

## О РЕКОМБИНАЦИИ В АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ВЫШЕ 100 К

С.М.Дикман

*Государственное научно-производственное предприятие "Квант"*

*129626 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 24 марта 1993 г.

После переработки 29 апреля 1993 г.

В рамках модели безызлучательной рекомбинации удается точно рассчитать главный экспоненциальный фактор, определяющий величину рекомбинационного потока и содержащий в показателе существенно нелинейную зависимость от температуры.

1. Хорошо известно, что в аморфных полупроводниках рекомбинация носителей заряда, определяемая фотолюминесценцией, начинает быстро спадать при температурах выше 70 К [1] и в дальнейшем, по-видимому, определяется безызлучательными процессами. Рассмотрение этих процессов при наличии квазинепрерывного спектра локализованных состояний (ловушек) в щели подвижности аморфного полупроводника сводится к модели [2], в которой электрон, многократно туннелируя с одной ловушки на другую, "спускается" из зоны проводимости по лестнице уровней до тех пор, пока не рекомбинирует с дыркой.

Время перехода  $\tau_i$  с глубокого уровня  $\epsilon_i$  на уровень  $\epsilon_{i+1}$ , расположенный ниже по энергии, определяется многофононным процессом "сброса" энергии:

$$\tau_i = \nu_0^{-1} \exp(\Delta\epsilon/\epsilon_0 + 2\Delta\tau_i/a), \quad \Delta\epsilon = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i. \quad (1)$$

Здесь  $\Delta\tau_i = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}|$  – расстояние между центрами, образующими уровни;  $a$  – радиус локализации электрона на центре;  $\epsilon_0$  и  $h\nu_0$  – величины порядка характерной энергии фононов, которые слабо зависят от  $\Delta\epsilon$  и температуры  $T$  (этой зависимостью мы будем пренебрегать). Считается также, что  $\Delta\epsilon \gg \epsilon_0$ . Будем предполагать участие в рекомбинации  $(M+1)$ -го уровня с энергиями  $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \dots < \epsilon_{M+1} < G$  ( $G$  – ширина щели подвижности).

Переходы из свободного состояния в связанное описываются формулами

$$\tau_e^{-1} = nV_e\nu_0 \exp(-\epsilon_1/\epsilon_0), \quad \tau_h^{-1} = pV_h\nu_0 \exp\left(\frac{\epsilon_{M+1} - G}{\epsilon_0}\right), \quad (2)$$

где  $V_e$  и  $V_h$  – эффективные объемы взаимодействия вокруг глубокого центра, внутри которых возможен захват носителя заряда. Время переходов вверх по энергии связано с  $\tau_e$  и  $\tau_h$  обычными соотношениями:

$$\tau_e' = \tau_e \frac{n}{N_C} \exp\left(\frac{\epsilon_1}{T}\right), \quad \tau_h' = \tau_h \frac{p}{N_V} \exp\left(\frac{G - \epsilon_{M+1}}{T}\right), \quad (3)$$

$N_C$  и  $N_V$  – эффективные концентрации состояний в  $C$ - и  $V$ -зонах. Наконец, плотность состояний  $\rho(\epsilon)$  в щели подвижности будем описывать, предполагая, что 1-й и  $(M+1)$ -й уровни расположены на "хвостах" распределений у верхнего

