

## **ОПТИЧНЕ ВИПРОМІНЮВАННЯ КРИСТАЛІЧНОЮ ГРАТКОЮ, ЗБУДЖУВАНОЮ ГАРЯЧИМИ НОСІЯМИ ЗАРЯДУ В БАР'ЄРНІЙ НАПІВПРОВІДНИКОВІЙ СТРУКТУРІ**

Розглянуто можливі механізми нерівноважного випромінювання кристалічною граткою, збудженої високоенергетичними носіями в напівпровідниковій бар'єрній структурі. Виходячи з принципу детальної рівноваги знайдено імовірності випромінювального переходу гратки для одно- і двофононного процесів. Порівняння з результатами експерименту свідчить про можливість спостереження люмінесцентного випромінювання гратки в передпробійному стані Au-SiC діодної структури.

Наявність гарячих носіїв заряду в напівпровіднику завжди приводить до інтенсивного генерування нерівноважних фононів. Більш того, при умовах, коли ударна іонізація атомів кристалічної гратки не відбувається, емісія фононів є основним процесом, що стримує розігрів носіїв заряду електричним полем і зумовлює релаксацію енергії гарячого носія після виключення поля або його виходу за межі дії сильного поля. Одночасно з генеруванням фононів гарячий носій заряду випромінює фотони. Хоч імовірність такого процесу набагато менша імовірності випромінювання фонону, оптичне випромінювання гарячими носіями спостерігається в діодах на різних напівпровідниках [1], транзисторних структурах при певному режимі роботи [2], тощо. Виникає питання про оптичне випромінювання самою кристалічною граткою, яка за умов збудження такого випромінювання знаходиться в суттєво нерівноважному стані.

## 1. Імовірність випромінювання фотона кристалічною ґраткою

Оскільки при акті випромінювання фотона повинен виконуватись закон збереження імпульсу, а імпульс фотона малий в порівнянні з імпульсом фонона, перш за все слід розглянути виникнення фотона при зникненні оптичного фонона в околі точки Бріллюена з малими хвильовими векторами. Це відповідає області енергії оптичних фононів, де кристалічна ґратка інтенсивно поглинає і відбиває інфрачервоне випромінювання, – добре відоме явище так званих залишкових променів.

Імовірність квантового переходу кристалічної ґратки з випромінюванням фотона можна знайти, виходячи з того, що такий перехід є зворотнім по відношенню до поглинання фотона ґраткою з такою ж енергією. Згідно принципу детальної рівноваги прямі і зворотні переходи в стані термодинамічної рівноваги зрівноважують одні одних, тобто число актів випромінювання фотона кристалічною ґраткою рівне числу актів поглинання нею планківського випромінювання

$$\frac{g(h\omega) n_q(h\omega)}{\tau_1} = \frac{c}{n_o} \rho(h\omega) \alpha(h\omega) , \quad (1)$$

де  $g(h\omega)$  – густина фононних станів,  $n_q(h\omega)$  – число фононів з енергією  $h\omega$ ,

$$n_q(h\omega) = \frac{1}{\exp(h\omega / kT) - 1} , \quad (2)$$

$\tau_1$  – час випромінювання фотона кристалічною ґраткою, тобто величина обернення імовірності такого процесу,  $n_o$  – показник заломлення,  $\alpha(h\omega)$  – коефіцієнт поглинання світла кристалом,  $c$  – швидкість світла в вакуумі,  $\rho(h\omega)$  – функція Планка

$$\rho(h\omega) = \frac{n_o}{c^2 \pi^2 h^2} (h\omega)^2 \frac{1}{\exp(h\omega / kT) - 1} . \quad (3)$$

З формули (1), використовуючи (2) і (3), одержуємо для імовірності випромінювального переходу:

$$\frac{1}{\tau_1} = \frac{n_o}{c^2 \pi^2 h^2} (h\omega)^2 \frac{\alpha(h\omega)}{g(h\omega)} , \quad (4)$$

звідки слідує її суттєва залежність  $\tau_1$  від коефіцієнта поглинання світла  $\alpha(\hbar\omega)$  та густини фононних станів  $g(\hbar\omega)$ .

