

зон смещается в сторону больших энергий, а нижняя — в сторону меньших; центральная группа зон смещается слабее, чем крайние.

1. Merlin R. // IEEE J. Quant. Electron. — 1988. — 24. — P. 1791.
2. Hjalmarsson H.P. // Superlatt. Microstruc. — 1985. — 1. — P. 379.
3. Beltram F., Capasso F. // Phys. Rev. B. — 1988. — 38. — P. 3580.
4. Arsenault C.J., Meunier M. // J. Appl. Phys. — 1989. — 66. — P. 4305.

Одержано 16.02.95

ТУНЕЛЬНІ СПЕКТРИ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ
НАДГРАТОК ФІБОНАЧЧІ З ДОМІШКАМИ
У ПОТЕНЦІАЛЬНИХ БАР'ЄРАХ

А. М. Король

Резюме

Методом трансферних матриць розраховується коефіцієнт тунельної трансмісії електрона крізь супергратку Фібоначчі. Останню, як

показано, можна утворити легуванням періодичної надгратки глибокими домішками. Аналізується залежність енергетичних спектрів розглядуваної структури від параметрів розсіюючих центрів.

TUNNEL SPECTRA OF SEMICONDUCTOR FIBONACCI
SUPERLATTICES WITH IMPURITIES
IN THE POTENTIAL BARRIERS

A. N. Korol

Summary

The rate of tunnelling transmission of an electron across the Fibonacci superlattice is evaluated using the transfer matrix technique. The superlattice can be created by doping a periodical superlattice with deep-laying impurities. The dependence of the energetic spectra of the structure considered on the parameters of the scattering centers is analyzed.

ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЛОКАЛЬНЫЕ
КОЛЕБАНИЯ И МНОГОФОНОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В. Н. СОЛОВЬЕВ

УДК 539.2

© 1995 г.

Криворожский государственный пединститут
(324086 Кривой Рог 86, просп. Гигарина, 54)

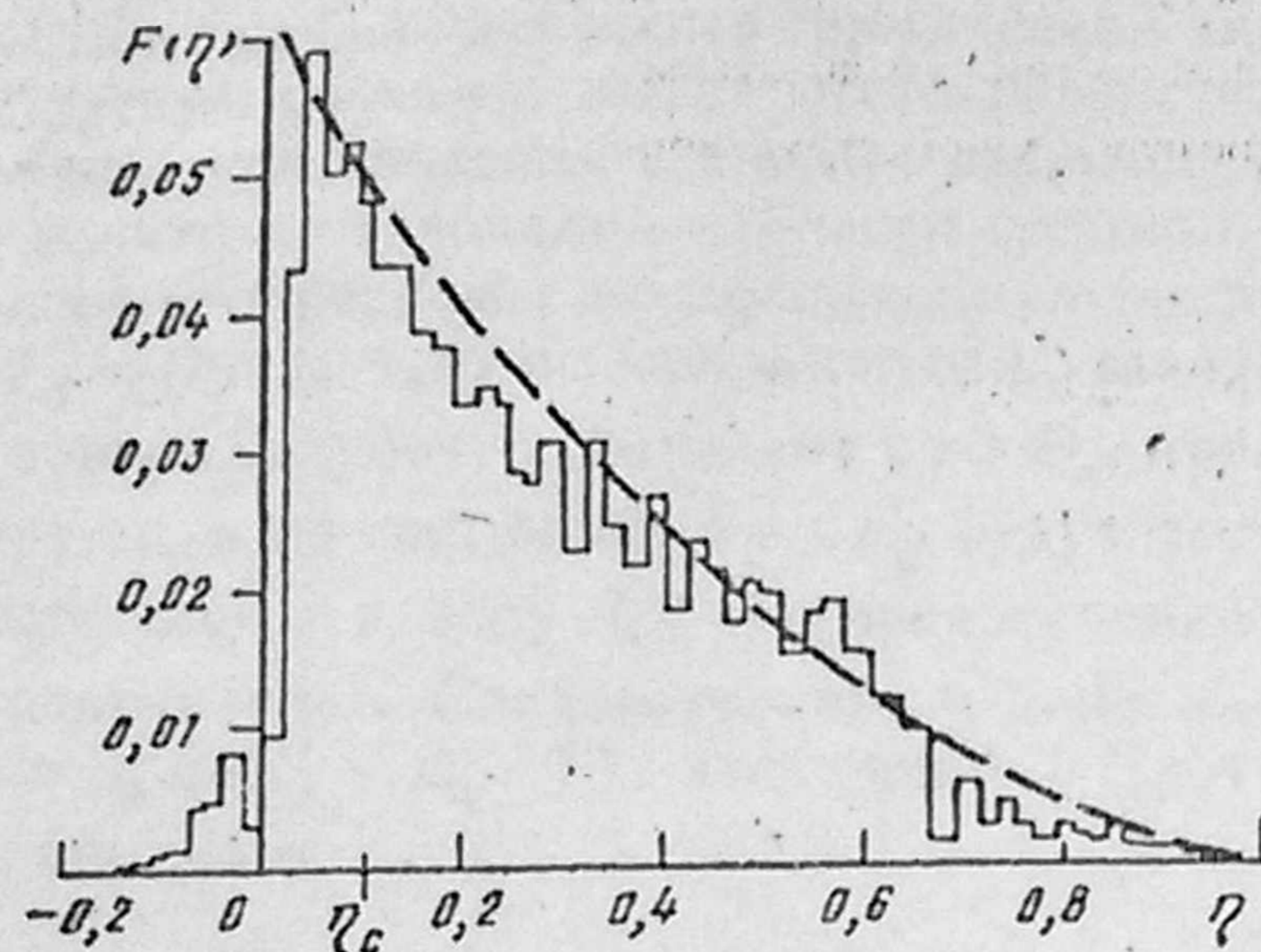
Установлено, что в некристаллических полупроводниках существуют высокоэнергетические локальные колебания (ВЛК). Они реализуются при флуктуациях параметров структуры, приводящих к ужесточению атомных потенциалов. Изучена их природа и статистика в аморфном кремнии. Показано, что, несмотря на малую относительную концентрацию, ВЛК могут конкурировать с процессами многофононного захвата при безызлучательной рекомбинации носителей.

