Доклады Национальной академии наук Беларуси
2014 май–июнь Том 58 № 3

УДК 517.958:537.311.1;621.315.592

Н. А. ПОКЛОНСКИЙ, А. И. КОВАЛЕВ, С. А. ВЫРКО

ДРЕЙФ И ДИФФУЗИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ПО ДВУХУРОВНЕВЫМ (ТРЕХЗАРЯДНЫМ) ТОЧЕЧНЫМ ДЕФЕКТАМ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

(Представлено академиком Н. М. Олехновичем)

Белорусский государственный университет, Минск *Поступило 07.05.2014*

Введение. Актуальность исследования прыжковой миграции электронов между двухуровневыми точечными дефектами одного сорта (вида) с тремя зарядовыми состояниями (–1, 0, +1) в запрещенной энергетической зоне (энергетической щели) кристаллического полупроводника связана с возможностью (отмеченной в [1; 2]) формирования на таких дефектах аналога *pn*-перехода (так называемого ζ-перехода). В частности, на основе ζ-перехода предлагается создать выпрямитель прыжкового электрического тока. Поэтому представляет практический интерес определение условий, при которых ток, обусловленный прыжками электронов по дефектам, превалирует над током, обусловленным электронами *c*-зоны и/или дырками *v*-зоны полупроводника, для температур вплоть до комнатных и выше (см., напр., [3]).

Для создания большой концентрации дефектов с локальными уровнями энергии используется воздействие на полупроводник ионизирующего излучения (радиации) с последующим частичным термическим отжигом [4]. Введение в полупроводник точечных двухуровневых трехзарядных радиационных дефектов (или *r*-дефектов) приводит к стабилизации уровня Ферми в окрестности середины запрещенной зоны ряда кристаллических полупроводниковых материалов [5]. Энергетические уровни *r*-дефектов (далее просто дефектов) образуют в энергетической щели полупроводника две энергетические зоны ({1}-зону и {2}-зону, а каждый из дефектов может находиться в одном из трех зарядовых состояний [2; 6; 7]. Для определенности примем, что энергетические уровни дефектов в зарядовых состояниях (0) и (+1) формируют {1}-зону шириной W_1, а дефекты в зарядовых состояниях (–1) и (0) формируют {2}-зону шириной W_2. В частном случае [2] классических {1}- и {2}-зон их ширины (разброс энергетических уровней дефектов) из-за кулоновского взаимодействия ближайших ионов много больше квантового уширения их уровней, обусловленного конечностью времени локализации на дефектах электронов.

Цель работы – получить аналитические выражения для длины экранирования внешнего стационарного электрического поля и длины прыжковой диффузии электронов в таких полупроводниках.

Система уравнений дрейфово-диффузионной модели. Описание прыжковой миграции электронов по точечным дефектам в кристаллическом полупроводнике в рамках дрейфово-диффузионной модели включает: 1) уравнение для плотности электрического тока, состоящего из дрейфовой компоненты (движение электронов под действием электрического поля) и диффузионной компоненты (движение электронов вследствие градиента концентрации зарядовых состояний неподвижных дефектов); 2) уравнение Пуассона, связывающее дивергенцию напряженности электрического поля с плотностью нескомпенсированного электрического заряда внутри полупроводника; 3) уравнение непрерывности для концентрации подвижных зарядовых состояний неподвижных атомных дефектов кристаллической решетки [1; 2; 6; 8–11].

