

Влияние прямого захвата дырок с испусканием оптических фононов на релаксацию примесной фотопроводимости в p -Si:B

© Д.В. Козлов^{†*}, С.В. Морозов^{†*}, В.В. Румянцев^{†*}, И.В. Тузов^{†*}, К.Е. Кудрявцев[†], В.И. Гавриленко^{†*}

[†] Институт физики микроструктур Российской академии наук, 603950 Нижний Новгород, Россия

[†] Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 23 мая 2014 г. Принята к печати 16 июня 2014 г.)

В работе представлена теоретическая модель, развитая для интерпретации результатов измерений релаксации примесной фотопроводимости в p -Si:B при импульсном оптическом возбуждении узкополосным перестраиваемым источником излучения в „греющих“ (10–500 В/см) электрических полях. Модель учитывает захват дырок на основное и нижнее возбужденное состояния бора с испусканием оптического фонона. Показано, что при учете этих процессов зависимость времени релаксации фотопроводимости от величины электрического поля может быть немонотонной.

1. Введение

Полупроводники, легированные мелко примесью с малой, до 100 мЭВ, энергией ионизации, на протяжении многих лет являются одними из основных объектов исследований, связанных с детектированием излучения дальнего инфракрасного (ИК) диапазона и возможностью создания инверсии населенностей с участием состояний мелких примесей [1,2]. При решении подобных задач важно знать не только энергетические спектры, но и времена жизни носителей в зоне и на уровнях примеси, а также механизмы захвата возбужденных носителей на ионизованные примесные центры. Одним из простых экспресс-методов получения информации о темпах захвата носителей является изучение кинетики релаксации примесной фотопроводимости (ФП).

Ранее [3,4] для определения времени захвата носителей в объемном кремнии, легированном бором, нами использовалась прямая методика исследования релаксации сигнала примесного фотоотклика при возбуждении узкополосным импульсным излучением с возможностью перестройки длины волны в диапазоне 11–17 мкм (энергия кванта 72–112 мЭВ). Данная методика не только дает информацию о времени жизни носителей в зоне, но и позволяет детально исследовать кинетику релаксации примесной ФП, которая может быть отлична от экспоненциальной. В работе [3] исследования релаксации примесной ФП выполнены в диапазоне электрических полей от 10 до 500 В/см при различных интенсивностях возбуждающего излучения.

Рост, наблюдаемый на начальном участке зависимости времени релаксации примесной ФП от электрического поля, $\tau(E)$, был обнаружен еще в работе [5]. В области электрических полей $E = 50$ –80 В/см рост времени во всех образцах существенно замедляется, а в некоторых образцах наблюдался спад времени релаксации [4].

Отметим, что на время релаксации ФП могут оказывать влияние как прямой захват на основное и возбуж-

денные состояния примесного центра, так и трансформация функции распределения в сильных электрических полях. Носители после фотоионизации в валентную зону узкополосным излучением в начальный момент имеют практически одинаковую энергию, т.е. функция распределения дырок в импульсном пространстве представляет собой эллипсоид вращения. Дальнейшая трансформация функции распределения обусловлена следующими процессами:

1) электрическое поле увеличивает параллельную направлению поля составляющую импульса дырок, тем самым вытягивая функцию распределения вдоль этого направления;

2) из-за рассеяния на акустических фононах функция распределения размывается в поперечном относительно вектора поля направлении; такое рассеяние делает распределение более изотропным;

3) набравшие в электрическом поле кинетическую энергию 65 мЭВ (энергия оптического фонона) дырки испускают оптический фонон и переходят на дно валентной зоны;

4) дырки из валентной зоны, набравшие энергию 19 и 50 мЭВ, могут захватываться на основное и глубокие возбужденные примесные состояния с испусканием оптического фонона, что приводит к уменьшению числа частиц в континууме.

Для описания эволюции функции распределения дырок в валентной зоне и динамики неравновесного тока решалось уравнение Больцмана, учитывающее все перечисленные выше процессы.

