

# Un nuevo modelo sobre la captura de electrones en donadores poco profundos en Ge y Si a bajas temperaturas

*Gerardo Fonthal\*, María E. Pirela y Jorge Martínez*

*Unidad Académica Electrónica, Departamento de Física  
Facultad Experimental de Ciencias, Universidad del Zulia, Maracaibo, Venezuela*

Recibido: 4-11-96 Aceptado: 11-06-97

## Resumen

Se presenta un nuevo modelo sobre la captura de electrones en niveles donadores poco profundos de semiconductores cristalinos en función de la temperatura. Se compara, además, con los modelos tradicionales de Lax y Abakumov cuando se hicieron ajustes a ocho conjuntos de datos publicados de Ge y Si a bajas temperaturas. El coeficiente de correlación fue mejor para el nuevo modelo. Con los parámetros obtenidos del ajuste con el nuevo modelo se aplicaron regresiones lineales tanto para la energía de percolación como para la temperatura de saturación del "hopping" de Shklovskii. Los coeficientes de correlación fueron de 0,96 y 0,92 respectivamente. Los resultados prometen abrir un nuevo y favorable camino para explicar la caída de la sección eficaz de captura con la temperatura en los semiconductores cristalinos, en especial a muy bajas temperaturas.

**Palabras clave:** Coeficiente de captura; conducción por saltos entre impurezas; Ge; Si.

## A new model about the electron capture into shallow donors in Ge and Si at low temperatures

### Abstract

A new model about electron capture into shallow donor levels in crystalline semiconductors which depends on temperature is presented. It was compared with the traditional Lax's and Abakumov's models when they were fitted to eight sets from published data of Ge and Si at low temperature. This new model fitted better than the others. Linear regressions were applied for both the percolation energy and Shklovskii saturation temperature of hopping conduction with the fitting parameters of this new model. The correlation coefficients were 0.96 and 0.92 respectively. The results provide a new and favorable route to explain the thermal quenching of the capture cross-section on crystalline semiconductor, specially at very low temperatures.

**Key words:** Capture coefficient; hopping conductivity; Ge; Si.

### Introducción

La dependencia de la sección eficaz de captura de portadores en niveles de impurezas de semiconductores con la temperatura

ha sido tema de importancia en el análisis de la conductividad (1-10) y la fotoconductividad (11). Por otro lado la fotoconductividad y fotoluminiscencia de materiales amorfos a bajas temperaturas, explicadas en base a la

\* Autor para la correspondencia.

deslocalización de estados de impurezas (12-16), permiten reinterpretar los conceptos sobre la captura de portadores en materiales cristalinos en esas temperaturas. La luminiscencia conspira contra la conductividad porque le resta portadores al proceso conductivo, de manera tal que la variación de la sección eficaz por cualquier parámetro,  $e_j$ : la temperatura, afecta a ambas de manera inversa.

Varios autores (1,3,7,8) han tratado el problema de la sección eficaz de captura como un problema de dos cuerpos (portador e impureza ionizada) pero Shklovskii (17) demostró que la interacción donador-aceptor y donador-donor es muy importante en el rango de temperaturas de la conducción por salto entre impurezas o "hopping". Se pretende con este trabajo hacer un análisis de la sección eficaz de captura en el rango de temperatura de la conducción por saltos entre impurezas para datos experimentales publicados de Ge y Si que sin lugar a dudas han sido determinados como semiconductores cristalinos.

### Discusión

Con los modelos de pérdida de energía por cascada de Lax (7) y Abakumov (7) se han interpretado los datos experimentales de la captura de portadores libres por impurezas ionizadas, dando resultados satisfactorios pero alejándose del comportamiento a muy bajas temperaturas. Abakumov logró explicar la disminución de la pendiente del coeficiente de captura en la medida en que la temperatura bajaba. Otros modelos son por ejemplo los de Ascarelli-Rodriguez y Hamann-McWhorter, llamados modelos cuánticos, pero se alejan mucho de los resultados experimentales (4,5,18-20).