Рассмотрим полупроводник, содержащий равномерно (однородно) распределенные неподвижные точечные двухуровневые дефекты одного сорта с тремя зарядовыми состояниями $Z = –1, 0, +1$ и суммарной концентрацией $N = N_0 + N_{–1} + N_{+1}$, где N_Z – концентрация дефектов в Z-м зарядовом состоянии (далее в Z-состоянии на фоне электрически нейтральной кристаллической матрицы). В полупроводнике содержатся также полностью ионизированные водородоподобные доноры и акцепторы с концентрациями $N_d = K_d N$ и $N_a = K_a N$, где $0 < K_a < 1$, $0 < K_d < 1$. Условие электрической нейтральности кристаллического полупроводника имеет вид: $N_{-1} = N_{+1} + (K_d - K_a)N$. Все доноры находятся в зарядовом состоянии (+1), а все акцепторы – в зарядовом состоянии (–1), поэтому они в прыжковой миграции зарядов напрямую не участвуют. При прыжке одного электрона между двумя электрически нейтральными дефектами один дефект переходит в зарядовое состояние (–1), а другой – в зарядовое состояние (+1). Если прыжок одного электрона происходит между двумя дефектами, которые находятся в зарядовых состояниях (–1) и (+1), то происходит «рекомбинация» их зарядовых состояний, и эти два дефекта становятся электрически нейтральными. Прыжок одиночного электрона возможен с дефекта в зарядовом состоянии (–1) на дефект в зарядовом состоянии (0), а также с дефекта в зарядовом состоянии (0) на дефект в зарядовом состоянии (+1), т. е. возможны одноэлектронные переходы (–1) → (0) и (0) → (+1). Прыжки пар электронов (иначе биполяронов [12; 13]) между дефектами в зарядовых состояниях (–1) и (+1) соответствуют переходам (–1) → (+1). Считается, что прыжки одиночного электрона с дефекта в зарядовом состоянии (0) на дефект в зарядовом состоянии (–1), а также с состояния (+1) на состояние (0) не реализуются. Принимается, что среднее время «оседлой» жизни электронов на дефектах много больше средней длительности их прыжка между неподвижными дефектами. Разности темпов прыжковых переходов одиночных электронов и биполяронов между неподвижными дефектами против и по направлению напряженности внешнего электрического поля, а также градиенты концентраций зарядовых состояний дефектов обусловливают суммарный прыжковый ток.

Пусть к находящемуся в термостате однородному кристаллическому полупроводнику с рассматриваемыми точечными дефектами приложено внешнее электрическое поле, направленное вдоль оси x. Запишем выражение для плотности прыжкового тока, когда при наложении на полупроводник внешнего электрического поля все физические величины зависят только от одной пространственной координаты x, т. е. когда изменение зарядового состояния системы дефектов происходит только в направлении одной оси координат (одномерное приближение). Считаем, что средние длины прыжков как одиночных электронов, так и пар электронов (биполяронов) много меньше характерных размеров неоднородностей распределения дефектов. В этом приближении плотность прыжкового тока $J_{Z,Z'}$ между дефектами в зарядовых состояниях Z и Z' включает дрейфовую и диффузионную составляющие [1; 2; 6]:

$$J_{Z,Z'}(x,t) = |Z - Z'|\, eN_{Z,Z'}(x,t)\left[M_{Z,Z'}E(x,t) + D_{Z,Z'}\frac{\partial}{\partial x}\ln\frac{N_Z(x,t)}{N_{Z'}(x,t)}\right], \tag{1}$$

где x – координата; t – время; e – элементарный заряд ($-e < 0$ – заряд электрона); $E(x, t)$ – напряженность электрического поля внутри полупроводника; $Z, Z' = -1, 0, +1$ – зарядовые состояния дефектов; $N_Z(x, t) = N_Z + \delta N_Z(x, t)$ – зависящая от x и t неравновесная концентрация дефектов в Z-состоянии; N_Z – равновесное (в отсутствие тока) значение концентрации дефектов в Z-состоянии, $N_{Z,Z'}(x, t) = N_Z(x, t)N_{Z'}(x, t) / N$ – эффективная концентрация одиночных электронов, прыгающих из Z-состояний в Z'-состояния дефектов (для $Z < Z'$ при $|Z - Z'| = 1$) или биполяронов (для $Z < Z'$ при $|Z - Z'| = 2$); $M_{Z,Z'}$ и $D_{Z,Z'}$ – дрейфовая подвижность и коэффициент диффузии одиночных электронов и биполяронов, прыгающих из Z-состояний в Z'-состояния дефектов; считается, что $M_{Z,Z'}$ и $D_{Z,Z'}$ слабее по сравнению с $N_{Z,Z'}(x, t)$ зависят от x и t.

Отметим, что дрейфово-диффузионное приближение справедливо и для переменного прыжкового тока, если частота синусоидального электрического поля много меньше средней частоты прыжков электронов между дефектами. В частности, из (1) следует прыжковая электропроводность на постоянном токе

$$\sigma_{Z,Z'} = |Z - Z'|eN_{Z,Z'}M_{Z,Z'}, \tag{2}$$

где $N_{Z,Z'}$ – равновесная концентрация прыгающих одиночных электронов (для $Z < Z'$ при $|Z - Z'| = 1$) или биполяронов (для $Z < Z'$ при $|Z - Z'| = 2$).

