

Емкостная спектроскопия глубоких уровней при обмене носителями тока с обеими разрешенными зонами

© А.А. Лебедев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 28 июня 1996 г. Принята к печати 8 июля 1996 г.)

Рассмотрены некоторые особенности спектров DLTS глубоких уровней, которые эффективно обмениваются носителями тока с обеими разрешенными зонами. Показано, что максимумы пиков смещаются незначительно по шкале температур, но обработка спектров традиционными методами приводит к ошибкам в определении параметров глубоких уровней (энергии ионизации, сечения захвата). Предложено несколько способов более точного определения указанных параметров и приведен численный пример такой обработки спектров DLTS.

В последнее время для определения концентрации и параметров глубоких уровней (ГУ) в полупроводниках широкое распространение получили методы емкостной спектроскопии: изотермическая релаксация емкости (ИРЕ), термостимулированная емкость (ТСЕ), нестационарная емкостная спектроскопия ГУ (НЕСГУ или DLTS в зарубежной литературе) и другие методы [1–6]. Эти методы основаны на измерении кинетики перезарядки ГУ в слое объемного заряда (СОЗ) при обратном смещении на диоде. При рассмотрении релаксации заряда на ГУ обычно учитывается обмен носителями тока (НТ) только между ГУ и одной разрешенной зоной, так как предполагается, что взаимодействие с другой зоной мало из-за большой разницы в энергиях ионизации ГУ E_n и E_p или в сечениях захвата электронов σ_n или дырок σ_p [3]. В большинстве случаев такой подход оправдан, но для некоторых ГУ, расположенных вблизи середины запрещенной зоны, он не всегда корректен. В частности, в Si обнаружено много ГУ вблизи середины запрещенной зоны [7]. В данной работе рассмотрены особенности термической релаксации емкости при взаимодействии ГУ с обеими разрешенными зонами и приведены методы определения параметров ГУ в этом случае.

Кинетика перезарядки глубоких уровней

Для определенности рассмотрим диод с резким асимметричным $p^+ - n$ -переходом или барьером Шоттки (БШ) на материале n -типа проводимости. В дальнейших расчетах предполагается, что ГУ имеет фиксированную энергию ионизации и генерация НТ через возбужденные состояния не играет существенной роли [3,8]. Тогда кинетика перезарядки ГУ в темноте в той части СОЗ, где при обратном смещении концентрацией свободных НТ можно пренебречь ($n \approx p \approx 0$), описывается уравнением

$$\frac{dm}{dt} = e_p(M - m) - e_n m, \quad (1)$$

где

$$e_p = c_p N_v \exp\left(-\frac{E_p}{kT}\right) \equiv c_p p_1, \quad (2a)$$

$$e_n = c_n N_c \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) \equiv c_n n_1, \quad (2b)$$

— скорости термической генерации электронов из валентной зоны на ГУ и с ГУ в зону проводимости соответственно; N_v и N_c — эффективные плотности состояний в валентной зоне и зоне проводимости соответственно; $c_n = v_e \sigma_n$, $c_p = v_n \sigma_p$ — скорости захвата электронов и дырок на ГУ соответственно; v_e и v_n — тепловые скорости электронов и дырок, соответственно; M и m — полная концентрация ГУ и концентрация электронов на них соответственно.

Решение уравнения (1) при условии $m_0 = \delta M$ при $t = 0$ имеет вид

$$\frac{m(t)}{M} = \frac{e_p}{e_n + e_p} + \left(\delta - \frac{e_p}{e_n + e_p}\right) \exp\left(-\frac{t}{\theta_c}\right), \quad (3)$$