Fonthal (21) encontró una expresión para el coeficiente de captura deducido de la fotoluminiscencia de semiconductores amorfos y aplicada con éxito por él mismo en los cristalinos, de la forma

$$\beta_F = \frac{Cr^2[1+B]}{\left[1+B \exp\left(\frac{T}{T_0}\right)\right] + h(r_m) B \left[\exp\left(\frac{T}{T_0}\right) - 1\right]} \quad [1]$$

$r$  es la separación donador-aceptor independiente de  $T$  en el rango de temperaturas consideradas,  $h(r_m)$  un término inverso de la probabilidad de recombinación de los pares donores-aceptores y con variación pequeña con  $T$  en el rango de estudio,  $C$  y  $B$  constantes, y  $T_0$  una temperatura característica. Escrito de manera paramétrica se tiene:

$$\beta_F = \frac{P_1}{1 + P_2 \exp\left(\frac{T}{P_3}\right)} \quad [2]$$

$P_1$ ,  $P_2$  y  $P_3$  son parámetros para ajustar.

Por comparación se aplicó también el modelo de Lax a los datos experimentales. Según Lax, la sección eficaz de captura de electrones libres en niveles donadores se expresa en función de la temperatura ( $T$ ) como:

$$\sigma = \pi r_0^2 \left(\frac{kT}{ms^2}\right) \frac{r_0}{l} \quad [3]$$

donde  $r_0 = \frac{e^2 ms^2}{\epsilon (kT)^2}$  y  $l = \frac{2ms^2 l_0}{kT}$ ,  $r_0$  es el radio máximo de cercanía para que haya captura,  $l$  el camino libre medio,  $s$  es la velocidad del sonido para un fonón acústico,  $l_0$  una longitud independiente de  $T$ ,  $m$  la masa efectiva del electrón y  $\epsilon$  la permitividad del medio también independiente con  $T$  en las temperaturas del trabajo.

Para estandarizar el análisis se prefirió tomar el coeficiente de captura  $\beta$  más que la sección eficaz de captura. Como  $\beta$  es el producto de  $\sigma$  por la velocidad térmica,

$$\langle v \rangle = \left(\frac{8kT}{\pi m}\right)^{1/2} \text{ entonces :}$$

$$\beta_L = (2\pi m)^{1/2} \frac{s^2 e^6}{\epsilon l_0} (kT)^{-7/2} = P_1 T^{-7/2} \quad [4]$$

con  $P_1$  un parámetro para ajustar.

Igualmente se analizaron los datos con el modelo de Abakumov. Para Abakumov  $\sigma$  viene expresado como:

$$\sigma = \frac{4\pi e^2 z}{3l_0 \epsilon kT} \left[ \frac{e^2 z}{\epsilon (kT + 2.74m s^2)} \right]^2 \quad [5]$$

donde  $ez$  es la carga del centro atractor. Así entonces

$$\beta_A = \frac{(e^2 z)^3}{3l_0 \epsilon} \left( \frac{2^7 \pi}{mkT} \right)^{1/2} \left[ \frac{1}{\epsilon (kT + 2.74m s^2)} \right] = \frac{P_1}{T^{1/2} [T + P_2]^2} \quad [6]$$

con  $P_1$  y  $P_2$  parámetros para ajustar.

### Resultados

Las Figuras 1-4 son una muestra representativa de los resultados usando los modelos [2], [4] y [6] en los datos experimentales de

Brown (B1-4), Koenig-Brown-Schillinger (KBS1-3) y Abakumov (A1) para Ge y Si tipo n livianamente compensados. También fueron analizados los datos de Koenig (22) (K1), Elliot et al (23) (ESM1-2), y Ascarelli et al (1,24) (AR1-2), (AB1-2). La escala de la sección eficaz de captura aparece en unidades arbitrarias debido al desconocimiento de algunos términos, no suministrados por los autores, que por ser independientes de  $T$  no afectan el análisis.

La Tabla 1 muestra los distintos coeficientes de correlación para los tres modelos. En ella se observa que el ajuste por [2] presenta un coeficiente de correlación cercano a 1. El modelo [6] presenta un coeficiente menor debido a que su mínimo y máximo valor absoluto de la pendiente es 1/2 y 5/2 respectivamente, dificultándose el ajuste al cambio brusco de pendiente que se nota en las gráficas. Para el modelo [4] obviamente el ajuste es peor porque éste presenta una sola pendiente de valor  $-7/2$ . Se puede inferir de las gráficas que el modelo de Lax funciona mejor en las más altas temperaturas, el de Abakumov a temperaturas algo más bajas y el que se presenta en este artículo en un rango más amplio.