Поглинання світла з народженням оптичного фонона, як уже зазначалось, має місце для фононів з хвильовими векторами  $q \approx 0$ . Однак закон збереження імпульсу може виконуватись і при взаємодії світла не тільки з довгохвильовими фононами. При поглинанні фотона може народжуватись одночасно два акустичні або оптичні фонони з протилежно направленими хвильовими векторами і тоді хвильові вектори фононів можуть бути значними, але такими, щоб різниця їх величин дорівнювала хвильовому вектору фотона. При цьому енергія поглинутого фотона дорівнює сумі енергії фононів (тобто приблизно подвоєній енергії кожного з фононів). Можливе поглинання фотона з народженням оптичного фонона і одночасним поглинанням акустичного фонона з приблизно однаковими хвильовими векторами (енергія поглинутого фотона буде дорівнювати різниці енергії оптичного і акустичного фононів), а також поглинання фотона з участю трьох і більшого числа фононів. На відміну від однофононних процесів, коли поглинання має “резонансний” характер, взаємодія з декількома фононами приводить до появи в спектрах інфрачервоного поглинання широких смуг. Однак, в таких спектрах завжди спостерігаються особливості (максимуми, перегини, тощо), зумовлені особливостями функції густини фононних станів  $g(\hbar\omega)$ . Зокрема, густина станів, як для акустичних, так і оптичних фононів має максимум поблизу країв зони Бріллюена, що відповідає максимуму в спектрах поглинання при енергіях, рівних подвоєній енергії відповідних фононів.

Розглянемо випромінювання фотона, що є результатом поглинання двох фононів з протилежно направленими хвильовими векторами. Для цього випадку фотону з енергією  $\hbar\omega$  відповідає енергія фонона  $\hbar\omega/2$ . Тому, позначаючи час випромінювання фотона через  $t_1(\hbar\omega)$ , можна записати

$$\frac{g(\hbar\omega/2) n_q(\hbar\omega/2)}{\tau_2(\hbar\omega)} = \frac{c}{n_o} \alpha(\hbar\omega) \rho(\hbar\omega), \quad (5)$$

звідкіля із врахуванням (2) і (3) одержуємо

$$\frac{1}{\tau_2(\hbar\omega)} = \frac{n_0}{c^2 \pi^2 \hbar^3} (\hbar\omega)^2 \frac{\alpha(\hbar\omega) \exp(\hbar\omega / 2kT) - 1}{g(\hbar\omega) \exp(\hbar\omega / kT) - 1} . \quad (6)$$

Щоб зробити оцінку імовірності досліджуваного процесу, скористаємося дебаївським наближенням для густини станів акустичних фононів [3]

$$g(\hbar\omega / 2) = \frac{(\hbar\omega / 2)^2}{2\pi^2 \hbar^3 u^3} , \quad (7)$$

де  $u$  – швидкість звуку в кристалі, яку можна покласти рівною  $5 \cdot 10^5$  см/с. Підстановка (7) в (6) остаточно дає

$$\frac{1}{\tau_2(\hbar\omega)} = \frac{8n_0 u^3}{c^2} \alpha(\hbar\omega) \frac{\exp(\hbar\omega / 2kT) - 1}{\exp(\hbar\omega / kT) - 1} . \quad (8)$$

Для акустичних фононів густина станів має максимум в околі краю зони Бріллюена. Приймаючи енергію фонона 0,05 еВ і скориставшись тим, що коефіцієнт поглинання при двофононному процесі знаходиться в межах  $1-100 \text{ см}^{-1}$  [4], для випромінювання фотона з енергією 0,1 еВ одержуємо час життя  $\tau_2$  рівним  $10-100$  с. Знайдена величина  $\tau_2$  не може сильно відрізнятись і для випромінювання фотона в результаті знищення двох оптичних фононів, оскільки при цьому коефіцієнт поглинання світла того ж порядку величина, а густина станів близька до величини, яка визначається формулою (7). Останнє є природнім, тому що густина станів  $\sim 10^{24} \text{ см}^{-3} \text{ еВ}^{-1}$ , яка впливає з (7), по порядку величини рівна значенню, яке одержується діленням концентрації атомів  $10^{22}-10^{23} \text{ см}^{-1}$  на інтервал, який займає смуга акустичних або оптичних фононів (декілька сотих долей еВ). Коефіцієнт поглинання в області залишкових променів звичайно складає  $\sim 10^4 \text{ см}^{-1}$ , а у виразі для імовірності випромінювального переходу відсутні (на відміну від (8)) експоненціальні множники. Розрахунковий час випромінювання при однофононному процесі виявляється рівним  $\sim 10^{-1}$  с.

