

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.37

**ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ В КРИСТАЛЛАХ
НА ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНУЮ РЕКОМБИНАЦИЮ****А. Н. Васильев, Б. Н. Яценко***(кафедра оптики и спектроскопии)*

E-mail: boris_yatsenko@opts.phys.msu.ru

Работа посвящена исследованию влияния электрических полей на электронно-дырочную рекомбинацию в широкозонных диэлектриках. Изучена статистика флуктуационных полей в кристаллах. Рассчитано среднее влияние случайных полей на вероятность рекомбинации. Показано, что с ростом концентрации дефектов вероятности рекомбинации падают степенным образом с дробным показателем степени.

Скорость электронно-дырочной рекомбинации в диэлектриках, возбуждаемых высокоэнергетичными фотонами или ионизирующими частицами, во многом определяет кинетику процессов и распределение электронных возбуждений как по типам (электроны, дырки, экситоны различных типов, захваченные на центрах носители и т.п.), так и по пространству. Эта рекомбинация может идти как непосредственно (с образованием экситона), так и путем последовательного захвата на центр (например, рекомбинация электрона с положительно заряженным центром с последующим захватом дырки и образованием возбужденного состояния центра). Оба этих процесса имеют общие особенности. В отличие от хорошо изученного случая рекомбинации в полупроводниках [1] в широкозонных кристаллах электрические поля практически не экранируются, и поэтому существенно усиливается роль кулоновских эффектов как за счет непосредственного взаимодействия носителей, так и за счет случайных или стационарных полей, возникающих в кристаллах благодаря наличию заряженных дефектов и дислокаций, присутствия посторонних носителей заряда и т.д. Рекомбинация в неполярных углеводородных стеклах подробно описана в работе [2]. Наиболее сильное влияние кулоновские эффекты могут оказывать в плотных треках, возникающих после пролета тяжелых ионизирующих частиц, при воздействии интенсивного возбуждения и в случае зарядки кристалла из-за вылета фотоэлектронов.

Задача учета кулоновских эффектов распадается на две части: на оценку влияния внешних (по отношению к рекомбинирующим частицам) электрических полей на рекомбинацию разноименно заряженных возбуждений и на оценку статистики электрических полей. Такой подход позволяет установить зависимость средней скорости рекомбинации от параметров, определяющих случайные поля в кристалле. В настоящей работе учитывались случайные поля,

создаваемые точечными зарядами или заряженными линейными дислокациями.

В отсутствие таких полей скорость захвата электрона на центр (или рекомбинации с дыркой) в ионных диэлектрических кристаллах будет определяться моделью Онсагера [3], учитывающей диффузионный характер движения электрона (в ионных кристаллах длина свободного пробега электрона мала из-за взаимодействия с поляризационными фононами). При этом радиус сферы, при попадании в которую электрон оказывается захваченным, определяется из условия равенства потенциальной энергии электрона и его тепловой энергии, что дает значение для радиуса Онсагера $R_0 = e^2/\varepsilon kT$ (где ε — диэлектрическая проницаемость кристалла), а скорость захвата электрона на заряженный центр будет определяться как $\beta_0 = 4\pi D_e R_0$ (здесь D_e — коэффициент диффузии электрона; при учете подвижности захватывающих центров необходимо вместо D_e подставить сумму коэффициентов диффузии носителей обоих типов).

Вместо сложного точного решения для вероятности рекомбинации электрона и центра в присутствии постоянного внешнего электрического поля [4] и вычисления с помощью нее скорости захвата электрона на центр использовался приближенный подход, который обеспечивает большую наглядность при дальнейшем усреднении по полю скорости захвата электрона центром. Учет влияния дополнительных электрических полей можно произвести на качественном уровне, рассматривая область захвата, ограниченную изоэнергетической поверхностью, определяемой равенством тепловой и потенциальной энергии электрона. Если ввести эффективный радиус Онсагера как среднее значение расстояния от центра до этой поверхности, то он оказывается равным $R_E(E) = r_E(E)R_0/(r_E(E) + 2R_0)$, где $r_E(E) = \sqrt{e/\varepsilon E}$, а E — внешнее электрическое поле в точке, в которой находится притягивающий центр.

При малых полях $r_E \rightarrow \infty$ и тем самым $R_E \rightarrow R_0$. Естественно, что эффективный радиус Онсагера меньше R_0 для конечных значений поля. Скорость захвата электрона на центр будет определяться при этом как $\beta_E = 4\pi D_e R_E$.