2. Метод расчета

Для оценки влияния на релаксацию фототока захвата носителей на локализованные состояния при испускании оптических фононов был выполнен расчет функции распределения дырок путем решения уравнения Больцмана с интегралом столкновений, включающим рассеяние на

* E-mail: dvkoz@ipmras.ru

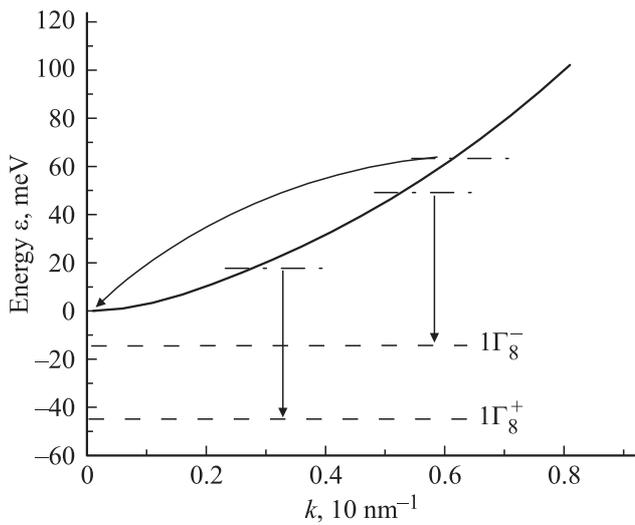


Рис. 1. Положение „фононных ловушек“ в подзоне тяжелых дырок. Сплошная кривая представляет закон дисперсии дырок. Горизонтальные штрихпунктирные линии в зоне — положение энергий ловушек и энергии дырки, равной энергии оптического фонона (фононная крыша). Стрелками показаны переходы с испусканием оптических фононов.

акустических и оптических фононах:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = & -eE \frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial p_z} + g_0 \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_0) \\ & + \int d^3\mathbf{q} W_{\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}} [f(\mathbf{q}, t) - f(\mathbf{p}, t)] \\ & - \frac{1}{\tau_1} \int d^3\mathbf{q} f(\mathbf{q}, t) |_{|\varepsilon(\mathbf{q}) - \varepsilon_1| \leq 1 \text{ meV}} \\ & + \frac{1}{\tau_2} \int d^3\mathbf{q} f(\mathbf{q}, t) |_{|\varepsilon(\mathbf{q}) - \varepsilon_2| \leq 1 \text{ meV}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $W_{\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}}$ — вероятность перехода дырки в единицу времени из состояния с квазиимпульсом \mathbf{p} в состояние с квазиимпульсом \mathbf{q} , E — напряженность электрического поля, $g_0 \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon_0)$ — скорость генерации носителей, при этом $g_0 \neq 0$ при $t < 7 \text{ ns}$ и $g_0 = 0$ при временах $t > 7 \text{ ns}$; $\varepsilon_0 = 50 \text{ мэВ}$ — начальная кинетическая энергия забрасываемых частиц. Четвертое и пятое слагаемые в правой части уравнения описывают захват носителей на основное (с энергией ионизации 46 мэВ) и нижнее возбужденное (с энергией ионизации 15.5 мэВ) локализованные состояния примеси с испусканием оптического фонона. При этом τ_1 и τ_2 — времена испускания оптических фононов при захвате носителей на основное и нижнее возбужденное состояния акцепторов соответственно. На основное состояние захватываются носители, обладающие кинетической энергией, близкой к 19 мэВ (нижняя „фононная ловушка“), а на нижнее возбужденное состояние захватываются дырки с энергией, близкой к 50 мэВ (верхняя „фононная ловушка“). Положение „ловушек“ в подзоне тяжелых дырок показано схематически на рис. 1. Энергия носителя ε увеличивает-

ся в электрическом поле; далее, когда энергия носителя становится близкой к 19 или 50 мэВ, происходит захват носителя на локализованное состояние. Число захваченных носителей за один пролет частицами „фононной ловушки“ есть

$$\delta f = \frac{\tau_{np}}{\tau_{1,2}} f(\mathbf{p}) |_{\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_{1,2}}, \quad (2)$$

