

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА БИСТАБИЛЬНЫХ ДЕФЕКТОВ

Сирацкий В. М., Шаховцов В. И., Шиндич В. Л.,
Шпиар Л. И., Ясковец И. И.

Анализируется влияние бистабильных дефектов (БД) на статистические и рекомбинационные свойства носителей тока в полупроводниках.

Показана необходимость учета обеих конфигураций БД для корректного описания температурных зависимостей концентрации носителей тока и времени жизни неосновных носителей тока.

Введение. Точечные дефекты в полупроводниках обычно наблюдаются в одной пространственной конфигурации в различных зарядовых состояниях. При наличии сильного электрон-колебательного взаимодействия конфигурация дефектов может измениться при изменении их зарядового состояния. В последнее время в полупроводниках обнаружен ряд дефектов, которые могут иметь несколько пространственных конфигураций в одном и том же зарядовом состоя-

Дефекты	Параметры					
	ϵ_a	ϵ_b	E_{ab}	E_{ba}	E_{ab}^*	E_{ba}^*
Fe_iAl_s	0.2	0.13	0.71	0.64	0.64	0.65 [1]
Fe_iGa_s	0.23	0.14	0.64	0.6	0.63	0.5 [1]
Fe_iIn_s	0.27	0.15	0.5	0.5	0.6	0.72 [1]
C_iC_s (<i>n</i> -Si)	0.17	0.11	0.16	0.18	0.19	0.15 [2]
C_iC_s (<i>p</i> -Si)	0.09	0.05	0.16	0.18	0.23	0.21 [2]
C—Sb	?	0.13	?	?	0.27	0.25 [3]

нии. К такому классу бистабильных дефектов относятся, например, в Si дефекты как радиационного происхождения [C_iC_s — пара атомов углерода, один из которых находится в положении замещения (C_s), а другой — в межузельно м положении (C_i)], так и технологического [пары атомов железа в межузельно м положении (Fe_i) и акцепторной примеси в положении замещения (Al_s , V_s , Ga_s и In_s)]. Такие дефекты были обнаружены и исследовались с помощью нестационарной емкостной спектроскопии глубоких уровней. Однако особенности влияния мультистабильных дефектов на электрофизические свойства полупроводниковых материалов до сих пор практически не изучены. Поэтому цель настоящей работы — анализ влияния мультистабильных дефектов на статистические и рекомбинационные свойства носителей тока в полупроводниках.

Параметры некоторых бистабильных дефектов (рис. 1) приведены в таблице.

1. Статистические свойства носителей тока

Рассмотрим полупроводник *n*-типа, в котором дефект *F* акцепторного типа (например, C_iC_s в *n*-Si) может находиться в других конфигурациях *A* и *B* с соответствующими энергетическими уровнями в запрещенной зоне ϵ_a и ϵ_b . Согласно закону действующих масс, имеют место соотношения $nN_a^j = n_i^j (N_a -$

$-N_a^0$ и $nN_b^0 = n_1^b(N_b - N_b^0)$, где n — концентрация электронов в зоне проводимости, N_a^0 и N_b^0 — концентрации нейтральных дефектов F в конфигурации A (B), а N_a и N_b — полная концентрация дефектов в соответствующей конфигурации, $n_1^{(b)} = N_c \exp(-\varepsilon_{a(b)}/kT)$, N_c — плотность состояний в зоне проводимости. Полная концентрация дефектов F $N_f = N_a + N_b$. Кроме того, имеет место соотношение $x_{ab}N_a^0 = x_{ba}N_b^0$, $x_{ab(ba)}$ — вероятность перехода дефекта F из конфигурации A (B) в конфигурацию B (A), причем $x_{ab(ba)} = \nu \exp(-\varepsilon_{ab(ba)}/kT)$, где ν — частота тепловых колебаний (для простоты принимается одинаковой в обеих конфигурациях), а $\varepsilon_{ab(ba)}$ — энергия активации соответствующего перехода.

