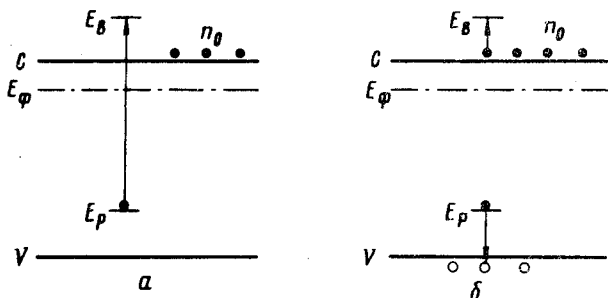


НОВОЕ ОБЪЯСНЕНИЕ РЕКОМБИНАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННЫХ ЯВЛЕНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

М.К.Шейнкман

Показано, что рекомбинационно-стимулированные процессы диффузии, распада кластеров и др. в полупроводниках, которые связывались ранее с передачей центру энергии безызлучательной рекомбинации, могут быть объяснены возбуждением электрона (или дырки) в центре на антисвязывающую орбиталь. Рассмотрены эксперименты по идентификации предложенного механизма.

Уже в начале 60-х годов был обнаружен новый класс неравновесных процессов в полупроводниках: рождение или исчезновение центров в результате генерации (светом или инжекцией) электронов и дырок с тепловой энергией ^{1, 2}. Из-за малости энергии, выделяемой при рекомбинации в полупроводниках (1 ÷ 3,5 эВ), эти процессы не происходят в идеальной решетке, как, например, в ШГК ³, а являются результатом фотохимических реакций между существующими дефектами и примесями: диссоциацией донорно-акцепторных пар, кластеров, донорных ассоциатов, миграцией доноров из стоков в объем кристалла, ассоциацией мелких доноров с образованием глубокого центра ^{4, 5}. Их причиной является перезарядка центров, участвующих в реакциях, что ведет к изменению кулоновского взаимодействия или молекулярной связи между компонентами сложного центра ^{6, 4}.



Возбуждение электрона из основного (E_p) в возбужденное (E_B) состояние центра, соответствующее антисвязывающей орбитали, в случаях: *a* – равновесном; *б* – неравновесном, при инжекции дырок

В 1974 г. Ланг и Кимерлинг ⁷ открыли явление рекомбинационно-стимулированной диффузии (РСД), состоящее в том, что отжиг некоторых дефектов в условиях рекомбинации происходит с существенно уменьшенной энергией активации ($E_{РСД}$) по сравнению с равновесной (E_T). Разность:

$$E_T - E_{РСД} = E_P \tag{1}$$

оказалась близкой к глубине залегания электронного уровня отжигающегося центра относительно более удаленной зоны – E_P (рисунок). Подобный эффект в дальнейшем наблюдался для ряда центров в GaAs, GaP, SiC ^{8, 9}, что позволило уточнить условие (1):

$$E_{РСД} = E_T - E_P + \Delta, \tag{1a}$$

где значение Δ достигало 0,1 эВ ⁸. Другими характерными особенностями РСД являются ^{8, 9}: а) наличие у ряда центров атермической диффузии $E_{РСД} = 0$; б) линейная зависимость скорости РСД от концентрации основных носителей n_0 ; в) насыщение зависимости темпа РСД от скорости рекомбинации r .

Основанное на уравнении (1) и представлявшееся очевидным объяснение эффекта РСД, данное в ⁷ и принятое затем другими исследователями ^{8,9}, состоит в том, что величина E_p есть энергия, выделяющаяся при безызлучательном многофононном захвате на центр носителя. Эта энергия полностью (формула (1)) или частично (формула (1a)) передается центру и приводит к эффективному уменьшению барьера для диффузии E_T . Заметим, что известная трудность такого объяснения ⁸ состоит в том, что за время диффузионного скачка избыточная энергия не должна рассеяться в решетке.

Цель настоящего сообщения – показать, что существует принципиально иное, *альтернативное*, объяснение РСД, всех ее характеристик, не основанное на многофононном процессе. Оно опирается на два предположения.

1. РСД (или какой-либо другой элементарный акт: распад ДА-пары и т. д.) может иметь место у центров, имеющих специфический возбужденный уровень, расположенный в зоне проводимости (например, для глубокого акцептора (рисунок)), в валентной зоне или в запрещенной зоне. Диффузионный скачок происходит при возбуждении центра, когда электрон переходит с уровня E_p на уровень E_B (рисунок). Уровень E_B соответствует, например, антисвязывающей орбитали. На возможность миграции дефекта при возбуждении носителя в антисвязывающее состояние уже указывали различные авторы ¹⁰⁻¹². В ¹² был выполнен расчет вероятности подобного процесса (диссоциативного прилипания электрона к молекуле), показавший достаточно большую его вероятность. В общем случае дефект, находящийся в равновесии в минимуме потенциальной энергии в решетке, при возбуждении центра оказывается в положении седловой точки и совершает диффузионный скачок. Таким образом предлагаемый механизм подобен механизму Бургузна ¹³, но для возбужденного, а не перезаряженного центра.