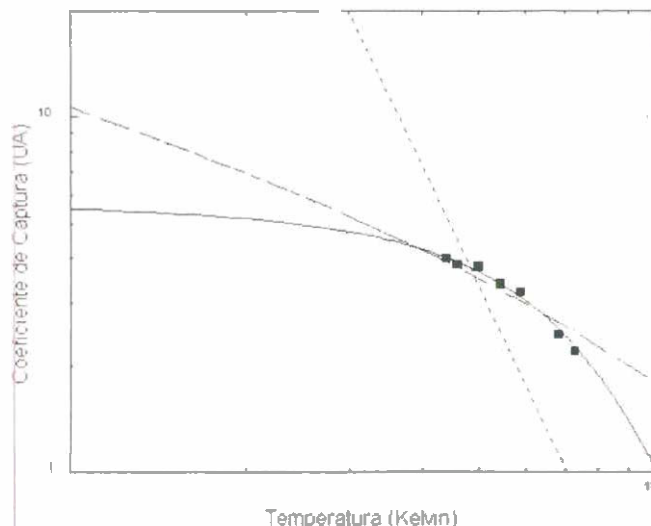


Figura 1. Ajuste del Coeficiente de captura en función de la Temperatura absoluta con los modelos de Lax (...), Abakumov (- - -) y Fonthal (—) para los datos experimentales B1 en Ge.

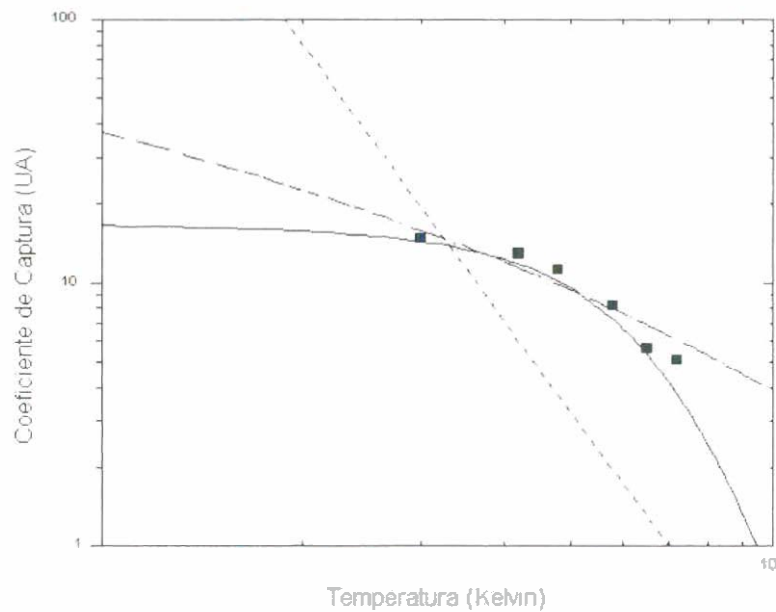


Figura 2. Ajuste del Coeficiente de captura en función de la Temperatura absoluta con los modelos de Lax (· · ·), Abakumov (- - -) y Fonthal (—) para los datos experimentales B2 en Ge.