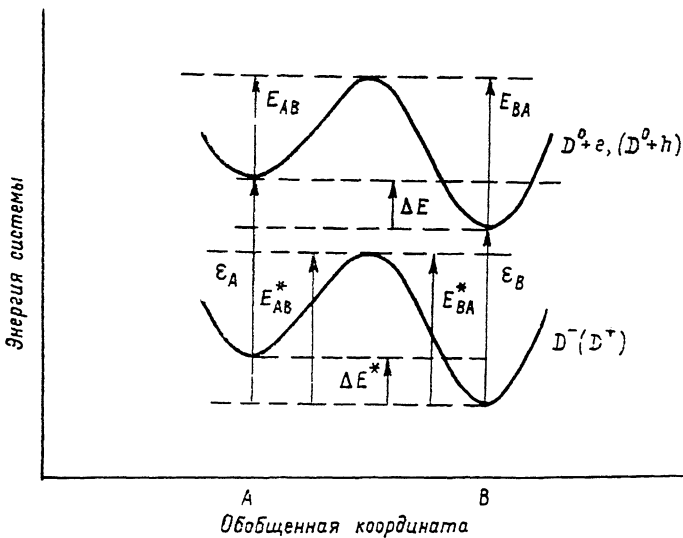


Рис. 1. Конфигурационно-координатная модель бистабильных дефектов.

Из приведенных соотношений следует, что концентрации N_a и N_b связаны соотношением

$$N_a = \frac{x_{ba}}{x_{ab}} \frac{n_1^b}{n_1^a} \frac{n + n_1^a}{n + n_1^b} N_b, \quad (1)$$

так что степень заселенности конфигураций дефектов F зависит от положения уровня Ферми: в частности, при $\mu > \varepsilon_a, \varepsilon_b$ $N_a \approx \frac{x_{ba}}{x_{ab}} N_b$, а при $\mu < \varepsilon_a, \varepsilon_b$ $N_a \approx \frac{x_{ba}}{x_{ab}} \frac{n_1^b}{n_1^a} N_b$. В последнем случае $N_a^0 \ll N_a$, $N_b^0 \ll N_b$. Из принципа детального равновесия следует также, что $x_{ab}^- N_a^- = x_{ba}^- N_b^-$, где x_{ab}^- (x_{ba}^-) — вероятности перехода между конфигурациями для заряженных дефектов F (соответствующие концентрации равны N_a^- и N_b^-). Поэтому

$$\frac{x_{ba}^-}{x_{ab}^-} \frac{x_{nb}}{x_{bn}} = \frac{n_1^b}{n_1^a}. \quad (2)$$

Из (2) следует очевидное (рис. 1) соотношение между энергетическими параметрами $\Delta E^* + (\varepsilon_a - \varepsilon_b) = \Delta E$, которое выполняется точно для всех известных бистабильных дефектов (БД).

Полагая легирующую примесь, концентрация которой равна N_d , полностью понижированной, из условия электронейтральности $n + (N_a - N_a^0) + (N_b - N_b^0) = N_d$ нетрудно получить выражение для концентрации свободных электронов

$$n = \frac{1}{2A} [\sqrt{B^2 + 4AC} - B], \quad (3)$$

где

$$A = 1 + \frac{x_{ab}^-}{x_{ba}^-}, \quad B = n_1^a \left(1 + \frac{x_{nb}}{x_{ba}^-} \right) + (N_f - N_d) \left(1 + \frac{x_{ab}^-}{x_{ba}^-} \right), \quad C = N_d n_1^a \left(1 + \frac{x_{ab}^-}{x_{ba}^-} \right).$$

В предельных случаях $x_{ab}^-/x_{ba}^- \rightarrow 0$ и $x_{ba}^-/x_{ab}^- \rightarrow 0$ получаются выражения для n , соответствующие одноконфигурационным дефектам (A и B).

Для всех дефектов, перечисленных в таблице, за исключением Fe, In_s , $\Delta E^* < 0$, поэтому $N_a^- > N_i^-$. Тем не менее дефекты, находящиеся в конфигурации B , в силу статистического распределения также дают существенный вклад в концентрацию свободных носителей тока n . Этому способствуют два обстоятельства — малость ΔE^* и $\varepsilon_b < \varepsilon_a$.