Экспериментально установлено, что рекомбинация носителей в некристаллических полупроводниках определяется в основном безызлучательными процессами [1]. Однако механизмы этих процессов до сих пор остаются невыясненными. В кристаллических полупроводниках рекомбинация облегчается за счет глубоких центров [2], позволяющих уменьшить число фононов, испускаемых в одном акте. Для аморфных материалов роль запрещенной зоны играет щель подвижности, внутри которой имеется квазинепрерывный спектр уровней, связанных с ло-

кализированными состояниями, и представление о рекомбинационных центрах теряет смысл.

В недавних работах [3, 4] постулируется, что эффективными каналами безызлучательной рекомбинации являются редкие скопления центров, образующие почти эквидистантные энергетические лестницы с достаточно малой высотой ступеней. Такие лестницы существенно облегчают процессы испускания фононов с суммарной энергией, равной ширине щели подвижности. К сожалению, авторами [3, 4] не рассматривался вопрос о природе состояний в щели подвижности.

В настоящей работе мы хотим обратить внимание на то, что вследствие структурного беспорядка в аморфных веществах существенно искажается спектр атомных колебаний. Поэтому, наряду с хорошо изученными низкоэнергетическими колебаниями [5], могут существовать и ВЛК. Такие колебания реализуются при флуктуациях структуры, обеспечивающих появление достаточно жестких атомных потенциалов, у которых хотя бы одна из локальных квазиупругих мод заметно превышает



Гистограмма распределения квазиупругой константы для выбранной моды в α -Si, η_c — значение константы, близкое к среднему в материале. Штриховая линия соответствует сглаженному распределению (1)

соответствующее среднее значение в веществе. Несмотря на малую относительную концентрацию, ВЛК могут играть важную роль в ряде явлений. В качестве примера мы рассматриваем многофононные переходы электронов в аморфных полупроводниках.

Исследование локальных атомных потенциалов производилось для ансамбля из 5000 равновероятных случайных конфигураций квазимолекул α -Si и α -Ge. Пробный кластер выбирался размером в две координационные сферы (17 атомов). Аморфная фаза перестраивалась из кластеров кристаллического кремния по алгоритму, описанному в [5]. Потенциал межатомного взаимодействия выбирался в форме Лифсона — Варшела [6] и включал радиальные, угловые и крутильные взаимодействия атомов.

