

УДК 621.3

ОЖЕ-ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А.С. МУСАЕЛЯН

Институт радиофизики и электроники НАН Армении

(Поступила в редакцию 3 февраля 2004 г.)

Рассмотрен Оже-захват основных носителей заряженной краевой дислокацией в электронном полупроводнике, в случае слабого насыщения оборванных связей дислокации электронами. Получена зависимость радиуса Оже-захвата от глубины залегания одномерной дислокационной зоны и температуры. Приведена оценка значений концентраций свободных электронов, при которых Оже-захват является преобладающим механизмом безызлучательной рекомбинации на дислокации.

Различные методы исследования люминесценции в квантовых ямах гетероструктур на основе соединений нитрида галлия [1] показали, что краевая дислокация действует как центр безызлучательной рекомбинации, гася люминесценцию. Очевидно, это связано с наличием большого числа оборванных связей вблизи ядра краевой дислокации, создающих глубокую узкую энергетическую зону в запрещенной зоне полупроводника.

Вероятность безызлучательного перехода основных носителей на дислокацию, обусловленная взаимодействием с решеткой (многофононный переход), была рассчитана в работе [2]. При низких температурах, когда вероятность многофононных переходов уменьшается, и при больших концентрациях носителей может преобладать ударный механизм безызлучательной рекомбинации – Оже-процесс, с передачей энергии свободным носителям [3]. Вычисление вероятности Оже-захвата электрона на краевую дислокацию в полупроводнике n -типа и выявление условий преобладания этого механизма безызлучательной рекомбинации является целью данной работы.

Потенциал заряженной дислокации $U(\rho)$ аппроксимируется двумерной прямоугольной ямой глубины U_0 и радиуса порядка постоянной решетки a , окруженной электростатическим барьером. Для достаточно высоких температур, соответствующих слабому заполнению оборванных связей, электростатический потенциал заряженной краевой дислокации описывается выражением [4]

$$U(\rho) \approx 2\alpha kT \ln(2\rho_D/\gamma\rho), \quad a < \rho < \rho_D, \quad (1)$$

где $\alpha = (e^2 / \epsilon \kappa T) \ll 1$ есть параметр, характеризующий степень заполнения оборванных связей (ϵ – диэлектрическая постоянная, $c(T)$ – расстояние между заполненными связями), ρ_D – дебаевский радиус экранирования, $\ln \gamma = 0.577$ – постоянная Эйлера.

Захват зонного носителя на дислокацию с передачей энергии другому электрону описывается при помощи двухчастичных волновых функций. Начальное состояние системы описывается волновыми функциями прошедшего барьер электрона зоны проводимости Ψ_1^i и свободного электрона Ψ_2^i , а конечное – волновыми функциями электрона в одномерной дислокационной зоне и “горячего” свободного электрона Ψ_2^f .

Волновая функция зонного электрона в поле дислокации Ψ_1^i находится из решения уравнения Шредингера с потенциалом (1) в квазиклассическом приближении [4]. В цилиндрических координатах (ρ, φ, z) с осью z вдоль линии дислокации она имеет вид

$$\Psi_{k,m,k_z} = \left(\frac{k}{4\pi R L_z} \right)^{1/2} e^{(ik_z z + im\varphi)} \frac{1}{[k(\rho)]^{1/2}} \exp \left(- \int_{\rho}^{\rho_m(k)} k(\rho) d\rho \right), \quad a < \rho < \rho_m(k), \quad (2)$$

где $k = (2\mu W / \hbar^2)^{1/2}$ – радиальное волновое число, $W = E - \hbar^2 k_z^2 / 2\mu$, m – магнитное квантовое число, k_z – волновое число вдоль оси z , μ – эффективная масса электрона, $k(\rho) = \{2\mu \hbar^{-2} [W - U(\rho) - \hbar^2 m^2 / 2\mu \rho^2]\}^{1/2}$, а точка поворота $\rho_m(k)$ определяется из условия $k(\rho_m) = 0$. Волновая функция (2) нормирована на цилиндр радиусом R и длиной L_z . Так как вероятность прохождения барьера уменьшается при увеличении m из-за увеличения центробежного потенциала $\hbar^2 m^2 / 2\mu \rho^2$, то имеет смысл учитывать только захват электронов с $m = 0$ в начальном состоянии.

Волновая функция захваченного в дислокационную зону электрона Ψ_1^f описывает двумерную локализацию на основном уровне E_D и свободное движение вдоль дислокации:

$$\Psi_1^f = (\beta / \pi \rho L_z)^{1/2} e^{-\beta \rho} e^{(ik_z^f z + im_1^f \varphi)}, \quad (3)$$

где $\beta^{-1} = (\hbar^2 / 2\mu E_D)^{1/2}$ – характерный размер двумерной локализации электрона.

Волновые функции свободного электрона (Ψ_2^i, Ψ_2^f) описывают парциальные волны:

$$\Psi_2^{i,f} = (k_2^{i,f} / 2RL_z)^{1/2} J_{m_2^{i,f}}(k_2^{i,f} \rho) e^{im_2^{i,f} \varphi} e^{ik_{2z}^{i,f} z}. \quad (4)$$

Захват электрона на дислокацию описывается радиусом захвата [5]

$$r = w / L_z n v_T, \quad (5)$$

где n – равновесная концентрация электронов, v_T – средняя скорость теплового движения электрона, а w – вероятность перехода между начальным состоянием i и конечным состоянием f :

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{R}{\pi} \right)^3 \left(\frac{L_z}{2\pi} \right)^4 L_z \sum_{m'_2} \int dk_2^i dk_{2z}^i \int dk_2^f dk_{2z}^f \int dk_1^i dk_{1z}^i \int dk_{1z}^f \times \\ \times |M_{if}|^2 P(k_1^i, k_{1z}^i, k_2^i, k_{2z}^i) \delta(E_1^i + E_2^i - E_1^f - E_2^f). \quad (6)$$

Здесь $P(k_1^i, k_{1z}^i, k_2^i, k_{2z}^i)$ – бoльцмановская функция распределения электронов.