Отношение коэффициента диффузии $D_{Z,Z'}$ к дрейфовой подвижности $M_{Z,Z'}$ прыгающих между дефектами электронов дается для $Z \neq Z'$ соотношением типа Нернста–Эйнштейна (см., напр., [6; 8; 10]):

$$\frac{D_{Z,Z'}}{M_{Z,Z'}} = \xi_{Z,Z'} \frac{k_B T}{|Z - Z'|e}, \tag{3}$$

где $\xi_{Z,Z'} \geq 1$ – безразмерный параметр (определяется отношением разброса энергетических уровней дефектов, т. е. отношением ширины {1}- и {2}-зон W_1 и W_2 к тепловой энергии $k_B T$ (здесь k_B – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура). Если $W_1 + W_2 \ll k_B T$, то $\xi_{Z,Z'} \to 1$.

Прыжковой миграции электронов в кристаллическом полупроводнике, содержащем дефекты в трех зарядовых состояниях (–1, 0, +1), соответствуют переходы (–1) → (0) и (0) → (+1) при прыжках одиночных электронов и переходы (–1) → (+1) – при прыжках биполяронов между дефектами. Тогда из (1) получим выражения для трех составляющих полной плотности прыжкового тока $J_{\text{tot}}(x, t) = J_{-1,0}(x, t) + J_{0,+1}(x, t) + J_{-1,+1}(x, t)$ в виде

$$J_{-1,0}(x,t) = eN_{-1,0}(x,t)\left[M_{-1,0}E(x,t) + D_{-1,0}\frac{\partial}{\partial x}\ln\frac{N_{-1}(x,t)}{N_0(x,t)}\right],$$

$$J_{0,+1}(x,t) = eN_{0,+1}(x,t)\left[M_{0,+1}E(x,t) + D_{0,+1}\frac{\partial}{\partial x}\ln\frac{N_0(x,t)}{N_{+1}(x,t)}\right],$$

$$J_{-1,+1}(x,t) = 2eN_{-1,+1}(x,t)\left[M_{-1,+1}E(x,t) + D_{-1,+1}\frac{\partial}{\partial x}\ln\frac{N_{-1}(x,t)}{N_{+1}(x,t)}\right], \tag{4}$$

где $N_{-1,0} = N_{-1}N_0 / N$ – концентрация одиночных электронов, прыгающих между дефектами в зарядовых состояниях (–1) и (0); $N_{0,+1} = N_0 N_{+1} / N$ – концентрация одиночных электронов, прыгающих между дефектами в зарядовых состояниях (0) и (+1); $N_{-1,+1} = N_{-1}N_{+1} / N$ – концентрация биполяронов (с зарядом $-2e$), прыгающих между дефектами в зарядовых состояниях (–1) и (+1).

Если дрейфовые и диффузионные компоненты плотностей стационарных прыжковых токов скомпенсированы ($J_{-1,0}(x) = J_{0,+1}(x) = J_{-1,+1}(x) = 0$), но стационарная напряженность электрического поля $E(x) \neq 0$, то из (4) с учетом (3) следует соотношение

$$\xi_{-1,+1} = 2\frac{\xi_{-1,0}\xi_{0,+1}}{\xi_{-1,0} + \xi_{0,+1}}.$$

Напряженность электрического поля $E(x, t)$ внутри полупроводника удовлетворяет уравнению Пуассона (см., напр., [2; 6; 14])

$$\frac{\partial E(x,t)}{\partial x} = \frac{\rho[\varphi(x,t)]}{\varepsilon} = \frac{e}{\varepsilon}[\delta N_{+1}(x,t) - \delta N_{-1}(x,t)], \tag{5}$$

где $\rho[\varphi(x, t)]$ – объемная плотность заряда; $\varphi(x, t)$ – потенциал электрического поля (зависящий от координаты x и от времени t); $\varepsilon = \varepsilon_r\varepsilon_0$ – статическая диэлектрическая проницаемость; ε_r – относительная диэлектрическая проницаемость; ε_0 – электрическая постоянная. Неравновесная концентрация дефектов $N_Z(x, t)$ в Z-состоянии может быть представлена как $N_Z(x, t) = N_Z + \delta N_Z(x, t)$, где N_Z – термодинамически равновесное значение концентрации; $\delta N_Z(x, t)$ – отклонение от N_Z при $E(x, t) \neq 0$. Заметим, что внешнее электрическое поле определяет решение уравнения (5) через граничные и начальные условия.