где $\theta_c^{-1} = e_c = e_n + e_p$. Из уравнения (3) следует, что при обмене НТ с обеими разрешенными зонами перезарядка происходит по экспоненциальному закону с постоянной времени θ_c , но e_c является суммой экспонент от обратной температуры с разными показателями и предэкспоненциальными множителями, и зависимость Аррениуса $\ln \theta = f(1/T)$ линейна только в частном случае, когда ГУ расположен точно в середине запрещенной зоны ($E_n = E_p$). Во всех остальных случаях указанная зависимость нелинейна. Однако, как показывают расчеты, при измерении θ_c в ограниченном интервале температур T эта зависимость легко аппроксимируется прямой линией с некоторой энергией активации E_a , промежуточной между E_n и E_p . На рис. 1 (кривая 1) приведен расчетный пример зависимости $\lg \theta_c = f(1/T)$ для уровня с параметрами $E_n = 0.5$ эВ, $E_p = 0.6$ эВ, $c_n N_c = 10^{12} \text{ c}^{-1}$, $c_p N_v = 10^{14} \text{ c}^{-1}$. Видно, что точки хорошо ложатся на прямую с энергией активации $E_a = 0.545$ эВ. Методы более точного определения E_n и E_p будут рассмотрены далее.

Предельная перезарядка ГУ ($t \gg \theta_c$), как следует из уравнений (2) и (3), равна

$$\frac{m_{st}}{M} = \frac{e_p}{e_n + e_p} = \frac{1}{1 + \frac{c_n N_c}{c_p N_v} \exp\left(\frac{E_g - 2E_n}{kT}\right)}. \quad (4)$$

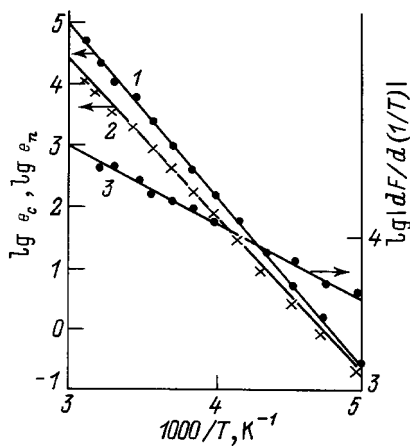


Рис. 1. Расчетные зависимости Аррениуса для e_c (1), e_n (2) и функции $dF/d(1/T)$ (3) для приведенного в тексте примера.

Здесь учтено, что ширина запрещенной зоны $E_g = E_n + E_p$. Из формулы (4) следует, что в СОЗ в стандартных условиях заполнение ГУ зависит от соотношения c_n/c_p , E_n и E_p . Если σ_n и σ_p одного порядка, то ГУ, расположенные выше середины запрещенной зоны ($E_n < E_g/2$), будут пустыми, а расположенные ниже середины зоны ($E_n > E_g/2$) будут полностью заполнены электронами независимо от стартового заполнения ГУ, типа проводимости базы и типа уровня — донор он или акцептор [3–9].

Стартовая перезарядка глубоких уровней

Существует несколько способов стартовой перезарядки ГУ: 1 — уменьшение обратного смещения V_1 до нуля (сброс напряжения); 2 — частичный сброс напряжения от V_1 до $V_2 < V_1$; 3 — инжекция из того же $p-n$ -перехода; 4 — освещение диода поглощающимся светом ($h\nu > E_g$) со стороны базы; 5 — инжекция из эмиттера в триодной структуре и другие методы. При перезарядке с помощью 4 и 5 методов при включенном обратном смещении возможно полное опустошение ГУ от электронов. Без обратного смещения оба эти метода аналогичны инжекции из $p-n$ -перехода и в данной работе не рассматриваются.

При сбросе напряжения в квазинейтральной области диода устанавливается равновесное заполнение ГУ $m_0/M = n_0/(n_0 + n_1)$, где n_0 — равновесная концентрация электронов в зоне проводимости. Если ГУ расположен вблизи уровня Ферми и в некоторой области температур $e_p > e_n$, то в СОЗ возможно не опустошение ГУ от электронов, а заполнение его из валентной зоны, т.е. $m_0 < m_{st}$. Это приведет к смене знака релаксации емкости. Такая ситуация в данной статье не рассматривается и в дальнейшем предполагается, что $n_0 \gg n_1$. Если $n_0 \gg M$, то заполнение ГУ электронами происходит по экспоненциальному закону с постоянной времени $\theta_p = (c_n n_0)^{-1}$ везде, кроме переходного слоя

вблизи границы $p-n$ -перехода с квазинейтральной областью [1–4,10]. В большинстве случаев этот слой мал и в дальнейших расчетах будем считать, что область неполного заполнения ГУ учтена и длительность импульса заполнения $t_f \gg \theta_p$. Тогда $\delta = 1$. Кинетика заполнения ГУ при сбросе напряжения является дополнительным методом измерения σ при отсутствии электрического поля.