Флуктуационные поля в кристалле с точечными заряженными дефектами или носителями могут быть описаны с помощью функции распределения модуля напряженности поля [5]: $W^p(E) = (E_0^p)^{-1} H^p(E/E_0^p)$, где введена так называемая функция Хольцмарка $H^p(y) = 2\pi^{-1} y \int_0^\infty dx x \sin(yx) \exp(-x^{3/2})$; характерное значение поля $E_0^p = \lambda e n_p^{2/3}$ определяется через концентрацию точечных зарядов в кристалле n_p ; $\lambda = 2\pi(4/15)^{2/3}$. Поле E_0^p соответствует значению поля на расстоянии $n_p^{-1/3}$ от одиночного заряженного центра.

Подход, аналогичный примененному в [5], можно использовать и при вычислении функции распределения электрического поля заряженных дислокаций. При этом будем предполагать, что дислокация представляет собой бесконечно длинную и бесконечно тонкую равномерно заряженную нить. Будем считать, что дислокацию окружает облако заряженных частиц противоположного знака (электронов или дырок) с соответствующей экспоненциальной функцией распределения, которые экранируют поле дислокации. При этом, проводя последовательно вычисления, аналогичные приведенным в [5], получим выражение для функции распределения модуля напряженности электрического поля для заряженных дислокаций: $W^d(E) = (E_0^d)^{-1} H^d(E/E_0^d)$, где введена функция $H^d(y) = y/(1+y^2)^{3/2}$; характерное значение поля $E_0^d = 2\pi n_d b \gamma / a$ определяется через концентрацию дислокаций в кристалле n_d ; b — линейный заряд дислокации; $1/a$ — характерный радиус экранирования; $\gamma = 0.172831$. Графики функций распределения модуля напряженности электрического поля для точечных дефектов и для дислокаций представлены на рис. 1.

Как известно [3], скорость захвата электрона центром в диффузионном приближении прямо пропорциональна величине радиуса Онсагера. Поэтому для получения усредненного значения величины скорости захвата необходимо усреднить эффективный радиус Онсагера с учетом функции распределения напряженности электрического поля. Проводя это усреднение, используя функции распределения модуля напряженности электрического поля точечных дефектов и дислокаций, а также переходя к нормированным величинам эффективного радиуса Онсагера и концентраций точечных дефектов и дислокаций, получим

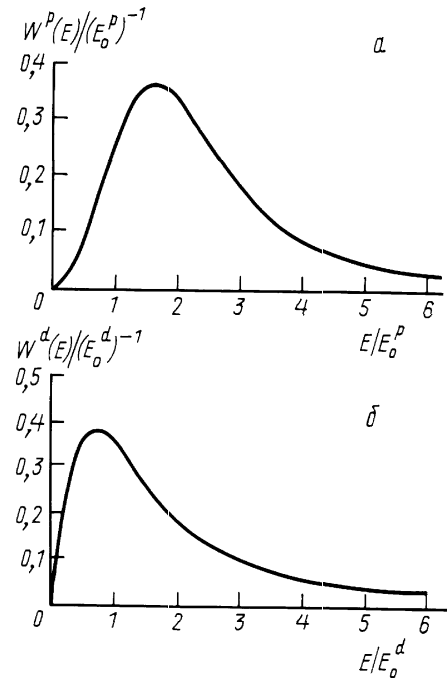


Рис. 1. Зависимость плотности вероятности модуля напряженности электрического поля (а) точечных дефектов (нормированной на $(E_0^p)^{-1}$) и (б) дислокаций (нормированной на $(E_0^d)^{-1}$) от величины напряженности электрического поля точечных дефектов (нормированной на E_0^p) и дислокаций (нормированной на E_0^d) соответственно

$$R_{\text{ons}}^\nu(n_n^\nu) = \int_0^\infty (1 + (n_n^\nu)^{\alpha_\nu} \sqrt{x})^{-1} H^\nu(x) dx, \quad \nu = p, d, \quad (1)$$

где $R_{\text{ons}}^\nu = \langle R_E \rangle^\nu / R_0$, $n_n^\nu = n^\nu / n_0^\nu$, $n_0^p = (2\sqrt{\epsilon\lambda} R_0)^{-3}$, $n_0^d = ea(8\pi\gamma\epsilon b R_0^2)^{-1}$, $\alpha_p = 1/3$, $\alpha_d = 1/2$. Здесь индекс p соответствует точечным дефектам, а индекс d — дислокациям. Графики функций (1) представлены на рис 2. Более простые функциональные зависимости получаются в приближениях малых и больших концентраций точечных дефектов и дислокаций. В этом случае получим

$$R_{\text{ons}}^\nu(n_n^\nu) = 1 - C_{0.5}^\nu (n_n^\nu)^{\alpha_\nu} \quad \text{при } n_n^\nu \ll 1, \quad \nu = p, d, \quad (2)$$

$$R_{\text{ons}}^\nu(n_n^\nu) = C_{-0.5}^\nu (n_n^\nu)^{-\alpha_\nu} \quad \text{при } n_n^\nu \gg 1, \quad \nu = p, d, \quad (3)$$