где $f(\mathbf{p}) |_{\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_{1,2}}$ — функция распределения частиц в окрестностях „фононной ловушки“, τ_{np} — пролетное время, т.е. время в течение которого энергия носителя близка к энергии „фононной ловушки“ и носитель может испустить оптический фонон (время пролета „фононной ловушки“). Такое время определяется выражением

$$\tau_{np} = \frac{\Delta\varepsilon}{eE p_z \varepsilon(\mathbf{p})}, \quad (3)$$

где $\Delta\varepsilon \sim 1 \text{ мэВ}$ и, как видно из выражения (3), убывает с ростом электрического поля. Времена испускания τ_1 и τ_2 используются как подгоночные параметры.

При расчете использовалось аксиальное приближение, т.е. закон дисперсии дырок полагался изотропным в плоскости, перпендикулярной электрическому полю. Для этого в недиагональных элементах гамильтониана Латтинджера–Кона при расчете закона дисперсии дырок пренебрегли слагаемыми, пропорциональными $\gamma_2 - \gamma_3$ (γ_2, γ_3 — параметры Латтинджера). В таком приближении функция распределения дырок зависит от трех переменных: от времени, от величины компоненты квазиимпульса дырки вдоль электрического поля и от поперечной компоненты квазиимпульса. Вследствие симметрии системы функция распределения не зависит от направления квазиимпульса дырки в плоскости, перпендикулярной электрическому полю. Также при расчете считалось, что все носители распределены по подзоне тяжелых дырок, так как плотность состояний в ней по меньшей мере в 30 раз больше плотности состояний в подзоне легких дырок и в спин-отщепленной подзоне. В начальный момент времени носители распределены по эллипсоиду вращения в \mathbf{p} -пространстве, параметры которого определяются частотой возбуждающего излучения. С таким начальным условием уравнение Больцмана решалось методом конечных разностей.

3. Результаты расчета и обсуждение

В результате решения уравнения Больцмана были найдены временные зависимости функции распределения дырок в валентной зоне, концентрации частиц в континууме и плотности тока.

Как отмечалось выше, функция распределения дырок зависит от трех переменных: от времени, от величины компоненты квазиимпульса дырки вдоль электрического поля и от поперечной компоненты квазиимпульса. Со временем меняется как форма функции распределения, так и ее норма (интеграл от функции распределения

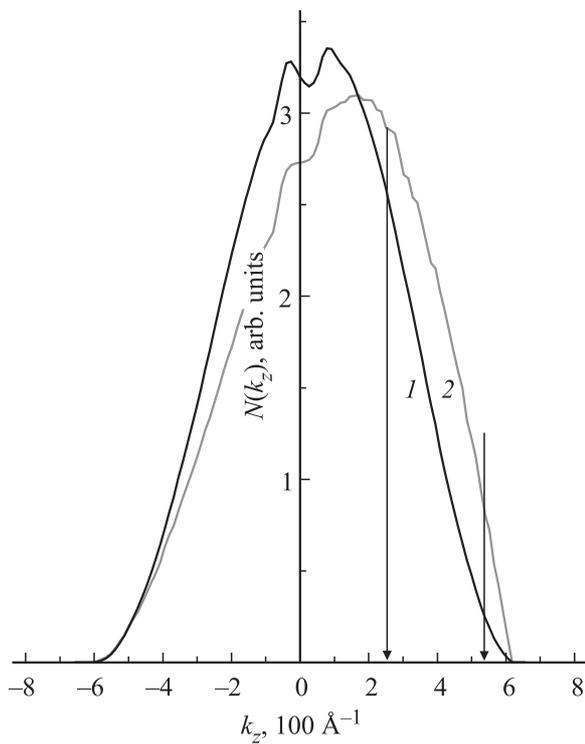


Рис. 2. Зависимость числа частиц (N) от величины проекции квазиволнового вектора на направление электрического поля (k_z). E , В/см: 1 — 25, 2 — 150.