и нижнего края щели подвижности, тогда как остальные ловушки имеют плотность  $\rho_0$ , не зависящую от  $\epsilon$ :

$$\rho(\epsilon_1) = N_1 \exp\left(-\frac{\beta\epsilon_1}{\epsilon_0}\right), \quad \rho(\epsilon_{M+1}) = N_2 \exp\left[-\frac{\beta(\epsilon_{M+1} - G)}{\epsilon_0}\right], \quad \rho(\epsilon_i) = \rho_0; \quad (4)$$

$$2 \leq i \leq M, \quad N_1, N_2 \gg \rho_0.$$

Соотношения (1)–(4) полностью моделируют постановку задачи. Заметим только, что характерный радиус локализации, вообще говоря, существенно зависит от глубины залегания центра  $\epsilon_i$ . Так, для сравнительно мелких 1-го и  $(M+1)$ -го центров он существенно больше, чем для прочих глубоких ловушек. Из-за этого  $V_e$  и  $V_h$  в формуле (2) больше, чем  $a^3$ , если считать что параметр  $a$  характеризует глубокие уровни. Будем полагать, что  $V_e \sim V_h \sim \gamma V$ , где  $V = \pi a^3/6 \sim 10^{-22} \text{ см}^{-3}$ ,  $\gamma \sim 10^2 \div 10^3$ . Точно так же в (1) для переходов с 1-го на 2-й уровень и с  $M$ -го на  $(M+1)$ -й надо сделать замену  $a \rightarrow a\gamma^{1/3}$ .

Мы покажем, что в рамках нашей модели рекомбинационный поток (число рекомбинирующих пар в единицу времени в единице объема) может быть аналитически рассчитан с точностью до умножения на некоторую величину порядка единицы, если только выполнено условие

$$g^{5/2} \delta \lesssim 1, \quad (5)$$

где  $g = G/\epsilon_0$ ,  $\delta = V\rho_0\epsilon_0$ .

2. "Вход" на лестницу уровней и "выход" с нее должны учитывать возможность обратного активационного перехода, поэтому эффективное время "входа" равно  $\tau_e(1 + \tau^*/\tau'_e)$ , где  $\tau^*$  – время "прохода" электрона по  $M$  ступеням между локализованными состояниями. Отношение  $\tau^*/\tau'_e$  характеризует эффективное увеличение времени из-за того, что для электрона, захваченного на уровень  $\epsilon_1$ , существует вероятность не рекомбинировать, а попасть опять в  $C$ -зону. Очевидно, величина  $\tau^*$  определяется наибольшим из  $M$  времен (1). Оценивая соответствующим образом эффективное время "выхода" в  $V$ -зону, определим полное время "спуска":

$$\tau = \tau_e + \tau_h + \tau^*(1 + \tau_e/\tau'_e + \tau_h/\tau'_h). \quad (6)$$

Время  $\tau^*$  определяется максимальным из  $M$  времен (1), характеризующих переходы между уровнями, соседними по энергии. Задача состоит прежде всего в проведении интегрирования микротока

$$\tau^{-1} \prod_{i=1}^{M+1} \rho(\epsilon_i)$$

по  $M$  пространственным переменным  $\Delta\tau_i$ . В рамках рассматриваемого приближения это интегрирование может быть легко выполнено. Действительно, зависимость  $\tau_i$  от  $\Delta\tau_i$  является резкой, поэтому величина  $\tau$ , рассматриваемая как функция  $\Delta\tau_i$ , есть просто  $\tau_e + \tau_h$  для значений  $\Delta\tau_i$ , меньших чем

$$\frac{a}{2} R_i = \frac{a}{2} [L(u, v) - (\epsilon_{i+1} - \epsilon_i)/\epsilon_0], \quad \epsilon_{i+1} > \epsilon_i,$$

где

$$L(u, v) = \lambda + (t+1)u + \ln \frac{\text{ch}(v)}{\text{ch}(vt + \alpha)}; \quad (7)$$

$$\alpha = 1/2 \ln(N_V/N_C), \quad \lambda = -\alpha - \ln(N_C V), \quad t = \epsilon_0/T,$$

$$u = (\epsilon_1 + G - \epsilon_{M+1})/2\epsilon_0, \quad v = (\epsilon_1 + \epsilon_{M+1} - G)/2\epsilon_0.$$