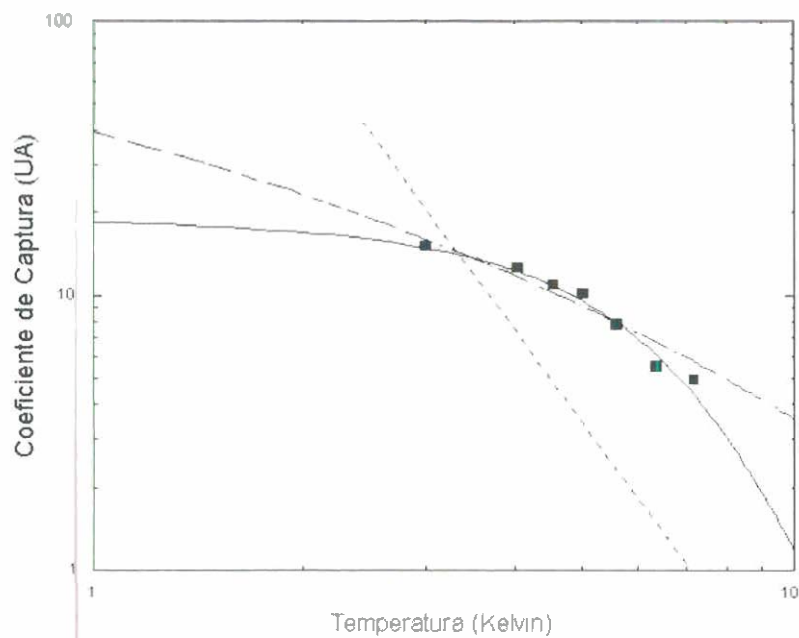


Figura 3. Ajuste del Coeficiente de captura en función de la Temperatura absoluta con los modelos de Lax (· · ·), Abakumov (- - -) y Fonthal (—) para los datos experimentales KBS1 en Ge.

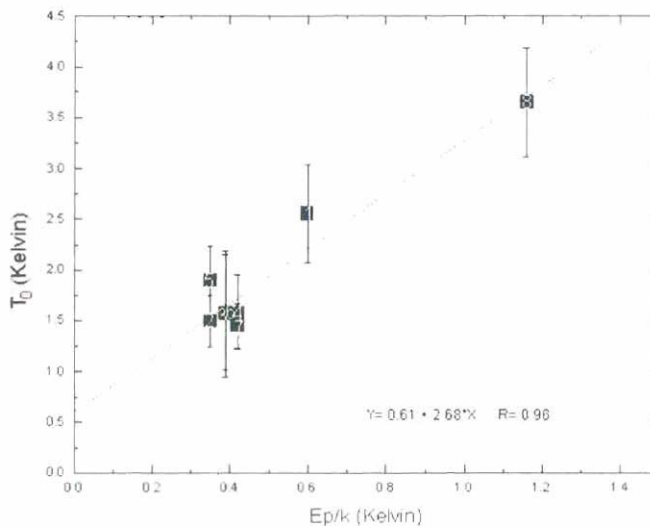


Figura 4. Ajuste del Coeficiente de captura en función de la Temperatura absoluta con los modelos de Lax ( . . . ), Abakumov ( - - - ) y Fonthal (—) para los datos experimentales A1 en Si.

Tabla 1  
Coeficientes de Correlación para los ajustes por los modelos [2],[4] y [6] para distintos datos experimentales

Dat.Ex.	B1	B2	B3	B4	KBS1	KBS2	KBS3	A1
[2]	0,991	0,989	0,983	0,998	0,988	0,987	0,997	0,973
[4]	0	0	0,806	0,442	0	0,788	0,737	0
[6]	0,905	0,896	0,949	0,983	0,935	0,971	0,978	0,730

Dat. Ex.	AB1	AB2	A2	K1	ESM1	ESM2	AR1	AR2
[2]	0,992	0,945	0,954	0,897	1	0,986	0,981	0,889
[4]	0	0	0	0	0,689	0,883	0	0
[6]	0,955	0,894	0,796	0,720	0,953	0,684	0,954	0,890

Tabla 2  
Valores del parámetro P<sub>2</sub>, las temperaturas características T<sub>0</sub> y T<sub>1/2</sub>, la concentración del donador N<sub>D</sub> y la compensación K para los distintos datos experimentales

datos exp.	B1	B2	B3	B4	KBS1	KBS2	KBS3	A1
P <sub>2</sub>	0,104	0,023	0,051	0,034	0,087	0,053	0,031	0,107
T <sub>0</sub> (K)	2,55	1,49	1,57	1,58	1,89	1,58	1,45	3,65
T <sub>1/2</sub> (K)	5,78	5,62	4,67	5,34	4,62	4,64	5,04	8,16
N <sub>d</sub> × 10 <sup>13</sup> (cm <sup>-3</sup> )	2,0	1,9	3,9	1,4	1,9	3,9	1,4	33,0
K	0,25	0,03	0,018	0,1	0,03	0,018	0,1	0,026