по импульсному пространству), т.е. число частиц в континууме. Расчет показывает, что по прошествии от 1.5 нс (в поле 600 В/см) до 3 нс (в поле 25 В/см) форма функции распределения перестает меняться и изменяется только число частиц, т.е. процесс установления квазиравновесного распределения носителей в зоне на порядок быстрее, чем процесс захвата на локализованные состояния. На рис. 2 представлен вид квазиравновесной функции распределения дырок $N(k_z)$ для двух значений величины электрического поля. Стрелками показаны положения „фононных ловушек“. Видно, что число частиц N , достигающих нижней ловушки (~ 19 мэВ), при увеличении поля с 25 до 150 В/см увеличивается примерно на 10%, а число частиц, достигающих верхней ловушки, — в несколько раз (см. рис. 2).

Как отмечалось выше, число захваченных носителей за один пролет „фононной ловушки“ определяется выражением (2). Если время набора носителем энергии оптического фотона в электрическом поле (τ_E) много меньше времени релаксации фотопроводимости, выражение для скорости захвата частиц из континуума с учетом соотношения (2) можно записать в виде

$$\frac{df(\mathbf{p})d^3\mathbf{p}}{dt} = \frac{1}{\tau_E} \frac{\tau_{np}}{\tau_{1,2}} \frac{\Delta\epsilon p^2}{d\epsilon(\mathbf{p})/dp} f(\mathbf{p}) \Big|_{\epsilon(\mathbf{p})=\epsilon_{1,2}}, \quad (4)$$

$\Delta\epsilon = 1$ мэВ. Видно, что скорость захвата частиц определяется временем пребывания носителей в окрестностях фононной ловушки, числом частиц, попадающих

в ловушку, и периодом возвращения частиц в ловушку, который равен τ_E . Время τ_{np} обратно пропорционально величине поля (см выражение (3)), т.е. с ростом поля набирающие импульс носители меньшее время находятся в окрестностях „фононных ловушек“ (т.е. сфер соответствующей кинетической энергии 19 и 50 мэВ в импульсном пространстве) и соответственно с меньшей вероятностью испускают оптический фон. Частота возвращения носителя в окрестность ловушки $1/\tau_E$, равная обратному времени разогрева дырки до энергии 65 мэВ (энергия оптического фотона), зависит от величины электрического поля сублинейно, причем в больших полях такая зависимость стремится к линейной. Следовательно, величина τ_{np}/τ_E в выражении (4) убывает с ростом поля и в сильных полях стремится к постоянной величине.

Число частиц, попадающих в нижнюю и верхнюю фононные ловушки, зависит от величины электрического поля по-разному. Средняя кинетическая энергия частиц после установления квазиравновесной функции распределения оказывается близка к 19 мэВ для широкого диапазона значений электрического поля, поэтому число частиц, проходящих „нижнюю фононную ловушку“, мало меняется с ростом поля (см. рис. 2). Напротив, с ростом поля все большее число носителей достигает „верхней фононной ловушки“ (см. рис. 2).

Таким образом, форма зависимости скорости захвата частиц на основное состояние (в нижнюю ловушку) от величины поля должна совпадать с формой зависимости τ_{np}/τ_E , т.е. скорость захвата должна сначала убывать с ростом поля, а затем стремиться к постоянной величине. Зависимость скорости захвата на возбужденное состояние от электрического поля иная: в больших полях она увеличивается с ростом величины поля.

Проведенный точный расчет релаксации ФП подтвердил представленные выше оценки. На рис. 3 приведены