2. Второе существенное предположение состоит в том, что равновесная термическая диффузия рассматриваемых дефектов происходит не по обычному механизму термического преодоления барьера невозбужденным центром, а по более легкому пути (с меньшей энергией активации) – вследствие термического возбуждения электрона в центре на уровень E_B , т. е. по механизмам, описанным в п. 1. Это даст энергию активации равновесной диффузии (если уровень Ферми находится между уровнями E_p и E_B) – (рис. а)

$$E_T = E_p + E_B. \quad (2)$$

В неравновесных условиях при инжекции дырок последние захватываются на уровень E_p . Для возбуждения центра теперь достаточно, чтобы равновесный электрон термически возбудился на уровень E_B . Следовательно, энергия активации этого процесса (и процесса РСД) будет – (рис. б)

$$E_{\text{РСД}} = E_B + E_{\Phi} = E_T - E_p + E_{\Phi}, \quad (3)$$

где E_{Φ} – расстояние равновесного уровня Ферми от дна c -зоны.

Таким образом, мы получили условие Кимерлинга – Ланга (1), если $E_{\Phi} \approx 0$, и более общее условие (1a), где Δ равняется E_{Φ} . Скорость РСД:

$$R \propto r w \exp\left(-\frac{E_T - E_p + E_{\Phi}}{kT}\right) \propto r w n_0 \exp\left(-\frac{E_T - E_p}{kT}\right), \quad (4)$$

где n_0 — концентрация равновесных электронов; w — предэкспоненциальный фактор в вероятности диффузионного скачка. Легко видеть, что в описанном процессе имеют место все особенности РСД: $R \propto n_0$; R насыщается с ростом r при насыщении центров дырками; атермический процесс будет иметь место в случае, если уровень E_B лежит ниже E_Φ в запрещенной зоне или s -зоне: захват дырки немедленно ведет к возбуждению центра.

Важными следствиями рассмотренного механизма РСД, допускающими его непосредственную экспериментальную проверку, являются: 1) зависимость энергии активации $E_{\text{РСД}}$ от E_Φ в соответствии с (3) и (4); 2) возможность наблюдать атермический процесс РСД при прямом оптическом (селективном) возбуждении центра — переводе электрона с уровня E_p на уровень E_B квантом $h\nu = E_p + E_B$ — рис. а. (Это же возможно и при возбуждении электрона на другой более высоколежащий уровень с последующим переходом его на уровень E_B); 3) возможность наблюдения РСД как для центров безызлучательной, так и излучательной рекомбинации (в отличие от многофононного механизма ^{7, 8}), поскольку захват электрона со дна s -зоны на уровень E_p может быть излучательным. Такая ситуация наблюдалась в SiC ⁹; 4) зависимость энергии активации равновесной диффузии E_T от E_Φ , в случае, когда E_Φ опускается ниже уровня E_p : $E_T = E_\Phi + E_B$, что соответствует перезарядке центра. Зависимость E_T от заряда центра хорошо известна для ряда центров ^{8, 9}.

Важно отметить в заключение, что обнаруженный еще в 1968 г. Ф.Люти ¹⁴ процесс атермической (или термической, но с малой энергией активации) переориентации в решетке KCl F_A -центров (вакансия Cl + атом Na или Li в соседнем катионном узле) при прямом оптическом возбуждении электрона в центре в $2s$ -состояние является хорошим примером рассмотренного нами рекомбинационно-стимулированного процесса, который наблюдался в диэлектрическом кристалле. Как следует из настоящей статьи, аналогичные процессы в полупроводниках должны обладать характерными признаками многофононного механизма РСД ^{7, 8}, так что для их дискриминации во всех случаях необходимо проведение специальных исследований.

Литература

1. Korsunskaya N.E., Markevich I.V., Sheinkman M.K. Phys. Stat., Sol., 1966, 13, 25.
2. Корсунская Н.Е., Маркевич И.В., Шейнкман М.К. ФТТ, 1968, 10, 522.
3. Луцук Ч.Б., Витол И.К., Эланго М.А. УФН, 1977, 122, 223.
4. Sheinkman M.K., Korsunskaya N.E., Markevich I.V., Torchinskaya T.V. J. Phys. Chem. Solids, 1982, 43, 475.
5. Шейнкман М.К., Корсунская Н.Е., Маркевич И.В., Торчинская Т.В. ФТП, 1980, 14, 438.
6. Шейнкман М.К. Письма в ЖЭТФ, 1972, 15, 673.
7. Lang D.V., Kimerling L.C. Phys. Rev. Lett., 1974, 33, 489.
8. Kimerling L.C. Solid Stat Electr., 1978, 21, 1391.
9. Dean P.J. Chooye W.Y. Adv. Phys., 1977, 26, 1.
10. Кув А.Е., Умарова Ф.Т. ФТП, 1970, 4, 571.
11. Тележкин В.А., Толпыго К.Б., Шаталов В.М. Труд. Междун. конф. по радиац. физике полупроводников и родств. материалов, 1979, Тбилиси, с. 452.
12. Елисеев П.Г., Завестовская И.А., Полуэктов И.А. Квантовая электроника, 1978, 5, 203.
13. Bourgojn J.C., Corbett J.W. Phys. Lett., 1972, 38A, 135.
14. Lüty F. Physics of Colour Centers (New York, Academic Press, 1968), 184.