Уравнения непрерывности для мигрирующих по кристаллу вдоль оси x трех зарядовых состояний (–1, 0, +1) неподвижных точечных дефектов можно представить в виде [2; 6]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial N_{-1}(x,t)}{\partial t} &= -\alpha N_{-1}(x,t)N_{+1}(x,t) + \beta N_0^2(x,t) + \frac{1}{e}\frac{\partial J_{-1,0}(x,t)}{\partial x},\\
\frac{\partial N_0(x,t)}{\partial t} &= 2[\alpha N_{-1}(x,t)N_{+1}(x,t) - \beta N_0^2(x,t)] + \frac{1}{e}\frac{\partial}{\partial x}[J_{0,+1}(x,t) - J_{-1,0}(x,t)],\\
\frac{\partial N_{+1}(x,t)}{\partial t} &= -\alpha N_{-1}(x,t)N_{+1}(x,t) + \beta N_0^2(x,t) - \frac{1}{e}\frac{\partial J_{0,+1}(x,t)}{\partial x},
\end{aligned} \tag{6}$$

где α – коэффициент «прыжкового захвата» одного электрона с дефекта в зарядовом состоянии (–1) на дефект в зарядовом состоянии (+1), заканчивающегося появлением двух электрически нейтральных дефектов $[(-1) + (+1) \to 2(0)]$; β – коэффициент тепловой ионизации двух электрически нейтральных дефектов $[2(0) \to (+1) + (-1)]$. При записи (6) учтено, что $\partial N / \partial t = \partial N_{-1} / \partial t + \partial N_0 / \partial t + \partial N_{+1} / \partial t = 0$. Принято также, что $\partial J_{-1,+1}(x, t) / \partial x = 0$, так как прыжки биполяронов не вызывают изменения во времени концентрации дефектов ни в зарядовых состояниях (–1), ни в зарядовых состояниях (+1).

Стационарное состояние системы прыгающих по дефектам электронов. В стационарном случае во всех уравнениях исчезает зависимость от времени и производные по пространственной координате становятся полными (подразумевается зависимость только от координаты x). Учитывая, что суммарная концентрация дефектов одного сорта в трех зарядовых состояниях $(N_{-1} + N_0 + N_{+1} = N)$ не зависит от координаты, получаем

$$\frac{dN_{-1}}{dx} + \frac{dN_0}{dx} + \frac{dN_{+1}}{dx} = 0. \tag{7}$$

В стационарном состоянии уравнения непрерывности (6) принимают вид

$$\begin{gathered}
\frac{dJ_{-1,0}(x)}{dx} = e[\alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x) - \beta N_0^2(x)], \\
\frac{d}{dx}[J_{0,+1}(x) - J_{-1,0}(x)] = 2e[-\alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x) + \beta N_0^2(x)], \\
\frac{dJ_{0,+1}(x)}{dx} = e[-\alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x) + \beta N_0^2(x)].
\end{gathered} \tag{8}$$

Из (8) видно, что $dJ_{-1,0} / dx + dJ_{0,+1} / dx = 0$. Известно (см., напр., [14]), что в стационарном случае дивергенция плотности полного прыжкового тока $J_{\text{tot}}(x) = J_{-1,0}(x) + J_{0,+1}(x) + J_{-1,+1}(x)$ равна нулю $(dJ_{\text{tot}} / dx = 0)$. Как следствие, дивергенция плотности прыжкового тока $J_{-1,+1}$ биполяронов между дефектами в зарядовых состояниях (–1) и (+1) в стационарном состоянии тоже равна нулю $(dJ_{-1,+1} / dx = 0)$. Итак, плотность постоянного (стационарного) прыжкового тока в полупроводнике не зависит от координаты, т. е. $J_{\text{tot}} = \text{const}$, но $J_{-1,0} = J_{-1,0}(x)$, $J_{0,+1} = J_{0,+1}(x)$ и $J_{-1,+1} = \text{const}$.

При возмущении полупроводника внешним стационарным электрическим полем концентрация дефектов в Z-состоянии $N_Z(x) = N_Z + \delta N_Z(x)$, где $\delta N_Z(x)$ – отклонение концентрации $N_Z(x)$ от равновесного значения N_Z в результате действия поля на темп прыжков как одиночных электронов, так и на темп прыжков биполяронов между дефектами против и по направлению напряженности поля; $\delta N_{-1}(x) + \delta N_0(x) + \delta N_{+1}(x) = 0$. Далее, по аналогии с рассмотрением дрейфа и диффузии электронов c-зоны и дырок v-зоны (см., напр., [14]), зависимостью дрейфовой прыжковой подвижности $M_{Z,Z'}$ и коэффициента прыжковой диффузии $D_{Z,Z'}$ от координаты x по сравнению с зависимостью концентрации прыгающих по дефектам одиночных электронов (и биполяронов) $N_{Z,Z'}(x)$ от x пренебрегаем.