La Tabla 2 presenta los valores de  $P_2$  y  $P_3$  para el ajuste por [2]. De [1] se deduce que

$$P_3 = T_0 \text{ y } P_2 = \frac{B(1 + h(r_m))}{1 - h(r_m)B}. B \text{ es del orden de}$$

0,05 y  $h(r_m) \approx 1$  (21) entonces  $P_2 \approx B$ . Se define a  $T_{1/2} = -T_0 \ln B$ , ver ref. (21), como otra temperatura característica mayor que  $T_0$  y que tiene por significado la temperatura a la cual la intensidad de la fotoluminiscencia ha caído a la mitad.

La expresión [2] ha sido deducida partiendo de la intensidad de la fotoluminiscencia de los semiconductores amorfos dependiente de la temperatura. La correspondencia entre los amorfos y los cristalinos deviene del hecho de que para cristalinos compensados y con impurezas poco profundas se forman estados localizados (25), los cuales se deslocalizan por efecto de la temperatura, en forma similar a los amorfos. Como ese es el caso de los materiales que se están estudiando en este artículo se espera que se forme un potencial de fluctuación como consecuencia de la interacción entre impurezas ionizadas y con una profundidad de  $2\sqrt{2} E_p$  (26), donde

$E_p = 0.3 \frac{e^2 N_D^{1/3}}{\epsilon} K^{1/4}$  es la energía de percolación,  $K$  la compensación y  $N_D$  la concentración del donador. En las temperaturas correspondientes al régimen de conductividad por salto entre impurezas ( $\epsilon_3$ ) se espera que en una cierta temperatura los electrones tengan suficiente energía para sobrepasar la barrera del potencial de fluctuación. Se propone en este artículo que esa temperatura sea  $T_0$ , la cual por primera vez se presenta para semiconductores cristalinos. En semiconductores amorfos varios autores (27-30) han propuesto que el  $T_0$  es proporcional a la altura del pozo de potencial del estado localizado.

Los electrones que sobrepasan la barrera de potencial percolan hacia estados de donadores alejados de los aceptores. Estos electrones allí ubicados tienen menos probabilidad de recombinarse con los huecos en los aceptores ahora lejanos, por consiguiente se

van saturando los sitios de captura lejanos en la medida que se incrementa la temperatura. Esos donadores más alejados presentan el mayor coeficiente de captura como se desprende de [1] por consiguiente la captura se disminuye por la neutralización de los donadores. Habrá una temperatura para la cual el proceso de percolación se termina, esa  $T$  corresponde a lo que Shklovskii et al (SE) han denominado temperatura de saturación del "hopping" (31). Se propone en éste artículo que esa temperatura sea  $T_{1/2}$ .

La Figura 5 muestra la correlación existente entre  $T_0$  y la temperatura de percolación  $E_p/k$ . La pendiente obtenida fue de 2,68 muy cercana al  $2\sqrt{2}$  esperado y pasa aproximadamente por cero. Mientras que la Figura 6 presenta la correlación entre  $T_{1/2}$  y la temperatura de saturación de SE,

$$T_s = \frac{0.99e^2(N_D^{1/3})(1-0.3K^{1/4})}{k \ln K^{-1}}. \text{ El alejamiento}$$

de la pendiente 1 posiblemente se deba a la aproximación que SE hace al deducir  $T_s$ , ver referencia (32). Sobre el corte con el eje  $Y$  aún no se tiene idea definitiva, en especial cuando los márgenes de error, producto de la incertidumbre de los datos experimentales, es grande.

## Conclusiones

Se probó un nuevo modelo para analizar la sección eficaz de captura o el coeficiente de captura de electrones libres en niveles donadores poco profundos de semiconductores cristalinos compensados a bajas temperaturas y se encontró que ajustaba mejor que los modelos tradicionales de Lax o Abakumov en datos experimentales de Ge y Si. El modelo sacado de una expresión fenomenológica de los semiconductores amorfos tiene la ventaja adicional de que los parámetros de ajuste se pueden correlacionar bastante bien con términos definidos en el régimen de conducción por salto entre impurezas o "hopping" y por primera vez se aplica con éxito para semiconductores cristalinos.