При инжекции из $p-n$ -перехода распределение инжектированных НТ $\Delta p = \Delta n \sim \exp(-X/L_D)$, где L_D — диффузионная длина. В дальнейших расчетах будем предполагать, что уровень инжекции высокий ($\Delta n \gg n_0$) и ширина СОЗ при используемом обратном смещении $W \ll L_D$. Тогда стартовое заполнение ГУ будет

$$\delta = \frac{c_n}{c_n + c_p} \equiv \frac{1}{1 + \lambda},$$

где $\lambda = c_p/c_n$. Это заполнение может изменяться при переключении прямого смещения на обратное. Во-первых, при переключении напряжения на границе СОЗ, которая перемещается в глубь базы, $\Delta p \approx 0$ и происходит захват электронов. Если перемещение границы СОЗ происходит относительно медленно (по сравнению с θ_p), то возможно заметное изменение степени заполнения ГУ. Во-вторых, через СОЗ проходят накопленные в базе при прямом смещении дырки и возможен их захват на ГУ [11]. Такая перезарядка ГУ существенна при больших плотностях прямого тока и большом времени жизни неравновесных НТ в базе диода. Все эти причины создают некоторую неопределенность стартового заполнения ГУ при инжекции из $p-n$ -перехода.

Определение параметров глубоких уровней

Перезарядка ГУ приводит к релаксации емкости структуры. В дальнейших расчетах будем предполагать, что мелкие и глубокие примеси распределены в кристалле равномерно, сопротивление базы R мало ($\omega^2 R^2 C^2 \ll 1$, где ω — круговая частота измерительного сигнала) и структуру можно считать одномерной.

Рассмотрим спектры НЕСГУ в случае малой концентрации ГУ ($M \ll N$, где N — концентрация мелких доноров) или при измерении в режиме постоянной емкости. Тогда $\Delta C(t)$ или $\Delta V(t) \sim m(t)$. При обмене НТ с обеими разрешенными зонами в спектрах НЕСГУ появится зависящий от T амплитудный множитель A_1 . Если стартовая перезарядка производится путем сброса напряжения, то $\delta = 1$ и

$$A_1 = \frac{e_n}{e_n + e_p} = \frac{1}{1 + \frac{c_p N_v}{c_n N_c} \exp\left(-\frac{E_p - E_n}{kT}\right)} \equiv \frac{1}{1 + \lambda b \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)}, \quad (5)$$

где $\Delta E = E_p - E_n$ и $b = N_v/N_c$.

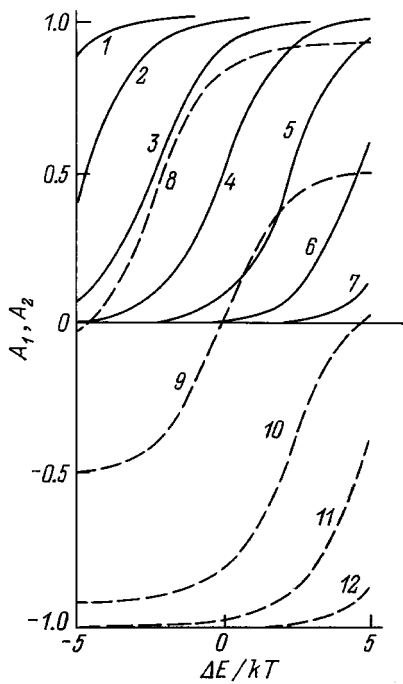


Рис. 2. Зависимости амплитудных множителей A_1 (1–7) и A_2 (8–12) от $\Delta E/kT$.

Температурная зависимость A_1 в безразмерных координатах для нескольких λb показана на рис. 2 (кривые 1–7). Из характера зависимости $A_1(T)$ можно сделать заключение об энергетическом положении ГУ: A_1 растет с ростом T , если ГУ расположен ниже середины запрещенной зоны ($E_n > E_p$), и падает при обратном соотношении $E_n < E_p$, так как с ростом T величина $|\Delta E/kT| \rightarrow 0$. Значения A_1 для рассмотренного выше примера совпадают с кривой 6 на рис. 2. Из рисунка также видно, что заметная релаксация емкости происходит только при определенном соотношении ΔE и λ . Оценки показывают, что даже при небольшом смещении ГУ от середины запрещенной зоны сечения захвата НТ на него должны отличаться на несколько порядков, чтобы был заметный обмен НТ с обеими разрешенными зонами.