Выражение (7) записано с учетом того, что  $n \sim p < N_C v \exp(-tu)$ , то есть температура предполагается достаточно большой или скорость генерации пар достаточно мала (считаем что  $n$  порядка  $10^{13} \div 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ). Это в результате приводит к линейной зависимости рекомбинационного потока от  $n$  и, следовательно, к пропорциональности  $n$  величине потока оптической генерации, что, естественно, справедливо при достаточно малой световой нагрузке. Считаем также, что  $L \gg 1$ . В области значений  $\Delta\tau_i - aR_i/2 > a$  время  $\tau$  экспоненциально растет с ростом  $\Delta\tau_i$ , так что соответствующие микротоки становятся пренебрежимо малыми. Следовательно, при условии  $R_i \gg 1$  пространственное интегрирование сводится к умножению на объем области  $M$ -мерного пространства, в которой  $\Delta\tau_i < aR_i/2$ . Результат имеет вид

$$J_M = \gamma^2 V^M (\tau_e + \tau_h)^{-1} \prod_{i=1}^M \rho(\epsilon_i) R_i^3 \theta(R_i) \quad (8)$$

$\theta(x)$  – единичная функция Хевисайда.

3. При фиксированных энергиях  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_{M+1}$  произведение  $R_i$  в (8) есть произведение величин, сумма которых фиксирована. Отсюда максимум этого произведения достигается при  $R_i$ , равных  $L - (g - 2u)/M$ , то есть для эквидистантной цепочки уровней. Отклонение от эквидистантности конечного числа уровней не приводит к резкому уменьшению  $J_M$ . В этом смысле утверждение об эквидистантности  $\epsilon_i$  в оптимальных цепочках [2] справедливо лишь при условии, что не только  $M$  велико, но и в отклонениях участвует большое число уровней.

Выполним интегрирование по "внутренним" переменным  $\epsilon_2, \epsilon_3, \dots, \epsilon_M$ :

$$I_M(u, v) = \int J_M d\epsilon_2 d\epsilon_3 \dots d\epsilon_M = \frac{\gamma^2 N_1 N_2 \exp(-2\beta u)}{(\tau_e + \tau_h) \rho_0 \epsilon_0} [\delta(g - 2u)^4]^M K_M(u, v). \quad (9)$$

Интеграл (9) обращается в нуль, если  $M < 1/l$ , где  $l = L/(g - 2u)$ . Если же  $M = [1/l] + 1$ , то, зафиксировав  $\epsilon_3, \epsilon_5, \dots, \epsilon_{M-1}$ , можно проинтегрировать по  $\epsilon_2, \epsilon_4, \dots, \epsilon_M$ , то есть вдвое уменьшить кратность интеграла (считаем  $M$  четным). Повторяя эту процедуру, мы увидим, что интеграл (9) может быть в данном случае для любого конечного  $M$ , являющегося степенью двух, представлен в алгебраическом виде. Для  $M$  больших ответ записывается следующим образом:

$$K_M = (l - 1/M)^{4M-1} (\pi/2)^{(M-1)/2} M^{-1/2}, \quad M \gg 1. \quad (10)$$

Анализ показывает, что ошибка  $\Delta K_M$ , возникающая при использовании формулы (10) в тех случаях, когда  $M > [1/l] + 1$ , зависит от величины параметра  $q = Ml$ , и справедлива следующая оценка верхней границы этой ошибки:

$$\Delta K_M / K_M < l^{-1} \exp[-4/(q - 1)]. \quad (11)$$

Как мы увидим, для интересующей нас области параметров правая часть в (11) должна быть меньше или порядка единицы. С помощью формулы (10) найдем теперь оптимальное значение  $M$ . Подставляя в (10) и (9)  $M = q/l$  и

считая, что  $\delta g^4 \gg 1$ ,  $u \ll g$ , получаем, что максимум  $I_M$  достигается, если  $q$  удовлетворяет уравнению

$$(q-1)^{-1} = \ln \left[ \frac{q(2/\pi)^{1/8}}{(q-1)L\delta^{1/4}} \right] + O(l), \quad l \ll 1. \quad (12)$$