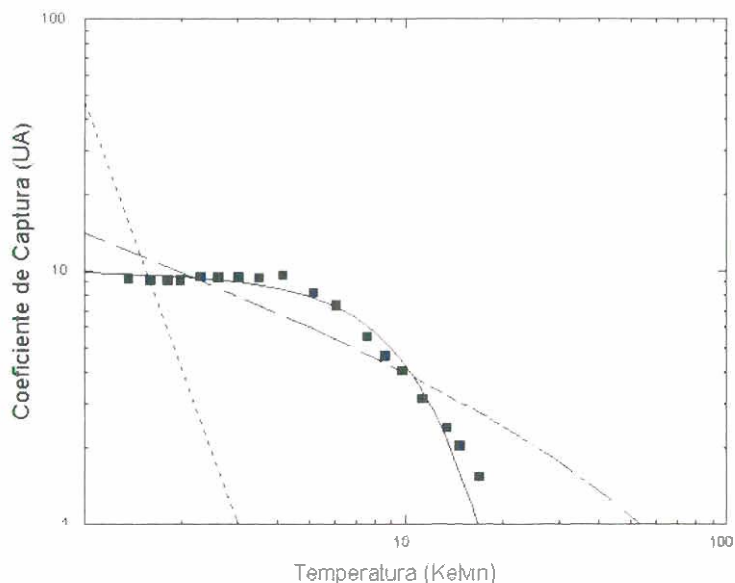


Figura 5. Temperatura característica  $T_0$  vs Temperatura de percolación  $E_p/k$ . La línea continua corresponde al ajuste lineal con parámetros y coeficiente de correlación señalados en el gráfico. La numeración representa los distintos datos experimentales, así : 1) B1, 2) B2, 3) B3, 4) B4, 5) KBS1, 6) KBS2, 7) KBS3, 8) A1.

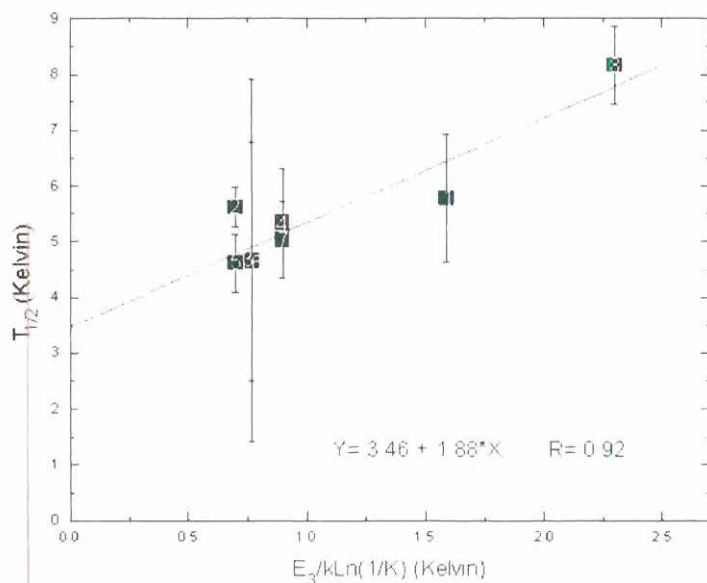


Figura 6. Temperatura característica  $T_{1/2}$  vs Temperatura de saturación  $T_s$ . La línea continua corresponde al ajuste lineal con parámetros y coeficiente de correlación señalados en el gráfico. La numeración **representa** los distintos datos experimentales, así : 1) B1, 2) B2, 3) B3, 4) B4, 5) KBS1, 6) KBS2, 7) KBS3, 8) A1.

## Agradecimientos

Los autores agradecen a la División de Investigación de la Facultad Experimental de Ciencias y al CONDES por el apoyo financiero a los proyectos DNC-00595 y 2416-95 respectivamente.

