

## НЕСТАЦИОНАРНАЯ ЕМКОСТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ: МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Зубков В. И., Ким Ха Ен, Копылов А. А., Соломонов А. В.

Предлагается метод определения функции плотности состояний (ФПС) глубоких уровней на основе анализа уширенных спектров НСГУ, для которых некорректна традиционная обработка по методу Лэнга. Метод базируется на обращении свертки и не требует априорных предположений о характере ФПС. С помощью разработанного метода определялись ФПС  $Y$ -уровня в твердых растворах  $n$ -GaAs<sub>1-x</sub>P<sub>x</sub>. Результаты расчетов свидетельствуют о том, что ФПС глубоких уровней в твердых растворах близка по форме к распределению Гаусса.

В кристаллах полупроводниковых твердых растворов положение энергетических уровней дефектных и примесных центров флуктуирует из-за наличия химического и структурного беспорядков. Это приводит к уширению примесных полос, что экспериментально наблюдалось при примесном поглощении [1, 2], люминесценции [3] и нестационарной емкостной спектроскопии глубоких уровней (НСГУ) [4, 5]. При измерениях методом НСГУ сдвиг и расщепление ГУ в твердых растворах приводят к неэкспоненциальной релаксации барьерной емкости и, следовательно, делают некорректной обработку спектров НСГУ по традиционной методике Лэнга [6].

При анализе спектров НСГУ в твердых растворах должны учитываться статистические свойства распределения энергетических уровней, которые можно характеризовать функцией плотности состояний (ФПС). Из-за сложного характера связи наблюдаемых спектров и ФПС попытки такого анализа [4, 7] ограничивались использованием априорно выбранного закона распределения (Гауссова или биномиального), параметры которого определялись из условия достижения согласия с экспериментом.

В настоящей работе рассматривается метод, позволяющий определять ФПС глубоких уровней непосредственно по спектрам НСГУ без использования априорной информации о характере распределения.

### 1. Теория

Для моноэнергетического спектра ловушек (дискретного уровня с энергией ионизации  $E$  в запрещенной зоне) характерен экспоненциальный переходный процесс релаксации барьерной емкости. При стандартном методе измерения спектр НСГУ в этом случае описывается обычным выражением [6]

$$R_0(\vartheta) = \frac{\Delta C(t_1) - \Delta C(t_2)}{\Delta C(t_0)} = \exp(-et_1) - \exp(-et_2), \quad (1)$$

где  $t_1$  и  $t_2$  — моменты измерения переходного процесса емкости,  $e = \beta \exp(-E/\Theta)$  — скорость эмиссии носителей заряда,  $\Theta = kT$ . Параметр  $\beta$  связан с сечением захвата ловушки  $\sigma$ :

$$\beta = \sigma v_t N_c, \quad (2)$$

где  $v_i$  — средняя тепловая скорость носителей заряда,  $N_c$  — эффективное число состояний в зоне.

При наличии не взаимодействующих ловушек, плотность состояний которых  $D(E)$ , спектр НСГУ определяется их суммарным вкладом и может быть представлен в виде

$$R(\vartheta) = \int_{E_1}^{E_2} D(E) R_0(\vartheta, E) dE, \quad (3)$$

где  $E_1$  и  $E_2$  — границы распределения энергетической плотности глубоких уровней.

Таким образом, определение  $D(E)$  представляет собой обратную задачу для интегрального соотношения (3). Если принять  $\beta = \text{const}$ , то функция  $R_0$  будет зависеть только от отношения  $\Theta/E$ . В этом случае соотношение (3) с использованием преобразования Меллина<sup>1</sup> может быть приведено к виду

$$\mathcal{M}\{R(\vartheta), s\} = \mathcal{M}\{D(E), s+1\} \mathcal{M}\{R_0(\vartheta/E), s\}, \quad (4)$$

где правая часть факторизуется. Отсюда

$$\mathcal{M}\{ED(E), s\} = \frac{\mathcal{M}\{R(\vartheta), s\}}{\mathcal{M}\{R_0(\vartheta/E), s\}}. \quad (5)$$