Оператором перехода в Оже-процессе является оператор кулоновского взаимодействия двух электронов. Вероятность будет определяться матричным элементом

$$M_{if} = \int \Psi_1^{f*}(\rho_1, \varphi_1, z_1) \Psi_2^{f*}(\rho_2, \varphi_2, z_2) \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{|\rho_1 - \rho_2|^2 + (z_1 - z_2)^2}} \times \\ \times \Psi_1^i(\rho_1, \varphi_1, z_1) \Psi_2^i(\rho_2, \varphi_2, z_2) d\rho_1 dz_1 d\rho_2 dz_2, \quad (7)$$

где ρ – двумерный радиус-вектор.

Мы будем рассматривать захват электрона без передачи магнитного момента при взаимодействии двух электронов. Такое приближение соответствует сохранению в операторе кулоновского взаимодействия лишь монопольного члена, так как уже в дипольном приближении (т.е. при сохранении членов порядка ρ_1 / ρ_2 , которые имеют малость порядка $\beta a < 1$) происходит передача вращательного момента.

При вычислении вероятности захвата в глубокую узкую зону ($E_1^f \sim E_D \gg kT$) существенно, что энергия конечного состояния второго (свободного) электрона много больше энергий начальных состояний электронов (которые могут быть порядка тепловой энергии), т.е. $E_1^f \sim E_2^f \gg (E_1^i, E_2^i)$. Не уточняя вида дисперсии в дислокационной зоне, будем считать ширину зоны много меньше глубины залегания: $\Delta E_D \ll E_D$. Подставляя волновые функции (2),(3),(4) в матричный элемент (7) и выполняя вычисления, получим следующее выражение для радиуса захвата:

$$r = \frac{2\pi^{7/2} \hbar^2 e^4 n}{\mu^{3/2} \varepsilon^2 v_T E_D^{5/2}} \frac{\exp \left\{ -2\alpha \left[1 + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{4\pi \mu k_i \rho_D^2}{\alpha \hbar^2 \gamma^2} \right) \right] \right\}}{\left[\frac{2\mu k T a^2}{\hbar^2} \ln \left(\frac{\alpha \hbar^2}{\pi \mu k_i a^2} \right) \right]^{1/2}}. \quad (8)$$

Радиус захвата на дислокацию содержит зависимость от температуры, обусловленную зависимостью электростатического барьера от температуры.

Приведенный расчет радиуса Оже-захвата на дислокацию справедлив в области температур, ограниченной снизу условием слабого насыщения оборванных связей электронами ($\alpha \ll 1$) и сверху условием применимости квазиклассического приближения, требующего, чтобы под барьером укладывалось большое число волн $k\rho_0(k) \gg 1$. Например, для германия ($\varepsilon = 16$) это интервал температур 200÷500 К. При $T = 200$ К, $\mu \approx 10^{-28}$ г, $E_D = 0.3$ эВ, $a \sim 10^{-8}$ см,

$\alpha = 0.5$ радиусы многофононного [4] и Оже-захвата сравниваются при концентрации электронов $n \approx 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и составляют $r_a \sim r_{ej} \sim 10^{-15} \text{ см}$. При более высоких температурах Оже-механизм может преобладать только для вырожденных полупроводников, а при низких температурах этот механизм будет преобладать даже в отсутствие вырождения.

ЛИТЕРАТУРА

1. D.Cherns, S.J.Henley, and F.A.Ponce. Appl. Phys. Lett., 78, 2691 (2001).
2. Р.А.Вардамян, Г.Г.Киракосян, В.Я.Кравченко. ФТТ, 30, 3565 (1988).
3. A.Haug. Phys. Stat. Sol. (b), 97, 481 (1980).
4. Р.А.Вардамян. ЖЭТФ, 76, 2241 (1979).
5. Ю.В.Гуляев. ФТТ, 3, 1094 (1961).

ԵԶՐԱՅԻՆ ԴԻՍԼՈՎԱՑԻԱՅԻ ԿՈՂՄԻՑ ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ՕԺԵ-ՉԱՎԹՈՒՄԸ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ

Ա.Ս. ՄՈՒՍԱԵԼՅԱՆ

Դիտարկված է էլեկտրոնային կիսահաղորդչում լիցքավորված եզրային դիսլոկացիայի կողմից հիմնական լիցքակիրների Օժե-զավթումը՝ դիսլոկացիայի խզված կապերի էլեկտրոններով քույլ հագեցման դեպքում: Ստացված է Օժե-զավթման շառավղի կախվածությունը ջերմաստիճանից և միաչափ դիսլոկացիոն գոտու խորությունից: Գնահատված են ազատ էլեկտրոնների կոնցենտրացիաների արժեքները, որոնց դեպքում Օժե-զավթումը դառնում է ոչ ճառագայթային ռեկոմբինացիայի հիմնական մեխանիզմը:

AUGER CAPTURE OF ELECTRONS BY AN EDGE DISLOCATION IN SEMICONDUCTORS

A.S. MUSAELYAN

The Auger capture of majority carriers by a charged edge dislocation in n-type semiconductors is considered in the case of weak saturation of dangling bonds existing on the dislocation core. The dependence of the capture radius on the depth of one-dimensional dislocation band and on temperature is obtained. Values of temperature and free electrons concentration are estimated, when the Auger capture is the dominant mechanism of nonradiative recombination in crystals with dislocations.