Как показали численные расчеты, амплитудный множитель слабо влияет на форму пика НЕСГУ и положение его максимума. Типичные смещения максимума составляют 1–5 К. Это позволяет определять θ_c обычным способом [3–6]. Более точно можно определить по пересечению кривых НЕСГУ [12].

Для разделенного определения E_n и E_p воспользуемся тем обстоятельством, что $A_1\theta_c = e_n$. Тогда из зависимости Аррениуса для e_n вычисляется E_n , а $E_p = E_g - E_n$. На рис. 1 (кривая 2) показана зависимость Аррениуса для полученных таким образом значений $e_n(T)$. Из нее следует, что энергия активации в данном случае равна 0.505 эВ и с хорошей точностью соответствует значению E_n , заложенному в расчет. Вычисления сечений захвата НТ возможны, если известны N и M . Как

было сказано выше, оценка M возможна при некоторых способах стартового заполнения ГУ.

Теперь мы знаем $\theta_c(T)$, E_n и E_p , но не знаем предэкспоненциальные множители $c_n N_c$ и $c_p N_v$. Их можно вычислить, если в $e_c(T)$ подставить известные $\exp(E_n/kT)$ и $\exp(E_p/kT)$ при какой-либо температуре. Если при другой температуре повторить операцию, то получаем систему уравнений, где $c_n N_c$ и $c_p N_v$ являются неизвестными и их легко вычислить.

Можно также воспользоваться известной величиной $\exp(E_n/kT)$. Тогда

$$F = \frac{\exp\left(\frac{E_n}{kT}\right)}{\theta_c} = c_n N_c + c_p N_v \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right).$$

Производная этой функции

$$\frac{dF}{d(1/T)} = -\frac{c_p N_v \Delta E}{k} \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right),$$

и из нее можно вычислить ΔE и $c_p N_v$, а затем $c_n N_c$. На рис. 1 (кривая 3) показана зависимость Аррениуса для значений $-dF/d(1/T)$, полученных при обработке приведенного выше численного примера. Энергия активации в данном случае равна 0.105 эВ вместо 0.1 эВ, заложенного в расчет. Расчеты на других численных моделях показали, что точность определения указанных величин не хуже 10%.

Некоторые оценки можно сделать также и в том случае, если амплитуда пиков НЕСГУ при изменении T быстро растет или падает. Такая резкая температурная зависимость означает, что в этом случае $\lambda \exp|\Delta E/kT| \gg 1$. Тогда из зависимости Аррениуса можно оценить ΔE и λ .

Таким образом, из спектров НЕСГУ можно несколькими способами определить с хорошей точностью все основные параметры ГУ: его энергетическое положение в запрещенной зоне, сечения захвата электронов и дырок.

Стартовая перезарядка ГУ возможна также путем инжекции из того же $p^+ - n$ -перехода. В этом случае при высоком уровне инжекции $\delta = c_n/(c_n + c_p)$ и амплитудный множитель будет равен

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{c_n}{c_n + c_p} - \frac{e_p}{e_n + e_p} = \frac{1}{1 + \lambda} - \frac{\lambda b \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)}{1 + \lambda b \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)} \\ &= \frac{1 - \lambda^2 b \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)}{(1 + \lambda) [1 + \lambda b \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)]}. \end{aligned} \quad (6)$$

Следует отметить, что при перезарядке ГУ с помощью инжекции положение соответствующего пика НЕСГУ на шкале температур не изменится, так как θ_c не зависит от стартового заполнения ГУ.

Зависимость $A_2 = f(T)$ в безразмерных координатах показана на рис. 2 (кривые 8–12) для некоторых значений λ и $b = 1$. Из формулы (6) следует, что при $\lambda^2 b = \exp(\Delta E/kT)$ амплитудный множитель $A_2 = 0$ и происходит смена знака релаксации емкости (рис. 2, кривые 8–10). Равенство $A_2 = 0$ позволяет проверить правильность определения параметров ГУ.