Преобразование Меллина неудобно использовать при проведении численных расчетов. В то же время для преобразования Фурье существуют эффективные численные алгоритмы. Поэтому целесообразно выразить (5) через соответствующие фурье-трансформанты

$$\mathcal{F}\{e^x D(e^x), y\} = \frac{\mathcal{F}\{R(e^x), y\}}{\mathcal{F}^*\{R_0(e^{-x}), y\}}. \quad (6)$$

Удобно ввести следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \tilde{D}(u) &= e^u D(e^u), \\ \tilde{R}(v) &= R(e^v), \\ \tilde{R}_0(w) &= R_0(e^{-w}), \end{aligned} \quad (7)$$

где новые переменные имеют следующий смысл:

$$u = \ln E, \quad v = \ln \vartheta, \quad w = \ln \frac{\vartheta}{E}.$$

Тогда

$$\mathcal{F}\{\tilde{D}, y\} = \mathcal{F}\{\tilde{R}, y\} / \mathcal{F}^*\{\tilde{R}_0, y\}. \quad (8)$$

Очевидно, что  $R_0$  можно рассматривать как аппаратную функцию спектрометра НСГУ.

## 2. Численный расчет

Для программной реализации рассмотренного метода определения ФПС был использован алгоритм быстрого преобразования Фурье (БПФ). При этом выборка точек анализируемых спектров должна иметь постоянный шаг по переменной  $\ln \Theta$ . Это достигалось с помощью сплайн-интерполяции. Количество точек разложения БПФ обычно составляло 256. Поскольку при дискретном преобразовании Фурье рассматриваются ограниченные интервалы для переменных, удобно было в (7) использовать нормированные величины

$$u = \ln \frac{E}{E_0}, \quad v = \ln \frac{\vartheta}{E_0}.$$

<sup>1</sup> Преобразование Меллина  $\mathcal{M}$  выражается через комплексное преобразование Фурье:  $\mathcal{F}$  и имеет вид [8]  $\mathcal{M}\{f(x), s\} = \mathcal{F}\{f(e^x), is\} = \int_0^{\infty} f(x) x^{s-1} dx$ ,

Задача может быть решена корректно, если входящие в (6) функции с достаточной степенью точности спадают до нуля внутри интервала интегрирования. В тех случаях, когда в конечных точках доступного температурного диапазона сигнал НСГУ не обращался в нуль, функция  $R(\theta)$  экстраполировалась аналитически к нулю.

Важной проблемой является влияние шумов, которые содержит экспериментально измеряемый спектр  $R(\theta)$ . Шумы фурье-трансформанты  $\mathcal{F}\{\tilde{R}, y\}$  практически однородно распределены во всем частотном диапазоне. Деление

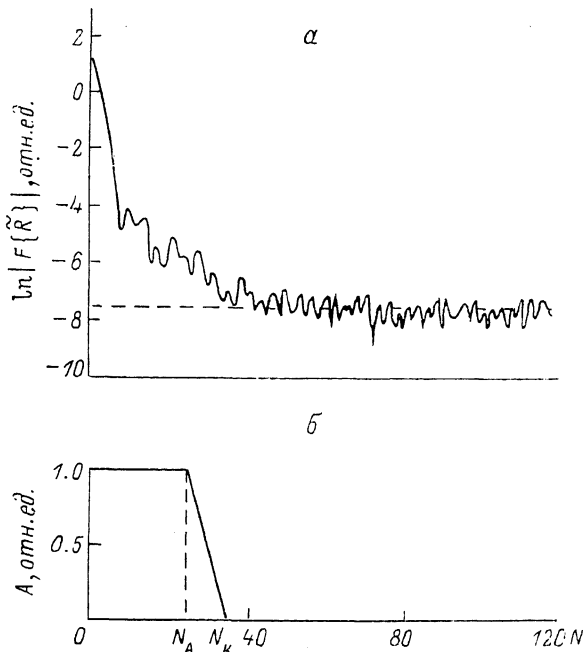


Рис. 1. Выбор параметров функции аподизации.

а — модуль трансформанты Фурье (штриховая линия — среднеквадратичный уровень шумов); б — функции аподизации.