где $C_m^\nu = \int_0^\infty x^m H^\nu(x) dx$, $C_{0.5}^p = 1.58294$, $C_{-0.5}^p = 0.712021$, $C_{0.5}^d = 1.85407$, $C_{-0.5}^d = 0.847213$. При этом скорость захвата будет определяться по формуле

$$\beta^\nu(n_n^\nu) = 4\pi D_e R_0 R_{\text{ons}}^\nu(n_n^\nu). \quad (4)$$

Зависимости (2) и (3) также представлены на рис. 2.

Таким образом, эффективный радиус Онсагера, а следовательно, и скорость электронно-дырочной рекомбинации существенно зависят от внешнего

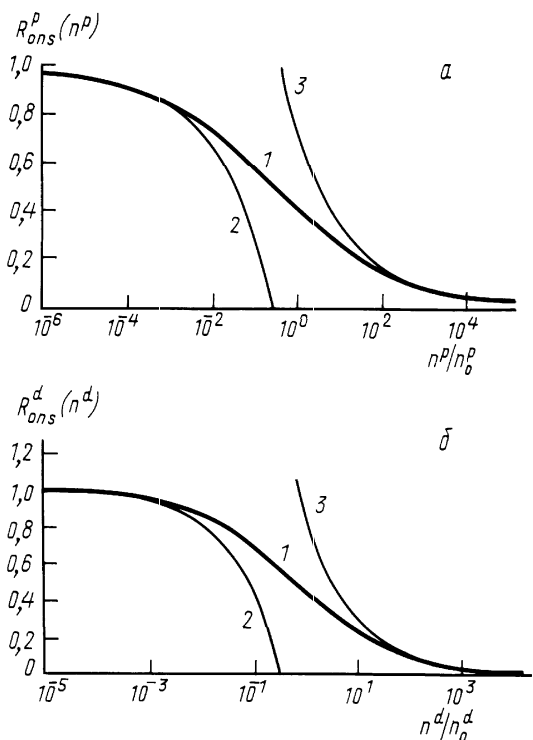


Рис. 2. Зависимость эффективного радиуса Онсагера, нормированного на R_0 , от величины концентрации точечных дефектов, нормированной на n_0^p (случай а), и от величины концентрации дислокаций, нормированной на n_0^d (случай б). Кривая а1 рассчитана для всего диапазона изменения концентраций точечных дефектов; кривые а2 и а3 — асимптотики для малых концентраций ($n^p \ll n_0^p$) и для больших концентраций ($n^p \gg n_0^p$) соответственно. Кривая б1 рассчитана для всего диапазона изменения концентраций дислокаций; кривые б2 и б3 — асимптотики для малых концентраций ($n^d \ll n_0^d$) и для больших концентраций ($n^d \gg n_0^d$) соответственно

электрического поля. Удастся выразить аналитически функции распределения флуктуационных элект-

рических полей, вызванных наличием заряженных точечных дефектов и дислокаций. На основании этих функций распределения можно получить зависимости эффективного радиуса Онсагера от концентрации дислокаций и точечных дефектов в кристалле. Как видно из рис. 2 и формул (1)–(4), радиус Онсагера и скорость электронно-дырочной рекомбинации сильно падают с ростом концентрации точечных дефектов и дислокаций. При больших концентрациях дефектов и дислокаций с ростом концентрации вероятность рекомбинации падает с дробным показателем степени [6]. Учет этой зависимости приводит к принципиально иной функциональной зависимости интенсивности электронно-дырочной рекомбинации, в отличие от случая, когда мы не учитываем влияния флуктуационных полей.

Литература

1. Абакумов В.Н., Перель В.И., Ясевич И.Н. // ФТП. 1978. **12**, № 1. С. 4.
2. Новиков Г.Ф., Яковлев Б. С. // Усп. химии. 1994. **63**, № 5. С. 402.
3. Закис Ю.Р., Канторович Л.Н., Котомин Е.А. и др. Модели процессов в широкощелевых твердых телах с дефектами. Рига: Зинатне, 1991.
4. Onsager L. // Phys. Rev. 1938. **54**. P. 554.
5. Климонтович Ю.Л. Кинетическая теория электромагнитных процессов. М.: Наука, 1980.
6. Васильев А.Н., Яценко Б.Н. // Сб. трудов Международной научной молодежной школы «Оптика-2000». СПб., 2000. С. 142.

Поступила в редакцию
24.05.02