Суммирование по  $M$  сводится к интегрированию  $I_M$  в окрестности  $q/l$ . После этого выполним интегрирование по  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_{M+1}$ , считая, что функция  $q(u, v)$  определяется уравнением (12):

$$R \sim \frac{\gamma^2 V N_1 N_2 n G \nu_0}{\rho_0} \int_0^{g/2} du \int_{-u}^u dv \frac{\exp(-\Phi)}{Lchv}, \quad \Phi = (1+2\beta)u + \frac{4q(g-2u)}{L(q-1)}. \quad (13)$$

Главный вклад в этот интеграл дает область значений переменных вблизи минимума  $\Phi + \ln(chv)$ , который реализуется при  $u$ , соответствующем значению

$$L \approx \lambda + (t+1)u = L_0, \quad \text{где } L_0 = 2q \left[ \frac{g(t+1) + 2\lambda}{(1+2\beta)(q-1)} \right]^{1/2} \gg 1, \quad (14)$$

а характерные значения  $v$  должны быть много меньше  $u$ , если только  $t > t_0 = \beta/(1+\beta)$  (это условие выполнено при температурах ниже точки плавления). Подставляя (14) в (12), получаем уравнение

$$(q-1)^{-1} = \frac{1}{2} \ln(q-1)^{-1} + \frac{1}{2} \ln \frac{(1+2\beta)(2/\pi)^{1/4}}{4\delta^{1/2}[g(1+t) + 2\lambda]}, \quad (15)$$

которое имеет решение, если

$$\frac{\delta^{1/2}[g(1+t) + 2\lambda]}{1+2\beta} < \frac{1}{8e} \left( \frac{2}{\pi} \right)^{1/4} = 0,0412\dots \quad (16)$$

Нас должен интересовать меньший из двух корней (15), такой, что  $1 < q < 3$ . Другой корень, больший трех, отвечает максимуму  $\Phi$ . Интегрируя по  $u$  и  $v$  вблизи экстремума, находим окончательно

$$R \sim \frac{\gamma^2 N_1 N_2 n V \epsilon_0 \nu_0 g^{3/4} (q-1)^{1/4}}{\rho_0 (t-t_0 + 1/L_0)(3-q + 1/L_0)^{1/2}} \exp(-\Phi), \quad (17)$$

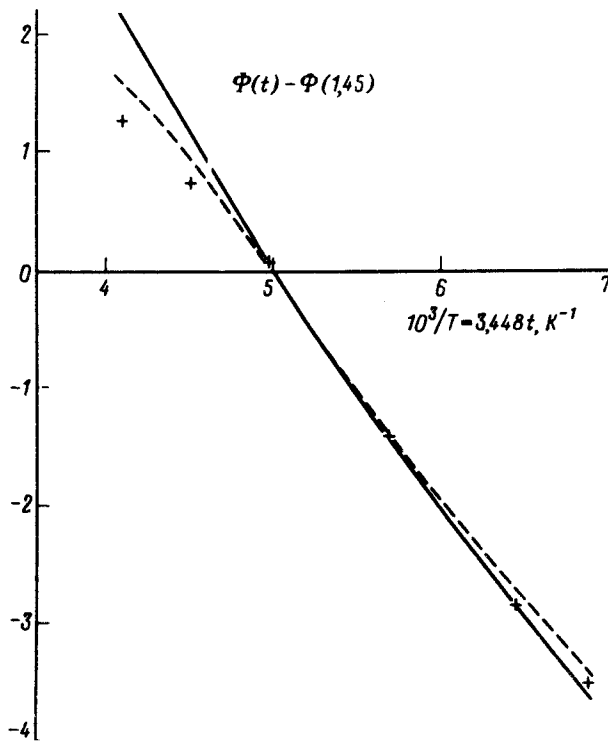
$$\Phi = 2(q+1) \sqrt{\frac{(1+2\beta) \left[ \frac{g}{(t+1)} + \frac{2\lambda}{(t+1)^2} \right]}{q-1}} - \frac{8q}{(q-1)(1+t)} - \frac{(1+2\beta)\lambda}{t+1} + O(1). \quad (18)$$

Здесь мы оставили только те члены в показателе экспоненты, которые могут, в принципе, оказаться велики.