на  $\mathcal{F}\{\tilde{R}_0, y\}$  для получения ФПС в соответствии с формулой (6) приводит к тому, что амплитуда шумов возрастает с частотой. Поэтому возникает необходимость фильтрации шума, что можно сделать с использованием так называемой аподизации. Выбор функции аподизации  $A(y)$  при решении некорректных задач типа (3), где  $R(\theta)$  имеет значительную шумовую составляющую, является в определенной степени субъективным [9]. Мы использовали в качестве функции аподизации трапецию (рис. 1). Параметры  $N_A$  и  $N_K$  определялись исходя из фактического вида фурье-трансформанты и характера шумов. Верхний предел  $N_K$  обычно выбирался из условия равенства единице соотношения сигнал/шум. Варьирование нижнего предела  $N_A$  позволяло минимизировать осцилляции, обусловленные аподизацией. Обычно значение  $N_A$  составляло  $\sim 30$  точек.

### 3. Сравнение с экспериментом

Анализировались исследованные ранее спектры НСГУ твердых растворов  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$   $n$ -типа проводимости [5]. Материал был получен методом газовой эпитаксии на подложках  $n$ -GaP. Таким образом, оказалось возможным сравнить результаты настоящего определения ФПС с результатами, полученными путем моделирования спектров НСГУ в предположении Гауссова уширения. Экспериментальные спектры НСГУ  $Y$ -уровня в  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$  ( $x > 0.5$ ) приведены на рис. 2. Параметр  $\beta$  и средняя энергия ионизации ГУ определялись из графика Аррениуса. Величина средней энергии ионизации использовалась в качестве значения параметра  $E_0$ .

На рис. 2 штриховой линией показан «модельный спектр»  $R_0(\Theta/E_0)$ . Видно, что наблюдаемый спектр  $R(\Theta)$  в твердом растворе  $\text{GaAs}_{0.38}\text{P}_{0.62}$  почти в 2 раза шире, чем тот, который предполагается для моноэнергетического ГУ.

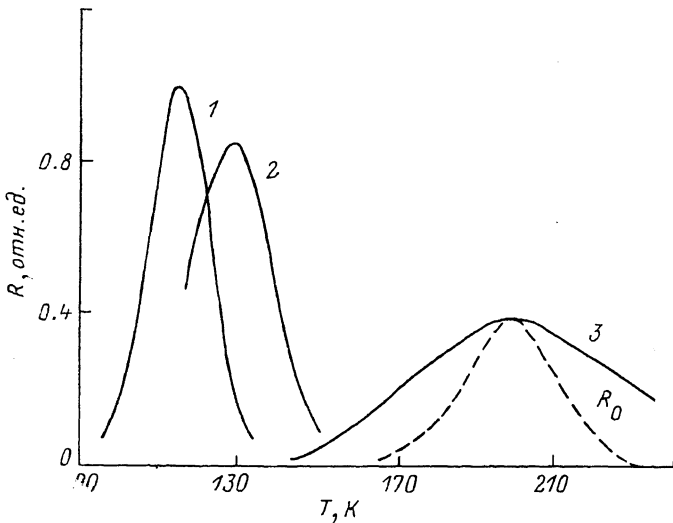


Рис. 2. Спектры НСГУ  $\Upsilon$ -уровня в твердом растворе  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ .

Состав  $x$ : 1 — 1.0; 2 — 0.9; 3 — 0.62 ( $\tau=51$  нс).  $R_0$  — расчетный спектр для моноэнергетического уровня.

Результаты расчета ФПС  $\Upsilon$ -уровня в твердых растворах  $\text{GaAs}-\text{GaP}$  приведены на рис. 3. Как и следовало ожидать, для бинарного состава ( $x=1$ ) ФПС имеет вид узкого пика, соответствующего энергии ионизации 210 мэВ, шириной  $\sim 0.5$  мэВ. С увеличением доли As из-за статистического разупорядочения кри-