На рис. 2 приведены температурные зависимости концентрации свободных носителей тока для случая C_iC_s в $n\text{-Si}$, вычисленные с помощью (3). Там же приведена температурная зависимость свободных носителей тока при учете лишь

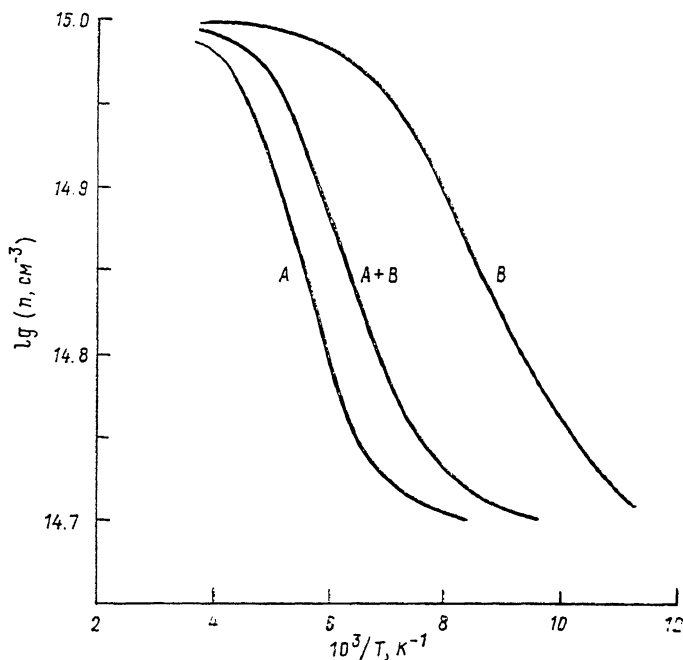


Рис. 2. Температурная зависимость $\ln n$ для БД C_iC_s в $n\text{-Si}$.

A (B) — учет только одной конфигурации; $A+B$ — учет обеих конфигураций.

одной конфигурации. Как видно, пренебрежение наличием второй конфигурации приводит к значительным погрешностям. Так, например, погрешность в определении глубины залегания уровня $\delta\varepsilon$ в $n\text{-Si}$ при неучете влияния второй конфигурации достигает ~ 0.03 эВ.

2. Время жизни неосновных носителей

При рассмотрении влияния БД на время жизни неосновных носителей тока будем следовать работе [4]. Выражения для суммарной скорости захвата электронов $u_e^{a(b)}$ и дырок $u_h^{a(b)}$ на дефект F , находящийся в конфигурации A (B), имеют вид

$$\begin{aligned} u_e^{a(b)} &= (f_{pt}^{a(b)} n - f_t^{a(b)} n_1^{a(b)}) N_{a(b)} \langle c_{na(b)} \rangle, \\ u_h^{a(b)} &= (f_t^{a(b)} p - f_{pt}^{a(b)} p_1^{a(b)}) N_{a(b)} \langle c_{pa(b)} \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь n и p — неравновесные концентрации электронов и дырок, $\langle c_{na(b)} \rangle$ и $\langle c_{pa(b)} \rangle$ — усредненные по состояниям в соответствующих зонах коэффициенты захвата электронов и дырок на дефект F в соответствующей конфигурации, а $f_t^{a(b)}$ — неравновесная функция распределения электронов по дефектам A и B ($f_{pt} = 1 - f_t$).

В стационарном состоянии имеем уравнения

$$\frac{dN_a^-}{dt} = u_e^{a(b)} - u_h^{a(b)} - \alpha_{ab} f_t^{a(b)} N_a + \alpha_{ba} f_t^{a(b)} N_b = 0, \quad (5)$$

$$\frac{dN_a^0}{dt} = -u_a^0 + u_a^0 - x_{ab}f_{p1}^0 N_a + x_{ba}f_{p2}^0 N_b = 0, \quad (6)$$

которые совместно с условием сохранения частиц $N_a + N_b = N_f$ и условия равенства суммарной скорости захвата электронов и дырок

$$u_a^0 + u_c^b = u_a^0 + u_b^b \quad (7)$$

служат для определения величин f_i^a , f_i^b , N_a и N_b . Время жизни τ определяется стандартным образом $u = \delta n / \tau$, где $\delta n = n - n_0 \ll n_0$ (n_0 — равновесное значение n).