Итак, в диффузионно-дрейфовом приближении прыжковая миграция электронов по дефектам при наложении на полупроводник внешнего стационарного электрического поля описывается, с учетом выражений (4), (5), (7) и (8), системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{gathered}
\frac{dN_{-1}(x)}{dx} = -\frac{eN_{-1}(x)[N_0(x)\xi_{0,+1} + N_{+1}(x)(\xi_{-1,0} + \xi_{0,+1})]}{Nk_{\text{B}}T\xi_{-1,0}\xi_{0,+1}} E(x) + \\
\frac{N_0(x) + N_{+1}(x)}{eN_0(x)D_{-1,0}} J_{-1,0}(x) + \frac{N_{-1}(x)}{eN_0(x)D_{0,+1}} J_{0,+1}(x), \\
\frac{dN_{+1}(x)}{dx} = \frac{eN_{+1}(x)[N_0(x)\xi_{-1,0} + N_{-1}(x)(\xi_{-1,0} + \xi_{0,+1})]}{Nk_{\text{B}}T\xi_{-1,0}\xi_{0,+1}} E(x) - \\
\frac{N_0(x) + N_{-1}(x)}{eN_0(x)D_{0,+1}} J_{0,+1}(x) - \frac{N_{+1}(x)}{eN_0(x)D_{-1,0}} J_{-1,0}(x), \\
\frac{dE(x)}{dx} = \frac{e}{\varepsilon}[\delta N_{+1}(x) - \delta N_{-1}(x)], \\
\frac{dJ_{-1,0}(x)}{dx} = e[\alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x) - \beta N_0^2(x)], \\
\frac{dJ_{0,+1}(x)}{dx} = e[-\alpha N_{-1}(x) N_{+1}(x) + \beta N_0^2(x)].
\end{gathered} \tag{9}$$

При малом возмущении равновесного состояния ($\delta N_{-1} / N_{-1} \ll 1$, $\delta N_0 / N_0 \ll 1$, $\delta N_{+1} / N_{+1} \ll 1$, E, $J_{-1,0}$, $J_{0,+1}$) прыгающих между дефектами электронов, систему уравнений (9) можно линеаризовать (по общей схеме [15]) относительно пяти переменных (δN_{-1}, δN_{+1}, E, $J_{-1,0}$, $J_{0,+1}$):

$$\frac{d[\delta N_{-1}(x)]}{dx} = -\frac{eN_{-1}[N_0\xi_{0,+1} + N_{+1}(\xi_{-1,0} + \xi_{0,+1})]}{Nk_{\mathrm{B}}T\xi_{-1,0}\xi_{0,+1}}E(x) + \frac{N_0 + N_{+1}}{eN_0D_{-1,0}}J_{-1,0}(x) + \frac{N_{-1}}{eN_0D_{0,+1}}J_{0,+1}(x),$$

$$\frac{d[\delta N_{+1}(x)]}{dx} = \frac{eN_{+1}[N_0\xi_{-1,0} + N_{-1}(\xi_{-1,0} + \xi_{0,+1})]}{Nk_{\mathrm{B}}T\xi_{-1,0}\xi_{0,+1}}E(x) - \frac{N_0 + N_{-1}}{eN_0D_{0,+1}}J_{0,+1}(x) - \frac{N_{+1}}{eN_0D_{-1,0}}J_{-1,0}(x), \tag{10}$$

$$\frac{dE(x)}{dx} = \frac{e}{\varepsilon}[\delta N_{+1}(x) - \delta N_{-1}(x)],$$

$$\frac{dJ_{-1,0}(x)}{\partial x} = e[\alpha N_{-1} + 2\beta N_0]\delta N_{+1}(x) + e[\alpha N_{+1} + 2\beta N_0]\delta N_{-1}(x),$$

$$\frac{dJ_{0,+1}(x)}{\partial x} = -e[\alpha N_{-1} + 2\beta N_0]\delta N_{+1}(x) - e[\alpha N_{+1} + 2\beta N_0]\delta N_{-1}(x).$$

Линейная система уравнений (10) может быть записана в матричном виде

$$\frac{d}{dx}\begin{pmatrix}\delta N_{-1}\\ \delta N_{+1}\\ E\\ J_{-1,0}\\ J_{0,+1}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 0 & a_{13} & a_{14} & a_{15}\\ 0 & 0 & a_{23} & a_{24} & a_{25}\\ a_{31} & a_{32} & 0 & 0 & 0\\ a_{41} & a_{42} & 0 & 0 & 0\\ a_{51} & a_{52} & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\delta N_{-1}\\ \delta N_{+1}\\ E\\ J_{-1,0}\\ J_{0,+1}\end{pmatrix} \equiv M\begin{pmatrix}\delta N_{-1}\\ \delta N_{+1}\\ E\\ J_{-1,0}\\ J_{0,+1}\end{pmatrix}, \tag{11}$$

