\rho(F_p)T + \rho(\varepsilon_q)\varepsilon_{np}}. \quad (15)$$

Если $|d \ln \rho(\varepsilon)/d\varepsilon| T \ll 1$ в окрестности квазиуровня Ферми и $|d \ln \rho(\varepsilon)/d\varepsilon| \varepsilon_{np} \ll 1$ в окрестности уровня ε_q , то приближенное решение уравнения (14) имеет вид

$$p = An^{\gamma}, \quad (16)$$

где величина A зависит от температуры, положения равновесного уровня Ферми и вида ПС. Подставляя (16) в (13), получаем люкс-амперную характеристику системы в виде

$$n \sim g^{\frac{1}{1-\gamma}}, \quad (17)$$

где

$$\beta = 1 + \frac{\rho(F_p) - \rho(F_n)}{\rho(F_n) + \rho(F_p) \frac{\varepsilon_n}{\varepsilon_p} + \rho(\varepsilon_2) \frac{\varepsilon_n}{T}}. \quad (18)$$

Когда электронный квазиуровень Ферми расположен в области минимума ПС, имеем $\rho(F_n) \ll \rho(F_p) \approx \rho(\varepsilon_2)$, и люкс-амперная характеристика суперлинейна. Если значения ПС в окрестностях F_n и F_p сравнимы, то характеристика близка к линейной.

При дальнейшем усилении генерации неравновесных носителей происходит быстрое перемещение квазиуровня Ферми для электронов, поскольку $\rho(F_n) \ll \rho(F_p)$, до тех пор пока величины ПС в окрестности F_n и F_p не станут одного порядка. Когда электронный квазиуровень Ферми уже выходит в область хвоста зоны проводимости, дырочный квазиуровень Ферми начинает смещаться и достигает хвоста валентной зоны. Выражения (16) и (18) теперь неприменимы. Подставляя в (15) явные выражения для $\rho(F_n)$ и $\rho(F_p)$, находим

$$p = N_v \left(\frac{\rho_c \varepsilon_c}{\rho_v \varepsilon_v} \right)^{\frac{\varepsilon_v}{T}} \left(\frac{n}{N_c} \right)^{\frac{\varepsilon_v}{\varepsilon_c}} \quad (19)$$

и

$$\beta = 1 - \frac{(\varepsilon_v/\varepsilon_c) - 1}{(\varepsilon_v/\varepsilon_c) + (\varepsilon_n/\varepsilon_p)}, \quad (20)$$

где $\rho_c = \rho(E_c)$, $\rho_v = \rho(E_v)$, а ε_c и ε_v — энергетические параметры хвостов зоны проводимости и валентной зоны соответственно. Полагая для оценки $\varepsilon_n = \varepsilon_p$, $\varepsilon_v = 0.05$, $\varepsilon_c = 0.03$ эВ, получим $\beta = 0.75$. Отметим, что полученный показатель не зависит от температуры в отличие от результата Роуза [4]: $\beta = \varepsilon_c / (\varepsilon_c + T)$.

2. Аморфный полупроводник с локальными центрами, имеющими положительную энергию корреляции

Анализ кинетики рекомбинации в аморфных полупроводниках, содержащих дефекты с положительной энергией корреляции, оказывается, естественно, более громоздким (см., например, [6, 7]). Можно выделить два альтернативных канала рекомбинации. Первый канал отвечает захвату электронов на D^+ -центры

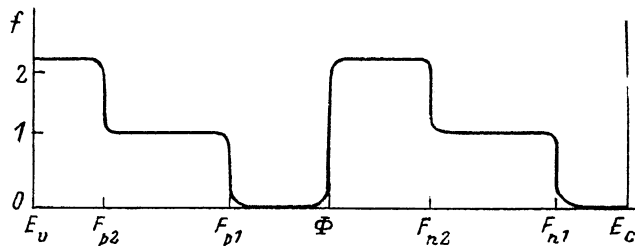


Рис. 4. Функция заполнения локальных центров с положительной энергией корреляции при достаточно высоком уровне возбуждения.