## Referencias Bibliográficas

1. ASCARELLI G., RODRIGUEZ S. *Phys Rev* 124(5): 1321-1328, 1961.
2. KOENING S.H., BROWN R.D., SCHILLINGER W. *Phys Rev* 128(4): 1668-1696, 1962.
3. HAMANN D.R., McWHORTER A.L. *Phys Rev* 134(1A): A250-A255, 1964.
4. BROWN R.A. *Phys Rev* 148(2): 974-981, 1966.
5. BROWN R.A., RODRIGUEZ S. *Phys Rev* 153(3): 890-900, 1967.
6. NORTON P., BRAGGINS T., LEVINSTEIN H. *Phys Rev Lett* 30(11): 488-489, 1973.
7. ABAKUMOV V.N., PEREL' V.I., YASSIEVICH I.N. *Sov Phys Semicond* 12(1): 1-18, 1978.
8. PICKIN W. *Solid-State Electronics* 21: 1299-1303, 1978.
9. WOERNER M., LOHNER A., ELSAESSER T., KAISER W. *Phys Rev B* 47(19): 12498-12509, 1993.
10. WILKE I., DUBOŃ O.D., BEEMAN J.W., HALLER E.E. *Solid Stat Comm* 93(5): 409-414, 1995.
11. LOEWENSTEIN M., HONIG A. *Phys Rev* 144(2): 781-788, 1966.
12. ABDUKADYROV A.G., BARANOVSKII S.D., IVCHENKO E.L. *Sov Phys Semicond* 24(1): 82-86, 1990.
13. BARANOVSKII S.D., FRITZSCHE H., LEVIN E.I., RUZIN I.M., SHKLOVSKII B. I. *Sov Phys JEPT* 69(4): 773-782, 1989.
14. HOWARD J.A., STREET R.A. *Phys Rev B* 44(15): 7935-7940, 1991.
15. LEVIN E. I., MARIANER S., SHKLOVSKII B. I. *Phys Rev B* 45(11): 5906-5918, 1992.
16. BARANOVSKII S.D., THOMAS P., ADRIAENSSENS G.J., OKTU O. *Solid Stat Comm* 86(9): 549-551, 1993.
17. SHKLOVSKII B.I., EFROS A.L. *Electronics properties of doped semiconductors*. Springer-Verlag, Berlin (Alemania), pp. 55-56, 1984.
18. ASCHE M., SARBEI O.G. *Phys Stat Sol (a)* 31(27): 27-30, 1975.
19. McMANUS J.B., PEOPLE R., AGGAERWAL R.L., WOLFF P. A. *J Appl Phys* 52(7): 4748-4752, 1981.
20. REGGIANI L., VARANI L. *Nuovo Cimento* 13(5): 647-662, 1991.
21. FONTHAL G. *Ciencia* 1(2): 83-92, 1993.
22. KOENING S.H. *Phys Rev Lett* 110: 986-988, 1958.
23. ELLIOTT K.E., SMITH D.L., MCGILL T.C. *Solid Stat Comm* 24(7): 461-463, 1977.
24. ASCARELLI G., BROWN S.C. *Phys Rev* 120(5): 1615-1626, 1960.
25. MALLORY K. *Phys Rev B* 47(13): 7819-7826, 1993.
26. EFROS A.L., SHKLOVSKII B.I., YANCHEV Y.Y. *Phys Stat Sol (b)* 50: 45-52, 1972.
27. STREET R.A. *Advances in Phys* 25(4): 397-453, 1976.
28. YAMAMOTO T., KASU M., NODA S., SASAKI A. *J Appl Phys* 68(10): 5318-5322, 1990.
29. MIEGHEM P.V. *Reviews of Modern Phys* 64(3): 755-793, 1992.
30. DRIESSEN F.A. J.M., BAUHUIS G.J., OLS-THOORN S.S., GILING L. *J. Phys Rev B* 48(11): 7889-7896, 1993.
31. SHKLOVSKII B.I., EFROS A.L. *Electronic properties of doped semiconductors*. Springer-Verlag, Berlin (Alemania), pp. 180-186, 1984.
32. BARANOVSKII S.D., THOMAS P., VAUPEL H. *J Appl Phys* 71(5): 2452-2454, 1992.