Функции f_i^a и f_i^b связаны соотношением

$$f_i^b = \frac{x_{ba}x_{ba}f_i^a - x_{ba}\delta u_a^0}{x_{ab}x_{ba}f_i^a + x_{ba}x_{ab}(1 - f_i^a) + (x_{ba} - x_{ba})\delta u_a^0}. \quad (8)$$

Здесь

$$\delta u_a^0 = \langle c_{na} \rangle [n(1 - f_i^a) - n_i^a f_i^a] - \langle c_{pa} \rangle [p f_i^a - p_i^a (1 - f_i^a)],$$

а уравнение (1), справедливое в условиях равновесия, заменяется соотношением

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{x_{ba}x_{ba}}{x_{ab}x_{ba}f_i^a + x_{ba}x_{ab}(1 - f_i^a) + (x_{ba} - x_{ba})\delta u_a^0}, \quad (9)$$

причем

$$f_i^a = \frac{[x_{ba}C_{ab}^n + \langle c_{na} \rangle A] n + [x_{ba}C_{ab}^p + \langle c_{pa} \rangle A] p_i^a}{[x_{ba}C_{ab}^n + \langle c_{na} \rangle A] (n + n_i^a) + [x_{ba}C_{ab}^p + \langle c_{pa} \rangle A] (p + p_i^a)}. \quad (10)$$

Здесь введены обозначения

$$A = \langle c_{nb} \rangle [x_{ba}n + x_{ba}n_1^b] + \langle c_{pb} \rangle [x_{ba}p + x_{ba}p_1^b], \quad (11)$$

$$C_{ab}^n = \langle c_{na} \rangle x_{ba} + \langle c_{nb} \rangle x_{ab}, \quad C_{ab}^p = \langle c_{pa} \rangle x_{ba} + \langle c_{pb} \rangle x_{ab}.$$

Тогда, используя приведенное выше определение времени жизни, найдем, что в условиях низкого уровня инжекции

$$1/\tau = \alpha/\beta, \quad (12)$$

где

$$\alpha = \{x_{ba}x_{ba}C_{ab}^n C_{ab}^p + x_{ba} \langle c_{na} \rangle \langle c_{nb} \rangle C_{ab}^p [x_{ba}n + x_{ba}n_1^b] + x_{ba} \langle c_{pa} \rangle \langle c_{pb} \rangle C_{ab}^n [x_{ba}p + x_{ba}p_1^b]\} (n_0 + p_0), \quad (13)$$

$$\beta = x_{ba}x_{ba}C_{ab}^n [x_{ba}(n_0 + n_1^a) + x_{ab}(n + n_1^b)] + x_{ba}x_{ba}C_{ab}^p [x_{ba}(p + p_1^a) + x_{ab}(p + p_1^b)] + x_{ba}x_{ba}A [\langle c_{na} \rangle (n + n_1^a) + \langle c_{pa} \rangle (p + p_1^a)] + [x_{ba}x_{ab} \langle c_{na} \rangle (x_{ba}n + x_{ba}n_1^b) + x_{ba}x_{ab} \langle c_{pa} \rangle (x_{ba}p_0 + x_{ba}p_1^b)] [\langle c_{nb} \rangle (n + n_1^b) + \langle c_{pb} \rangle (p + p_1^b)]. \quad (14)$$

Получающееся громоздкое выражение для τ принимает простой вид в случае полупроводников с монополярной проводимостью. Так, в случае n -полупроводников с $n_0 \gg p_1^{(b)}$, учитывая, что

$$x_{ba}p_0 + x_{ba}p_1^b = \frac{p_1^b}{n_0} (x_{ba}n_0 + x_{ba}n_1^b),$$

находим

$$\frac{1}{\tau_e} \simeq \frac{1}{N} \frac{1}{C_{ab}^p} \left[x_{ba} \left(1 + \frac{n_1^a}{n_0} \right) + x_{ab} \left(1 + \frac{n_1^b}{n_0} \right) \right], \quad (15)$$

в случае p -типа проводимости

$$\frac{1}{\tau_p} \simeq \frac{1}{N} \frac{1}{C_{ab}^n} \left[x_{ba} \left(1 + \frac{p_1^a}{p_0} \right) + x_{ab} \left(1 + \frac{p_1^b}{p_0} \right) \right].$$

Аналогично можно рассмотреть рекомбинацию на донорно-акцепторных парах типа (Fe_i, Al_s) , в которых атомы железа могут находиться в двух зарядовых со-

стояниях Fe_i^+ и Fe_i^{2+} . В этом случае получаются выражения (15) и (3) с заменой $p \rightleftharpoons n$, причем вероятности κ_{ab}^- , κ_{ba}^- относятся к переходам Fe_i^{2+} между двумя конфигурациями A и B .