Зроблені розрахунки не можуть претендувати на високу точність і є тільки оцінковими. Проте з одержаних результатів

безперечно впливають важливі висновки. Головний з них полягає в тому, що час випромінювального переходу, як для одно-, так і двофонових процесів, набагато більший від часу життя фону. Як відомо [5], остання величина при кімнатних температурах знаходиться в межах  $10^{-11}$ – $10^{-12}$  с, а при пониженні температури зростає, досягаючи при низьких температурах ( $\sim 20$  К) значень  $10^{-7}$ – $10^{-8}$  с. З цього витікає, що квантова ефективність процесу випромінювання фотона кристалічною ґраткою досить низька. До того ж, при збудженні люмінесцентного свічення гарячими носіями в основному генеруються фонони з великими хвильовими векторами, тому однофонові випромінювальні переходи малоімовірні. Таким чином, внутрішня квантова ефективність випромінювання фотона кристалічною ґраткою при збудженні гарячими носіями заряду лежить в межах  $10^{-8}$ – $10^{-11}$ . Струм через зразок звичайно не перевищує 0,1–1 А, а кожний гарячий носій з енергією  $\sim 1$  еВ породжує порядку  $10^2$  фононів з енергією, що відповідає краю зони Бріллюена. В результаті, в одиницю часу в зразку генерується  $10^{21}$ – $10^{22}$  високоенергетичних фононів, що для вказаних значень ефективності відповідає потужності оптичного випромінювання  $10^{-9}$ – $10^{-6}$  Вт. Слід мати на увазі, що крім врахованих безвипромінювальних переходів, можливі також інші конкуруючі процеси, самопоглинання самим кристалом та інші ефекти, що приводять до зменшення інтенсивності випромінювання. Все ж, знайдене значення потужності оптичного випромінювання кристалічною ґраткою дає надії на її реєстрацію. Сприятливим є те, що безвипромінювальні процеси в кінцевому рахунку хоч і приводять до надлишкового теплового випромінювання, але в спектральній області, яка не відповідає розглядуванім випромінювальним переходам, а є більш довгохвильовим.

## **2. Порівняння з експериментом**

Експериментальні дослідження проводились на діодах Шотткі, виготовлених вакуумним напленням Au на хімічно оброблені монокристали SiC політипу 6H з концентрацією некомпенсованих донорів  $\sim 10^{18}$  см $^{-2}$ . Товщина шару золота була біля 10 нм, що забезпечувало його оптичну прозорість в усій

досліджуваній спектральній області. В діапазоні 0,3–2 мкм використовувався подвійний монохроматор ДМР-4 з фотопомножувачем ФЕУ-79 або охолоджуванім (210 К) PbS фоторезистором на виході. Градування спектральної чутливості установки проводилось за допомогою паспортизованої лампи СИ8-200У. В діапазоні 2–14 мкм використовувався набір із 15 імерсійних світлофільтрів з відомим оптичним пропусканням кожного з них, а також охолоджувані PbSe (260 К) і CdHgTe (77 К) фотодетектори з відомими спектрами фоточутливості. Для покращання співвідношення сигнал/шум при вимірюваннях використовувалось збудження свічення прямокутними імпульсами напруги і система синхродетектування.

На рис. 1 представлений спектральний розподіл енергії випромінювання Au–SiC діода при прикладені оберненої напруги  $\sim 12$  В при реєстрації через прозорий Au електрод. Як видно, випромінювання діода включає в себе свічення в області 0,3–2 мкм, зумовлене непрямими переходами гарячих носіїв заряду із суцільним спектром, на яке накладаються дві широкі смуги з максимумами біля 0,5 та 0,8 мкм, зумовленими прямими переходами між підзонами однієї і тієї ж дозволеної зони [6]. Квантова ефективність такого випромінювання низька ( $10^{-6}$ – $10^{-7}$ ), оскільки гарячий носій заряду швидко термолізується, генеруючи каскад високоенергетичних фононів.