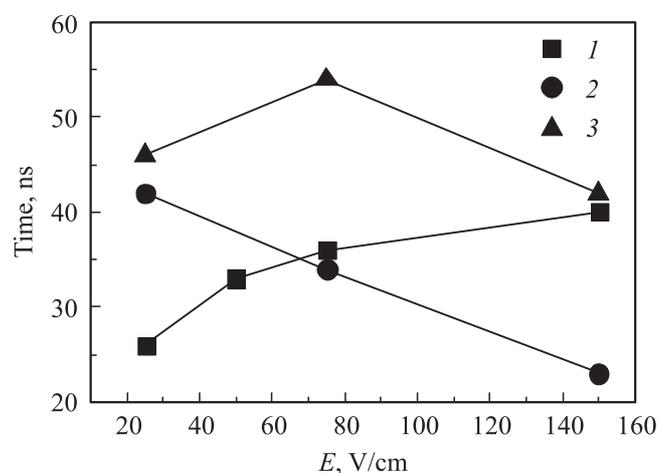


Рис. 3. Рассчитанные времена релаксации примесной фотопроводимости при различных временах испускания оптических фотонов: 1 — $\tau_1 = 1$ пс и $\tau_2 \gg \tau_1$; 2 — $\tau_2 = 1$ пс и $\tau_1 \gg \tau_2$; 3 — $\tau_{1,2} = 2$ пс.

рассчитанные времена релаксации примесной ФП в Si : B при различных значениях времен захвата на локализованные состояния. Точки 1 соответствуют случаю $\tau_1 = 1$ пс и $\tau_2 \gg \tau_1$, т.е. захват идет только на основное состояние акцепторов. Видно, что в этом случае время релаксации в малых полях растет с увеличением напряженности электрического поля, а в больших полях время релаксации практически не меняется (насыщение зависимости времени релаксации). При захвате дырок только на нижнее возбужденное состояние (точки 2 на рис. 3) время релаксации ФП падает с ростом поля. В случае сравнимых времен захвата на основное и возбужденное состояния наблюдается немонотонная зависимость времени захвата от электрического поля (точки 3 на рис. 3).

4. Заключение

Учет захвата носителей на локализованные состояния акцепторов с испусканием оптических фононов показал, что в электрическом поле > 75 В/см характер зависимости времени релаксации примесной фотопроводимости $\tau(E)$ может быть разным. В зависимости от соотношения времен захвата носителей на основное (τ_1) и нижнее возбужденное (τ_2) состояния акцепторов возможно как насыщение роста времени релаксации при увеличении электрического поля, так и немонотонное поведение времени, наблюдающееся в эксперименте [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 13-02-01154 и 14-02-01229, РАН, РФ НШ-1214.2014.2 и „ЦКП ИФМ РАН“.

Список литературы

- [1] И.В. Алтухов, М.С. Каган, К.А. Королев, М.А. Одноблюдов, В.П. Синис, Е.Г. Чиркова, И.Н. Ясиевич. ЖЭТФ, **115** (1), 89 (1999).
- [2] H.-W. Hübers, S.G. Pavlov, V.N. Shastin. *Semicond. Sci. Technol.*, **20**, 211 (2005).
- [3] В.В. Румянцев, С.В. Морозов, К.Е. Кудрявцев, В.И. Гавриленко, Д.В. Козлов. ФТП, **46** (11), 1414 (2012).
- [4] В.В. Румянцев, С.В. Морозов, К.Е. Кудрявцев, В.И. Гавриленко, Д.В.Козлов. ФТП, **47** (11), 1472 (2013).
- [5] Э.Э. Годик, Ю.А. Курицын, В.П. Синис. ФТП, **12**, 351 (1978).

Редактор Л.В. Шаронова

The influence of the direct capture of holes with emission of optical phonons on relaxation impurity photoconductivity in *p*-Si : B

D.V. Kozlov⁺⁺, S.V. Morozov⁺⁺, V.V. Rumyantsev⁺⁺, K.E. Kudryavtsev⁺, V.I. Gavrilenko⁺⁺

⁺ Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences,
603950 Nizhny Novgorod, Russia
^{*} Lobachevsky State University,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract The paper presents a theoretical model for interpretation of experimental data on relaxation of impurity photoconductivity in *p*-Si : B under pulsed optical excitation in the strong (10–500 V/cm) electric fields. The model takes into account the direct capture of holes in the ground and lower excited states of boron via optical phonon emission. It is shown that due to these processes the dependence of photoconductivity relaxation time on the electric field can be nonmonotonic.