4. Учитывая, что  $\lambda \ll g$ , находим температурную зависимость, определяемую главным членом

$$\Phi_0 \approx 2(q+1) \sqrt{\frac{(1+2\beta)g}{(q-1)(t+1)}},$$

что сводится к  $\Phi_0 \propto \sqrt{T/(T+\epsilon_0)}$ , если пренебречь сравнительно слабой зависимостью от  $T$  множителя в (18), содержащего  $q$ . Полученный результат, таким



образом, существенно не совпадает с приведенным в работе [2] для случая низких температур ответом,  $\ln R \propto -T$ , а также с активационной зависимостью,  $\ln R \propto 1/T$ , возникающей, естественным образом, в одноуровневой модели рекомбинации. Более аккуратный расчет, выполненный по полной формуле (18), учитывающей зависимость  $q(t)$  согласно соотношению (15), продемонстрирован на рисунке. При расчете мы использовали следующие значения реальных параметров:  $G = 1,7$  эВ;  $\epsilon_0 = 0,025$  эВ;  $\rho_0 = 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-1} \cdot \text{эВ}^{-1}$ ;  $V = 10^{-22} \text{ см}^{-3}$ ;  $\beta = 0,5$ ;  $\lambda = 3$ . Для удобства график построен в зависимости от величины  $1/T$ , причем значение  $t = 1,45$  соответствует температуре 200 К. На этом же рисунке для сравнения крестиками показаны экспериментальные точки, характеризующие температурную зависимость дрейфовой подвижности электронов  $\mu(T)$  в аморфном гидрогенизированном кремнии [3]. На нашем рисунке отложены значения  $\ln[\mu(T)/\mu(200 \text{ К})]$ . Видно, что при данном выборе параметров материала может быть достигнуто хорошее согласие с экспериментом для достаточно низких температур. Что же касается температур комнатных и выше ( $t < 1$ ), то здесь уже существенна зависимость от температуры предэкспоненциального множителя в (17), который меняется в основном как  $1/(t - t_0)$ . Прибавляя к значению  $\Phi(t)$  на графике величину  $\ln[Q(t)/Q(1,45)]$ , где через  $Q$  мы обозначили предэкспоненту в (17), можно добиться лучшего согласия с экспериментом. Результат показан пунктирной линией на этом же рисунке.

В принципе, из формулы (17) мы можем получить и правильную числовую оценку величины времени жизни носителей заряда  $n/R$ . Эта оценка очень чувствительна к изменению параметров материала, однако экспериментальные значения [4]  $10^{-3} \div 10^{-6}$  с для  $\alpha$ -Si:H вполне согласуются с расчетом.

Автор благодарен Е.И.Левину и Л.П.Питаевскому за полезные обсуждения,

а также А.Б.Певцову за предоставленную информацию о работах [3,4].

- 
1. M.Hoheisel, R.Carius, and W.Fuch, *J. Non-Cryst. Sol.* **59-60**, 457 (1983); *ibid* **63**, 313 (1985).
  2. С.Д.Барановский, В.Г.Карпов, Б.И.Шкловский, *ЖЭТФ* **94**, 278 (1988).
  3. J.M.Marshall, R.A.Street, and M.J.Thompson, *Phil. Mag. B* **54**, 51 (1986).
  4. W.E.Spear and C.S.Cloud, *Phil. Mag. Lett.* **55**, L271 (1987).