где $a_{13} = -\frac{eN_{-1}[N_0\xi_{0,+1} + N_{+1}(\xi_{-1,0} + \xi_{0,+1})]}{Nk_{\mathrm{B}}T\xi_{-1,0}\xi_{0,+1}}$; $a_{14} = \frac{N_0 + N_{+1}}{eN_0D_{-1,0}}$; $a_{15} = \frac{N_{-1}}{eN_0D_{0,+1}}$; $a_{23} = \frac{eN_{+1}[N_0\xi_{-1,0} + N_{-1}(\xi_{-1,0} + \xi_{0,+1})]}{Nk_{\mathrm{B}}T\xi_{-1,0}\xi_{0,+1}}$; $a_{24} = -\frac{N_{+1}}{eN_0D_{-1,0}}$; $a_{25} = -\frac{N_0 + N_{-1}}{eN_0D_{0,+1}}$; $a_{31} = -a_{32} = -\frac{e}{\varepsilon}$; $a_{41} = -a_{51} = e(\alpha N_{+1} + 2\beta N_0)$; $a_{42} = -a_{52} = e(\alpha N_{-1} + 2\beta N_0)$.

Ограничимся рассмотрением типичной ситуации, когда все корни λ_i (i = 1, 2, 3, 4, 5) характеристического уравнения $\det[M - \lambda\mathbf{1}] = 0$ (собственные значения матрицы M) однократны. Тогда общее решение линейной системы (11) имеет вид

$$\begin{pmatrix}\delta N_{-1}\\ \delta N_{+1}\\ E\\ J_{-1,0}\\ J_{0,+1}\end{pmatrix} = C_1\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\\ A_{14}\\ A_{15}\end{pmatrix} + C_2\begin{pmatrix}A_{21}\\ A_{22}\\ A_{23}\\ 0\\ 0\end{pmatrix}\exp(\lambda_2 x) + C_3\begin{pmatrix}A_{31}\\ A_{32}\\ A_{33}\\ 0\\ 0\end{pmatrix}\exp(\lambda_3 x) + C_4\begin{pmatrix}A_{41}\\ A_{42}\\ A_{43}\\ -1\\ 1\end{pmatrix}\exp(\lambda_4 x) + C_5\begin{pmatrix}A_{51}\\ A_{52}\\ A_{53}\\ -1\\ 1\end{pmatrix}\exp(\lambda_5 x),$$

где C_i – константы, которые определяются из граничных условий; A_{ij} – координаты собственных векторов, которые выражаются через элементы a_{ij} матрицы M. [Здесь $A_{14} = \sigma_{-1,0}$ и $A_{15} = \sigma_{0,+1}$, где $\sigma_{-1,0}$ и $\sigma_{0,+1}$ определяются по (2). Нулевой корень характеристического уравнения $\det[M - \lambda\mathbf{1}] = 0$ обозначен $\lambda_1 = 0$.]

Узкие {1}- и {2}-зоны (полосы) уровней энергии дефектов. В случае, когда ширины {1}- и {2}-зон уровней дефектов W_1 и W_2 меньше тепловой энергии $k_{\mathrm{B}}T$, безразмерные параметры $\xi_{-1,0} = \xi_{0,+1} = \xi_{-1,+1} = 1$ и корни λ_i характеристического уравнения совпадают с решением [6]

$$\lambda_1 = 0,\quad \lambda_i = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}[\Lambda_s^{-2} + \Lambda_d^{-2} \pm (\Lambda_s^{-2} - \Lambda_d^{-2})]^{1/2},\quad i = 2,\ldots,5, \tag{12}$$

где $\Lambda_s^{-2} = \frac{e^2}{\varepsilon k_{\mathrm{B}}T}(N_{-1,0} + N_{0,+1} + 4N_{-1,+1})$, $\Lambda_d^{-2} = \frac{\alpha N(N_{-1} + N_{+1})}{N_0}\frac{D_{-1,0}N_{-1,0} + D_{0,+1}N_{0,+1}}{D_{-1,0}D_{0,+1}(N_{-1,0} + N_{0,+1})}$.