Основное направление моделирования [7] состоит в поиске флуктуаций локальных мод атомного движения. В качестве флуктуирующих параметров рассматриваются коэффициенты в разложении атомного потенциала $V(x) = \epsilon_0 [\eta (x/r_0)^2 + t (x/r_0)^3 + (x/r_0)]$, где x — выбранная локальная мода. Характерная атомная длина r_0 выбрана для обезразмеривания коэффициентов η, t , связанных с производными потенциала в точке экстремума, ϵ_0 — энергия порядка атомной.

Для каждого из 5000 случайным образом сформированных фрагментов структуры были найдены коэффициенты η и t для всех мод его движения.

На рисунке приведена гистограмма распределения локальной упругой константы по одной из нормальных мод для α -Si. Картина по другим модам, а также в случае α -Ge не имеет принципиальных различий. Из гистограммы следует, что наряду со значениями квазиупругих констант η , близких к их значению

в кристалле η_c , существует конечная вероятность для значений как $\eta \ll \eta_c$, так и $\eta \gg \eta_c$.

Опишем сглаженную функцию распределения “жестких” ($\eta \gg \eta_c$) потенциалов функцией

$$F(\eta) = A \exp(-\eta / \sigma_\eta). \quad (1)$$

где $A = 10,2$, $\sigma_\eta = 0,3$.

Рассмотрим вероятность электронного перехода между состояниями, разделенными энергией E , много большей характерной энергии фононов $\hbar\omega_0$. При нулевой температуре в пренебрежении поляронным сдвигом искомую вероятность можно записать в виде [3, 4]

$$P = \exp(-\gamma E / \hbar\omega_0). \quad (2)$$

Здесь $\gamma \approx 1$ — безразмерная константа связи электронов с фононами.

Наше основное утверждение состоит в том, что электронный переход осуществляется в состояние с $\eta \gg \eta_c$ и в результате перехода испускается “жесткий” фонон с энергией $\hbar\omega \gg \hbar\omega_0$. Тогда

$$P \sim \exp(-\gamma E / \hbar\omega) \exp(-\eta / \sigma_\eta), \quad (3)$$

где $\omega = \omega_0 \eta^{1/2}$. Следовательно, вероятность перехода растет с увеличением энергии фонона. С другой стороны, вероятность существования такого фонона быстро уменьшается с ростом η . Поэтому имеется оптимум по энергии “жесткого” фонона. Такие оптимальные замороженные жесткие конфигурации и определяют безызлучательную рекомбинацию в некристаллических полупроводниках. Оптимум величины

$$\exp\{-\gamma E / \hbar\omega - (\omega / \omega_0)^2 / \sigma_\eta\} \quad (4)$$

дает искомое значение $\omega = \omega_0 (\gamma E / 2 \hbar\omega_0 \sigma_\eta)^{1/2}$. Очевиден главный выигрыш, обеспечиваемый “жесткими” фононами: уже при $\omega = 2\omega_0$ $E / \hbar\omega_0 \gg 1$ показатель степени в экспоненте (4) уменьшается почти в два раза.

С ростом температуры возможны термоактивированные переходы захваченных носителей в направлении к зоне. В этом случае вероятность (4) преобразуется к виду

$$P = \exp\{-\gamma E / \hbar\omega - (\omega / \omega_0)^2 / \sigma_\eta - E/T\}. \quad (5)$$

Теперь эффективными в рекомбинационном потоке будут только те “жесткие” потенциалы, для которых

время захвата не превышает время термической активации. Другими словами, имеет место равенство $\rho t = 1$, t — время установления теплового равновесия свободных носителей с локализованными состояниями. Это условие определяет демаркационную энергию $E_d = T_d \ln(\rho_0)$, такую, что носители, захваченные из зоны на глубокие состояния с $\epsilon > E_d$, рекомбинируют, а из состояний с $\epsilon < E_d$ будут термически выброшены в зону (ρ_0 — предэкспоненциальный множитель). Следовательно, в зоне находится $n = n_0 \exp(-E_d/T)$ электронов. Плотность тока при этом

$$j \sim n_0 \exp(-E_d/T) \sim \exp\{-T_d \ln(\rho_0)/T\} = (\rho_0 t)^{-T_d/T} \sim t^{-1+T/(T+T_d)} \quad (6)$$

где $T_0 = \hbar\omega/\gamma + (2\hbar\omega E^{1/2} \sigma_{\eta}/\gamma)^{3/2}$, $\rho_0^{-1} \approx 10^{-12}$ с, n_0 — концентрация электронов на краю подвижности.