З рис. 1 також видно, що в спектрі Au-SiC діода, крім випромінювання в області 0,3–2 еВ, присутня приблизно на два порядки інтенсивніше смуга в області 3–10 мкм. Ряд фактів вказують на те, що ця смуга зумовлена не звичайним розігрівом зразка в результаті проходження струму, а гарячими фононами, генерованими гарячими носіями заряду, тобто є своєрідним люмінесцентним свіченням.

(1) Максимуми в спектрі при 6 і 10 мкм відповідають подвоєній енергії оптичних фононів на границі зони Бріллюена 0,095 еВ (TO) і 0,105 еВ (LO) та акустичних фононів 0,067 еВ (LA) [7].

(2) При пропусканні струму через кристал з омичними контактами в області 3–10 мкм спостерігається теплове

випромінювання з подібним спектром, але з якісною відміною в його поведінці при зміні величини струму через зразок (рис. 2а). Форма спектру випромінювання Au-SiC діода практично не змінюється при зміні збуджуючого струму. Про це свідчать дані на рис. 2б, де показана спектральна залежність відношення спектрів, знятих при струмах 0,4 і 0,1 А. Видно, що в межах розкиду експерименту при зміні струму в 4 рази форма спектру не змінюється. В той же час при зростанні струму через кристал з омичними контактами всього від 0,5 до 0,75 А має місце помітне збільшення внеску короткохвильового випромінювання, що й повинно бути для теплового процесу.

$I$ , відн.од.

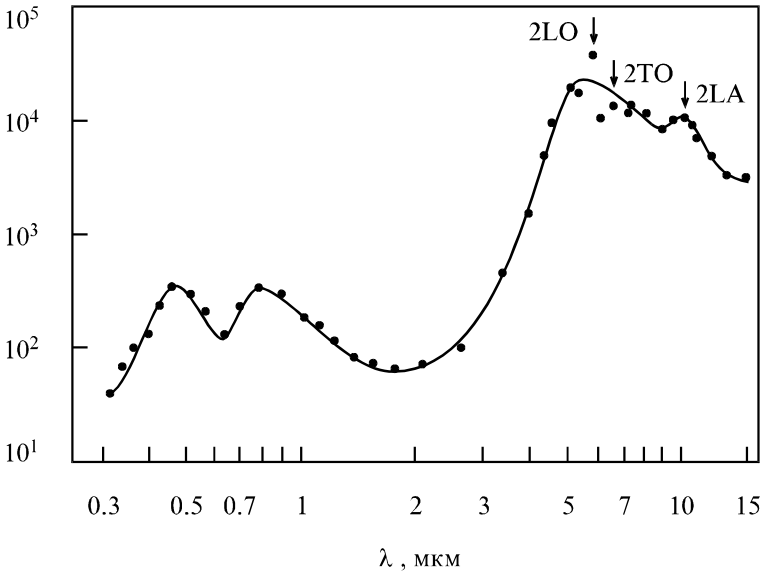


Рис. 1. Спектр випромінювання обернено-зміщеного Au-SiC діода при кімнатній температурі

(3) Оптична прозорість кристалу-підкладинки Au-SiC діода (товщина 0,4 мм) в області 3–10 мкм не перевищує 3–4 %. Тому випромінювання, зумовлене гарячими носіями в області бар'єру, різко послаблюється при його реєстрації крізь кристал, а не зі сторони прозорого Au контакту. При реєстрації через кристал,

випромінювання різко обривається при  $\lambda < 0,4$  мкм, тобто коли енергія фотона більша ширини забороненої зони SiC (~3 eВ). При цьому, однак, інтенсивність і форма спектру випромінювання в області 3–10 мкм практично не змінюється в порівнянні з рис.1. Це зрозуміло, якщо допустити “фононний” механізм досліджуваного випромінювання, тобто випромінювання збудженої кристалічної ґратки. Приймаючи швидкість звуку в кристалі  $\sim 5 \cdot 10^5$  см/с, одержуємо час проходження фонона через кристал товщиною 0,5 мм рівним  $10^{-7}$  с. Це набагато більше вказаного вище середнього часу життя фононів. Проте випромінювання створюють тільки “довгоживучі” фонони, число яких мале, що й зумовлює низьку ефективність “фононної” люмінесценції.