Из выражения (12) вычисляем: $\lambda_2 = -1 / \Lambda_s$, $\lambda_3 = 1 / \Lambda_s$, $\lambda_4 = -1 / \Lambda_d$, $\lambda_5 = 1 / \Lambda_d$. Следуя [6], можно выделить корень λ_2, определяющий длину экранирования внешнего стационарного электрического поля в полупроводнике Λ_s, и корень λ_4, определяющий длину диффузии Λ_d электронов в {1}- и {2}-зонах дефектов. Отметим, что оба корня λ_2 и λ_4 – отрицательные собственные значения. Видно, что концентрация прыгающих между дефектами в зарядовых состояниях (–1) и (+1) биполяронов (пар электронов) $N_{-1,+1} = N_{-1}N_{+1} / N$ входит в длину экранирования Λ_s, но не входит в длину диффузии Λ_d, так как $dJ_{-1,+1} / dx = 0$. Отметим еще, что, согласно (6), в состоянии термодинамического равновесия $\alpha N_{-1}N_{+1} = \beta N_0^2$, поэтому коэффициент β, характеризующий скорость тепловой ионизации электрически нейтральных дефектов, не входит в (12). Заметим наконец, следуя терминологии [16], что если длина экранирования Λ_s больше длины диффузии Λ_d, то полупроводник называется релаксационным, если же Λ_s меньше Λ_d, то – рекомбинационным.

Широкие {1}- и {2}-зоны (полосы) уровней энергии дефектов. В случае, когда ширины {1}- и {2}-зон уровней дефектов W_1 и W_2 больше тепловой энергии k_BT, безразмерные параметры $\xi_{Z,Z'} > 1$ не равны между собой ($\xi_{-1,0} \neq \xi_{0,+1} \neq \xi_{-1,+1}$).

Решения характеристического уравнения $\det[M - \lambda\mathbf{1}] = 0$, т. е. собственные значения λ_i имеют вид

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_i = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}[\Lambda_s^{-2} + \Lambda_d^{-2} \pm \{(\Lambda_s^{-2} + \Lambda_d^{-2})^2 - 4\Lambda_s^{-2}\Lambda_d^{-2}Y_sY_d\}^{1/2}]^{1/2}, \quad i = 2, \ldots, 5, \tag{13}$$

где $\Lambda_s = \sqrt{\dfrac{\varepsilon k_BT}{e^2(\tilde{N}_{-1,0} + \tilde{N}_{0,+1} + 4\tilde{N}_{-1,+1})}}$ – условная длина экранирования; $\tilde{N}_{-1,0} = \dfrac{N_{-1,0}}{\xi_{-1,0}}$; $\tilde{N}_{0,+1} = \dfrac{N_{0,+1}}{\xi_{0,+1}}$; $\tilde{N}_{-1,+1} = \dfrac{N_{-1,+1}}{\xi_{-1,+1}}$; $\Lambda_d = \sqrt{D_d\tau_d}$ – условная длина диффузии; $D_d = \dfrac{D_{-1,0}D_{0,+1}(N_{-1,0} + N_{0,+1})}{D_{-1,0}N_{-1,0} + D_{0,+1}N_{0,+1}}$ – коэффициент прыжковой диффузии электронов в {1}- и {2}-зонах дефектов; $\tau_d = \dfrac{N_0}{\alpha N(N_{-1} + N_{+1})}$ – время жизни двух дефектов в зарядовых состояниях (–1) и (+1) относительно прыжкового перехода между ними одного электрона по схеме (–1) + (+1) → 2(0); $Y_s = \dfrac{N_{-1,0} + N_{0,+1} + N_{-1,+1}}{\tilde{N}_{-1,0} + \tilde{N}_{0,+1} + \tilde{N}_{-1,+1}}$; $Y_d = \dfrac{N_{-1}\tilde{D}_{-1,0} + N_{+1}\tilde{D}_{0,+1}}{N_{-1}D_{-1,0} + N_{+1}D_{0,+1}}$; $\tilde{D}_{-1,0} = \dfrac{D_{-1,0}}{\xi_{-1,0}}$; $\tilde{D}_{0,+1} = \dfrac{D_{0,+1}}{\xi_{0,+1}}$; $Y_s \geq 1$; $0 < Y_d \leq 1$; $Y_sY_d > 0$; $\xi_{-1,0} \geq 1$; $\xi_{0,+1} \geq 1$; $\xi_{-1,+1} \geq 1$.