и дырок на D^0 -центры, а второй — захвату электронов на D^0 -центры, а дырок на D^- -центры. Для каждого канала можно ввести свои квазиуровни Ферми (F_{n1} , F_{p1} ; F_{n2} , F_{p2}) и уровни ε_q (ε_{q1} , ε_{q2}). На рис. 4 показана функция заполнения локальных центров при достаточно высоком уровне возбуждения. Характерная особенность системы состоит в том, что основную роль в рекомбинации играют не уровни ε_{q1} и ε_{q2} , а состояния вблизи уровня Φ , находящегося между ε_{q1} и ε_{q2} и определяемого уравнением $c_n^+(\Phi) c_n^0(\Phi) n^2 = c_p^-(\Phi) c_p^0(\Phi) p^2$, где $c_n^+(\varepsilon)$, $c_n^0(\varepsilon)$, $c_p^-(\varepsilon)$, $c_p^0(\varepsilon)$ — коэффициенты захвата электронов на D^+ - и D^0 -центры и дырок на D^- - и D^0 -центры соответственно. Если скоро уровень Φ лежит ниже уровня ε_{q1} , определяемого соотношением $c_n^+(\varepsilon_{q1}) n = c_p^0(\varepsilon_{q1}) p$, то в первом канале темп рекомбинации определяется захватом электронов на D^+ -центры как менее вероятным процессом. Аналогично во втором канале темп рекомбинации определяется захватом дырок на D^- -центры, поскольку $\Phi > \varepsilon_{q2}$, где ε_{q2} задается уравнением $c_n^0(\varepsilon_{q2}) n = c_p^-(\varepsilon_{q2}) p$.

Показатель люкс-амперной характеристики имеет вид

$$\beta = 1 + \frac{[\rho(F_{p1}) + \rho(F_{p2})] T - [\rho(F_{n1}) + \rho(F_{n2})] T}{[\rho(F_{p1}) + \rho(F_{p2})] T + [\rho(F_{n1}) + \rho(F_{n2})] T + 2\rho(\Phi) \varepsilon_0}, \quad (21)$$

если $|d \ln \rho(\varepsilon)/d\varepsilon| T \ll 1$ в окрестности всех квазиуровней Ферми и $|d \ln \rho(\varepsilon)/d\varepsilon| \varepsilon_0 \ll 1$ в окрестности уровня Φ , и

$$\beta = 1 - \frac{(\varepsilon_p/\varepsilon_c) - 1}{(\varepsilon_p/\varepsilon_c) + 1}, \quad (22)$$

когда F_{n1} и F_{p2} находятся в хвостах соответствующих зон.

Заключение. Таким образом, в системах с квазинепрерывным спектром состояний в щели подвижности энергетическая зависимость коэффициентов захвата может существенно сказываться на процессах рекомбинации. Функция заполнения локальных центров приобретает качественно иной вид, чем в случае постоянных коэффициентов захвата. В частности, появляется область энергий, в которой заполнение центров увеличивается с ростом их энергии. В этой же сравнительно узкой полосе энергий сосредоточены наиболее эффективные центры рекомбинации. Показатель люкс-амперной характеристики зависит от вида ПС в окрестностях квазиуровней Ферми или, если последние находятся в хвостах ПС, от характерных энергий хвостов.

Список литературы

- [1] Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. Т. 1. М., 1982. 368 с.
- [2] Шкловский Б. И. // Письма ЖЭТФ. 1986. Т. 44. В. 2. С. 95—98.
- [3] Барановский С. Д., Карпов В. Г., Шкловский Б. И. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. В. 3. С. 278—288.
- [4] Роуз А. Основы теории фотопроводимости. М., 1966. 192 с.
- [5] Simmons J. G., Taylor G. W. // Phys. Rev. B. 1971. V. 4. N 2. P. 502—511.
- [6] Звягин И. П., Курова И. А., Ормонт Н. Н., Читая К. Б. // Изв. вузов СССР. Физика. 1987. В. 6. С. 7—17.
- [7] Okamoto H., Kida H., Hamakawa Y. // Phil. Mag. B. 1984. V. 49. N 3. P. 231—247.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Получена 14.06.1990
Принята к печати 17.08.1990