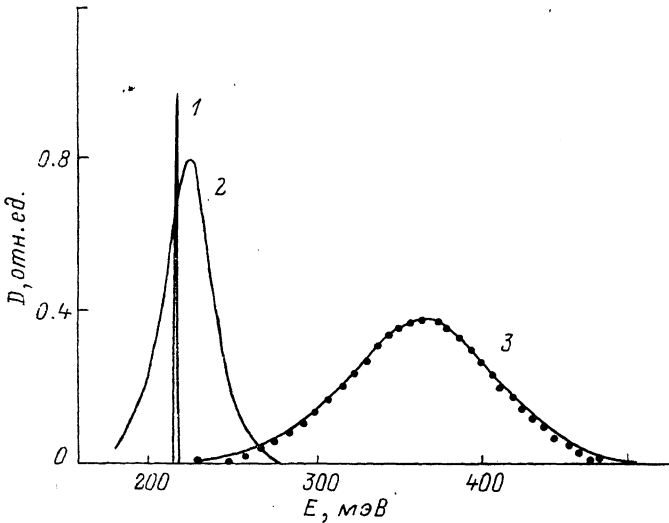


Рис. 3. Функция плотности состояний  $\Upsilon$ -уровня в  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ .

Состав  $x$ : 1 — 1.0; 2 — 0.9; 3 — 0.62. Точками показана аппроксимация с помощью функции Гаусса.

сталлической структуры ФПС сдвигается в сторону больших энергий и уширяется. Полученные результаты (рис. 3) сравнивались с данными работы [5], в которой в предположении Гауссовой формы ФПС осуществлялась подгонка расчетного спектра к экспериментальному с помощью вариационного параметра  $\epsilon$ , являющегося дисперсией распределения Гаусса. Сравнение позволяет сделать вывод о том, что ФПС  $\Upsilon$ -уровня в твердых растворах хорошо описывается функцией Гаусса (показана точками на рис. 3). Дисперсия оказалась

равной 17 мэВ для  $x=0.9$  и 53 мэВ для  $x=0.62$ , для метода подгонки [5] — соответственно 11 и 49 мэВ. Некоторое расхождение в дисперсии можно объяснить неучетом температурной зависимости параметра  $\beta$ . Величины, определяющие его, могут зависеть как от температуры, так и от энергии ионизации. Обычно при анализе спектров НСГУ принимают  $\nu_i N_c \sim T^2$ . Расчеты показывают, что полуширины спектров НСГУ с учетом множителя  $T^2$  и без него различаются на 10—15 %. Соответствующую неопределенность следует ожидать тогда и для ФПС.

Таким образом, предлагаемый метод, основанный на фурье-анализе, позволяет реализовать определение функции плотности состояний локальных уровней в твердых растворах непосредственно по спектрам НСГУ и не требует предварительных предположений о характере ФПС. Метод может быть также использован при анализе глубоких уровней со «сплошным энергетическим спектром» [10], например радиационных дефектов и дефектов термообработки в Si, явлений отклонений от стехиометрии в бинарных полупроводниках, эффектов поля и т. д. Результаты анализа уширенных спектров НСГУ свидетельствуют о том, что ФПС глубоких уровней в твердых растворах близка по форме к распределению Гаусса.

#### Список литературы

- [1] Бердт В., Копылов А. А., Пихтин А. Н. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 11. С. 2206—2209.
- [2] Копылов А. А., Пихтин А. Н. // ФТП. 1981. Т. 15. В. 11. С. 2164—2170.
- [3] Samuelson L., Nilsson S., Wang Z. G., Grimmeiss H. G. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. N 15. P. 1501—1503.
- [4] Omling P., Samuelson L., Grimmeiss H. G. // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. N 9. P. 5117—5122.
- [5] Зубков В. И., Пихтин А. Н., Соломонов А. В. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 1. С. 64—67.
- [6] Lang D. V. // J. Appl. Phys. 1974. V. 45. N 7. P. 3023—3032.
- [7] Yoshino J., Tachikawa M., Matsuda N., Mizuta M., Kukimoto H. // Japan. J. Appl. Phys. 1984. V. 23. N 1. P. L29—L31.
- [8] Бейтмен Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. Преобразования Фурье, Лапласа, Меллина. М., 1969. 343 с.
- [9] Риад С. М. // ТИИЭР. 1986. Т. 74. № 1. С. 93—97.
- [10] Берман Л. С. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 3. С. 588.

Электротехнический  
институт им. В. И. Ульянова (Ленина)  
Санкт-Петербург

Получена 30.05.1991  
Принята к печати 15.07.1991