Разность амплитудных множителей

$$\Delta A = A_1 - A_2 - \frac{\lambda}{1 + \lambda}$$

и при больших λ $\Delta A \approx 1$, т.е. ГУ практически полностью освобождается от электронов и отсюда оценить полную концентрацию ГУ M . При $\lambda \lesssim 0.1$ зависимости $A_1(T)$ и $A_2(T)$ практически сливаются.

При высоком уровне инжекции возможно также заполнение электронами тех ГУ, которые в квазинейтральной области диода находятся выше уровня Ферми. Это приводит к появлению дополнительных пиков НЕСГУ после инжекции. Амплитуда таких пиков растет с ростом уровня инжекции и быстро падает с ростом температуры. Подробно этот случай будет рассмотрен в отдельной публикации.

Приведенные выше формулы после очевидных преобразований справедливы и для резких n - p -переходов или барьеров Шоттки на полупроводниках p -типа проводимости.

Заключение

Характерным признаком достаточно эффективного взаимодействия ГУ с обеими разрешенными зонами является температурная зависимость высоты пиков НЕСГУ. Обработка таких спектров обычным способом может привести к ошибочным результатам. Предложены более достоверные методы определения параметров ГУ (E_n , E_p , σ_n , σ_p) для этого случая.

Рассмотренные выше методы обработки спектров НЕСГУ справедливы только для "простых" ГУ. Если же центр с ГУ имеет сложную структуру и в процессе его перезарядки происходит перестройка центра, то амплитуда сигнала НЕСГУ может зависеть совсем от других причин. Тогда необходима разработка иных методов обработки результатов измерений, основанных на других физических моделях.

Осложняет обработку спектров неэкспоненциальная релаксация емкости (или напряжения), связанная с зависимостью параметров ГУ от электрического поля в СОЗ или с перезарядкой нескольких ГУ с близкими θ . Осложнения могут возникнуть также в случае сильной температурной зависимости сечений захвата НТ и генерации НТ через возбужденные состояния центра с ГУ.

Список литературы

- [1] С.Т. Sah, V.G.K. Reddi, IEEE Trans. Electron. Dev. **ED-11**, 345 (1964).
- [2] С.Т. Sah, L. Forbes, L.L. Rosier, A.F. Tasch. Sol. St. Electron. **13**, 759 (1970).
- [3] Л.С. Берман, А.А. Лебедев. *Емкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках* (Л., Наука, 1981).
- [4] А.А. Лебедев. в сб.: *Методы диагностики точечных дефектов в полупроводниках и приборных структурах на их основе* (Наманган, 1990) с. 17.

- [5] D.V. Lang. J. Appl. Phys., **45**, 3023 (1974).
- [6] С.М. Зи. *Физика полупроводниковых приборов* (М., Энергия, 1973).
- [7] Е.В. Астрова, А.А. Лебедев. ФТП, **20**, 683 (1986).
- [8] Л.М. Капитонова, Л.С. Костина, А.А. Лебедев, А.Т. Мамадалимов, Ш. Махамов. ФТП, **8**, 694 (1974).
- [9] А.А. Лебедев, В. Экке. ФТП, **20**, 1806 (1986).
- [10] А.А. Лебедев. ФТП, **28**, 1980 (1994).
- [11] Е.В. Астрова, А.А. Лебедев. Препринт № 1333, ФТИ им. А.Ф. Иоффе (Л., 1989).
- [12] Е.В. Астрова, А.А. Лебедев. ФТП, **24**, 549 (1990).

Редактор В.В. Чалдышев

Deep level transient spectroscopy at charge carrier exchange between both allowed zones

A.A. Lebedev

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Some characteristic properties of DLTS spectra for deep levels, which exchange charge carriers efficiently with both allowed bands, have been considered. It is shown that shift of spectrum maxima is not pronounced, but traditional spectrum consideration leads to errors in determination of deep level parameters (the trap energy and the cross section for capture of free charge carries). Some methods of more precise determination of mentioned parameters are proposed and numerical example of such determination is presented.