Из (5) и (6) видно, что динамика процесса рекомбинации на БД может носить усложненный характер по сравнению с тривиальной рекомбинацией носителей тока на дефекте в одной конфигурации, например захват электрона в положении A —переход в состояние B —захват дырки, и наоборот.

В случае дефекта C_2C_3 бистабильность обусловлена перестройкой ковалентных связей [2]. В такой ситуации возможно сильное электрон-колебательное взаимодействие, так что рекомбинация происходит путем многофононного захвата. Значит, $\langle c_{pa} \rangle$ и $\langle c_{pb} \rangle$ могут иметь температурную зависимость, опре-

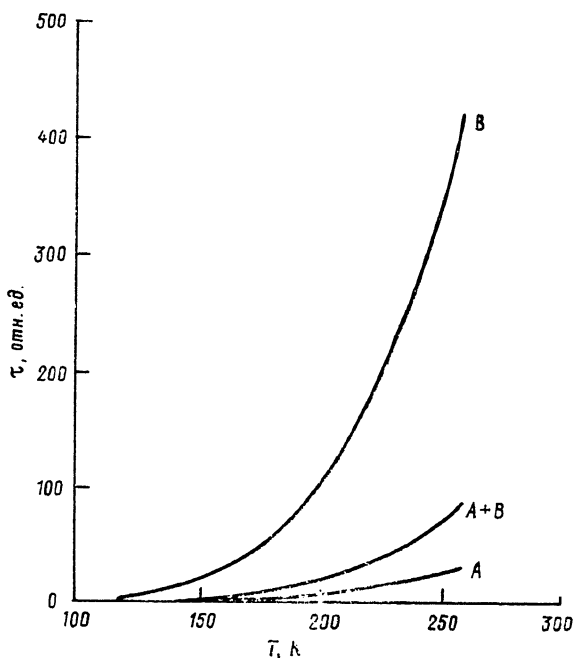


Рис. 3. Температурная зависимость времени жизни основных носителей.

A (B) — учет одной конфигурации; $A+B$ — учет обеих конфигураций.

деляемую некоторыми энергиями активации, и эти величины могут резко отличаться друг от друга. Однако, чтобы показать возможный вклад бистабильности в рекомбинацию, положим, что $\langle c_{pa} \rangle \simeq \langle c_{pb} \rangle$. Для этого случая приведена температурная зависимость τ/τ_0 на рис. 3. Там же для сравнения приведены температурные зависимости τ_a/τ_0 и τ_b/τ_0 , где $\tau_0 = 1/N \langle c_{pa} \rangle$. Видно, что температурная зависимость времени жизни для БД существенно отличается от аналогичной зависимости для моностабильных дефектов. Поэтому при определении параметров рекомбинационных центров по температурным зависимостям времени жизни необходимо учитывать бистабильные свойства дефектов.

Таким образом, показано, что бистабильность дефектов может существенно влиять на электрические и рекомбинационные свойства полупроводников, в связи с чем параметры известных бистабильных дефектов могут отличаться от ранее полученных.

Список литературы

- [1] Chantre A., Rimerlins L. C. // Def. Semicond. / Ed. by H. J. von Bardeleben. 1986. P. 387—398.
- [2] Watkins G. D. // Mater. Sci. Forum. 1989. V. 38-41. P. 9—14.
- [3] Benson B. W., Gurer E., Watkins G. D. // Mater. Sci. Forum. 1989. V. 38-41. P. 391—396.
- [4] Schockley W., Read W. T. // Полупроводниковые электронные приборы / Под ред. А. В. Ржанова. Новосибирск, 1953.