Сопоставим полученные результаты с экспериментальными данными по температурной зависимости переходной фотопроводимости в области низких температур ($T < \hbar\omega_0/2$) [8].

При изучении переходной фотопроводимости чаще всего применяется времяпролетный метод измерения дрейфовой подвижности. Пакет носителей возбуждается вблизи одного из электродов, нанесенных на образец; измеряется ток, возникающий в результате переноса носителей к другому электроду. В простейших условиях измерения непосредственно дают время, необходимое для переноса носителей, и отсюда определяется подвижность. При наличии глубоких ловушек времена переноса характеризуются очень широким распределением (дисперсионный транспорт) и плотность тока изменяется со временем по степенному закону:

$$j \sim t^{-1+\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (7)$$

Заметим, что найденное нами соотношение (6) приводит к экспериментально наблюдаемой зависимости (7).

Таким образом, результаты приведенного рассмотрения показывают, что в аморфных полупроводниках имеет место значительная концентрация жестких квазиупругих констант, названных "жесткими замороженными" фононами. Имея малую относительную концентрацию, они могут играть

существенную роль в процессах многофононного захвата. В этом случае более вероятным оказываются процессы перехода носителей с испусканием жестких фононов, чем многофононные процессы. Это и обеспечивает экспоненциально большой поток рекомбинации.

1. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. — М.: Мир, 1982.
2. Милнс А. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. — М.: Мир, 1978.
3. Шкловский Б.И. // Письма в ЖЭТФ. — 1986. — 44, вып. 2. — С. 95 — 98.
4. Барановский С.Д., Карпов В.Г., Шкловский Б.И. // ЖЭТФ. — 1988. — 94, вып. 3. — С. 278 — 288.
5. Гальперин Ю.М., Карпов В.Г., Соловьев В.И. // Там же. — С. 373 — 384.
6. Tomassini N., Conti A., Fasto J. et al. // J. Non-Cryst. Solids. — 1987. — 93, N 1. — P. 241 — 256.
7. Дядько Г.А., Карпов В.Г., Соловьев В.И., Хрисанов В.А. // ФТТ. — 1989. — 31, вып. 4. — С. 148 — 155.
8. Физика гидрогенизированного аморфного кремния. / Под ред. Дж. Джоунопулоса, Дж. Люковски. — М.: Мир, 1988.

Получено 16.02.95

ВИСОКОЕНЕРГЕТИЧНІ ЛОКАЛЬНІ КОЛИВАННЯ ТА БАГАТОФОНОННІ ПЕРЕХОДИ В АМОΡФНИХ НАПІВПРОВІДНИКАХ

В.М. Соловйов

Резюме

Встановлено, що в некристалічних напівпровідниках мають місце високоенергетичні локальні коливання (ВЛК). Вони реалізуються при флуктуаціях параметрів структури, які забезпечують наявність жорстких атомних потенціалів. Вивчена їх природа та статистика в аморфному кремнії. Показано, що, незважаючи на їх малу відносну концентрацію, ВЛК можуть конкурувати з процесами багатфононного полоніння при безвипромінювальній рекомбінації носіїв.

HIGH-ENERGY LOCAL VIBRATIONS AND MANYPHONONS TRANSITIONS IN AMORPHOUS SEMICONDUCTORS

V.N. Soloviev

Summary

It is established, that in noncrystalline semiconductors the high-energy local excitations exist. They are realized at fluctuations of parameters of structure, resulting in harder of atomic potentials. Their natures and statistics in amorphous silicon is investigated. It is shown, that despite small relative concentration, high-energy local excitations can compete with processes of manyphonons capture at nonradiative recombination of carriers.