Здесь заметим, что для узких зон (при $\xi_{Z,Z'} = 1$ для $Z, Z' = -1, 0, +1$) (13) переходит в (12), а в формулах для корней λ_i ($i = 2, \ldots, 5$) длины экранирования Λ_s и диффузии Λ_d разделяются. Для широких {1}- и {2}-зон дефектов ($W_1 + W_2 > k_BT$ и $\xi_{Z,Z'} > 1$; $\xi_{-1,0} \neq \xi_{0,+1} \neq \xi_{-1,+1}$) в формулах для корней λ_i ($i = 2, \ldots, 5$) невозможно аналитически разделить длины экранирования Λ_s и диффузии Λ_d.

Обсуждение результатов. В дрейфово-диффузионном приближении составлена система линейных дифференциальных уравнений для описания прыжковой миграции как одиночных электронов, так и пар электронов по двухуровневым (трехзарядным) точечным дефектам одного сорта (вида) в кристаллическом полупроводнике. При решении этой системы рассмотрены частные случаи узких и широких зон (полос) уровней дефектов в запрещенной зоне (энергетической щели) полупроводника. Если энергетические ширины зон дефектов меньше тепловой энергии, то можно аналитически выделить выражения для длины экранирования внешнего стационарного электрического поля и длины диффузии электронов по дефектам, и они совпадают с полученными ранее [2; 6]. Если энергетические ширины зон дефектов больше тепловой энергии, то аналитически выделить длину экранирования внешнего стационарного электрического поля и длину диффузии электронов по дефектам невозможно.

Работа выполнена в рамках программы Республики Беларусь «Кристаллические и молекулярные структуры».

Литература

1. *Поклонский Н. А.* // Международ. зимняя школа по физике полупроводников 2011: Науч. прогр. и тез. докл., С.-Петербург – Зеленогорск, 25–28 февр. 2011 г. СПб., 2011. С. 43–48.

2. *Поклонский Н. А., Вырко С. А., Забродский А. Г.* // ФТП. 2008. Т. 42, № 12. С. 1420–1425.
3. *Pollak M.* // Phys. Status Solidi B. 2002. Vol. 230, N 1. P. 295–304.
4. Radiation effects in semiconductors / ed. by K. Iniewski. Boca Raton, 2011. – 420 p.
5. *Брудный В. Н., Колин Н. Г., Смирнов Л. С.* // ФТП. 2007. Т. 41, № 9. С. 1031–1040.
6. *Поклонский Н. А., Лопатин С. Ю.* // ФТТ. 1998. Т. 40, № 10. С. 1805–1809.
7. *Poklonskii N. A., Stelmakh V. F., Tkachev V. D., Voitikov S. V.* // Phys. Status Solidi B. 1978. Vol. 88, N 2. P. K165–K168.
8. *Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskii A. G.* // Semicond. Sci. Technol. 2010. Vol. 25, N 8. P. 085006 (6 pp.).
9. *Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskii A. G.* // Solid State Commun. 2009. Vol. 149, N 31–32. P. 1248–1253.
10. *Poklonski N. A., Stelmakh V. F.* // Phys. Status Solidi B. 1983. Vol. 117, N 1. P. 93–99.
11. *Поклонский Н. А., Стельмах В. Ф., Ткачев В. Д.* // Докл. АН БССР. 1976. Т. 20, № 9. С. 783–785.
12. *Красинькова М. В., Мойжес Б. Я.* // ФТП. 1990. Т. 24, № 11. С. 1934–1942.
13. *Каширина Н. И., Лахно В. Д.* // УФН. 2010. Т. 180, № 5. С. 449–473.
14. *Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г.* Физика полупроводников. М., 1990. – 688 с.
15. *Арнольд В. И. Обыкновенные дифференциальные уравнения.* Ижевск, 2000. – 368 с.
16. *Manifacier J.-C., Henisch H. K.* // J. Phys. Chem. Solids. 1980. Vol. 41, N 11. P. 1285–1288.

N. A. POKLONSKI, A. I. KOVALEV, S. A. VYRKO

poklonski@bsu.by

DRIFT AND DIFFUSION OF ELECTRONS VIA TWO-LEVEL (TRIPLE-CHARGED) POINT DEFECTS IN CRYSTALLINE SEMICONDUCTORS

Summary

In the drift-diffusion approximation, we considered the migration of both single electrons and pairs of electrons (bipolarons) due to their hops via immobile point defects of one kind in three charge states (–1, 0, +1) when an external electric field is applied to a semiconductor. We found the analytical expressions for the screening length of the stationary electric field and for the diffusion length of electrons hopping via such defects of the crystalline lattice.