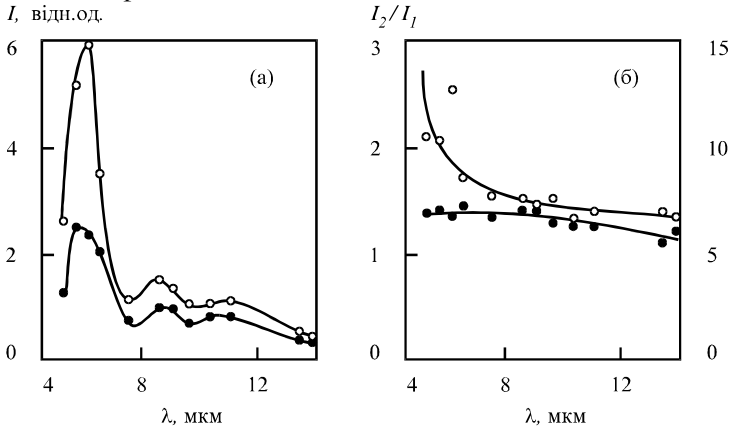


Рис. 2 а – Спектри випромінювання SiC кристалу з омичними контактами при струмах 0,5 і 0,75 А. б – Відношення тих же спектрів (незаповнені кружки, ліва шкала) і спектрів випромінювання Au-SiC діода при струмах 0.1 і 0,4 (заповнені кружки, права шкала).

### Заключення

Приведений вище теоретичний аналіз вказує на те, що квантова ефективність випромінювання фотонів кристалічною ґраткою хоч і низька, але достатня для його реєстрації методами, що застосовуються при дослідженні люмінесцентних явищ в напівпровідниках. В спектрах передпробійної електролюмінесценції Au-SiC структури виявлено випромінювання в області 3-10 мкм з



максимумами, що відповідають енергіям фотонів, рівним подвоєній енергії оптичних і акустичних фононів в SiC на границі першої зони Бріллюена.

Автори виражають подяку В.М.Склярчуку за постійну допомогу при проведенні експерименту.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Косяченко Л.А., Мазур М.П., Склярчук В.М. Механізми і спектральний розподіл гарячої електролюмінесценції кремнієвих біполярних транзисторних структур // УФЖ. – 1997. – **42**, N7.– С. 846–852.
2. Kosyachenko L.A. Hot-carrier optical emission in semiconductor diodes // *Semicond. Sci. and Technol.* –1994.–**9**,N 5S. –P. 662–665.
3. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела.– М.: Наука, 1978.
4. Смит Р. Полупроводники.– М.: Мир, 1982. – 560 с.
5. Блейкмор Дж. Физика твердого тела. – М.: Мир, 1988. – 608 с.
6. Косяченко Л.А. Оптичне випромінювання гарячих електронів в діодних SiC структурах //УФЖ .– 1994. – **39**, N2.– С. 181–188.
7. Phonon dispersion curves by Raman scattering in SiC, polytypes 3C, 4H, 6H, 15R, and 21R. / D.W. Feldman, J.H. Parker, J.W. Choyke, L. Patric // *Phys Rev.*–1968.–**173**, N3.– D. 787–793.

#### SUMMARY

KOSYACHENKO L.A., SKLYARCHUK O.F.

#### **OPTICAL EMISSION OF CRYSTAL LATTICE EXCITED BY HOT CHARGE CARRIERS IN A SILICON CARBIDE DIODE STRUCTURE**

Possible mechanisms of the photon nonequilibrium emission excited by high-energy charge carriers in the semiconductor structure have been considered theoretically. With the detailed balance principle the probabilities of the radiative transition of the lattice for one- and two-phonon processes are obtained. A comparison with the presented experimental results is indicative of the excitation of the lattice luminescent emission from Au-SiC diode structure under prebreakdown conditions.