

06;12

Релаксационная спектроскопия глубоких уровней в полупроводниках методом LAPLACE-DLTS

© М.Н. Левин, А.Е. Бормонтов, А.Э. Ахкубеков, Е.А. Татохин

Воронежский государственный университет
Воронежская государственная технологическая академия
E-mail: bormontovae83@mail.ru

Поступило в Редакцию 20 мая 2010 г.

Метод DLTS является одним из основных при определении параметров электрически активных центров локализации заряда в полупроводниках. С целью повышения точности и адекватности получаемых результатов в работе предложен метод, основанный на применении обратного преобразования Лапласа. Показано, что использование этого метода позволяет определять параметры центров, имеющих близкие значения коэффициентов эмиссии, что невозможно при использовании традиционного метода DLTS.

Метод DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy) является одним из основных методов, широко используемых для определения параметров дефектов, приводящих к возникновению глубоких уровней (ГУ) в запрещенной зоне полупроводникового материала [1,2]. Достоинствами метода являются: высокая чувствительность к концентрации глубоких центров, возможность независимого определения энергий активации и сечений захвата для основных и неосновных носителей тока.

Основной проблемой метода DLTS является недостаточная разрешающая способность, делающая практически невозможным разделение сигналов от нескольких ГУ, имеющих близкие значения коэффициентов эмиссии. В литературе описаны различные подходы, применяемые с целью повышения разрешающей способности метода [3–5]. Наибольший интерес в этом направлении представляет метод Laplace-DLTS [4], основанный на применении обратного преобразования Лапласа. Разрешение метода Laplace-DLTS зависит от отношения сигнал/шум, а также процедуры расчета, используемой в процессе регуляризации решения при обращении преобразования Лапласа. Наиболее эффективной является процедура, использующая L -кривую [6,7].

В предыдущей нашей работе [8] на примере модельного релаксационного сигнала, содержащего три экспоненты с близкими значениями показателей и малой шумовой составляющей, наглядно показано, что метод Laplace-DLTS с использованием подхода L -кривой для выбора параметра регуляризации (LL-DLTS) обладает большей надежностью по сравнению с методом Laplace-DLTS с регуляризацией по невязке.

Данная работа демонстрирует возможности метода LL-DLTS для анализа реального релаксационного сигнала и определения основных параметров глубоких центров с близкими значениями коэффициентов эмиссии в монокристаллах GaAs.

Классический метод DLTS [1] состоит в следующем: исследуемая структура, предварительно охлажденная до температуры жидкого азота, плавно нагревается и в процессе нагрева периодически переводится в состояние с неравновесно заполненными ГУ. Релаксация неравновесного заряда ГУ контролируется обычно по изменению емкости барьера Шоттки и носит экспоненциальный во времени характер $C(t) = C_0 \exp(-e_n t)$, где e_n — коэффициент эмиссии электронов. Сигнал DLTS получается путем формирования разности нестационарного отклика, измеренного при двух временных задержках t_1 и $t_2 = t_1 + \Delta t$ после заряжающего импульса: $\Delta C_{21}(T) = C(t_2, T) - C(t_1, T)$. Цель обработки сигнала DLTS состоит в нахождении скоростей эмиссии для каждого ГУ и последующем расчете параметров глубоких центров (энергетического положения, сечений захвата, а также концентрации этих центров) [1].

Для определения скорости термической эмиссии $e_n(T)$ и оценки концентрации глубоких доноров $N(T)$ обычно используется уравнение [2]

$$\frac{\Delta C_{21}(T)}{C_s(T)} = \frac{N(T)}{2N_d} \left[e^{-e_n(T)t_1} - e^{-e_n(T)t_2} \right], \quad (1)$$

где $C_s(T)$ — стационарная емкость исследуемой структуры, N_d — концентрация мелких доноров.

Температурная зависимость коэффициента эмиссии $e_n(T)$ определяется соотношением

$$e_n = e_n^* \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad (2)$$

где E — энергия ионизации ГУ, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, $e_n^* = v_{th}\sigma_n N_c$ — частотный фактор (здесь

σ_n — сечение захвата электрона на ловушку, v_{th} — средняя тепловая скорость электронов, N_c — эффективная плотность состояний в зоне проводимости).

Величина сигнала DLTS (1) сильно зависит от температуры изотермической релаксации и имеет максимум при некоторой температуре T_{\max} . Дифференцируя (1) по e_n и приравнявая производную к нулю, получаем значение коэффициента эмиссии, соответствующее этой температуре:

$$e_{n \max} = \frac{\ln(t_2/t_1)}{t_2 - t_1}. \quad (3)$$

Записав серию кривых $\Delta C_{21}(T)/C_s(T)$ при разных значениях времен задержки t_1 и t_2 , мы получим семейство кривых, максимум на которых будет систематически сдвигаться. Обработка этих кривых позволяет по амплитуде пика сделать вывод о концентрации ГУ, а по смещению максимума с температурой — об энергетическом положении уровня и его сечении захвата. Спектроскопический характер метода заключается в том, что он позволяет выделить сигнал, обусловленный эмиссией с каждого уровня из спектра ГУ.

Несмотря на все свои преимущества, классический метод DLTS имеет существенный недостаток. На графике температурной зависимости сигнала DLTS, при наличии в полупроводнике нескольких глубоких центров с близкими скоростями эмиссии, пики сигналов, соответствующие разным центрам, сливаются. В результате получается широкий пик, из которого практически невозможно извлечь полезную информацию о параметрах таких центров. Процесс релаксации неравновесной емкости в этом случае представляет собой сумму нескольких экспоненциальных процессов, входящих с разными весами

$$C(t) = \sum_{i=1}^n C_{0i} \exp(-e_{ni}t), \quad (4)$$

где e_{ni} — скорость эмиссии с уровня E_i . Возникает проблема разделения нескольких близко расположенных убывающих экспоненциальных функций. Для решения этой проблемы в работе [3] предложено использовать обратное преобразование Лапласа сигнала (5), идея применения которого получила развитие в методе Laplace-DLTS [4].

В работах [4,9] показано, что в общем случае измеренное значение емкости представляет собой непрерывный спектр скоростей эмиссии:

$$f(t) = \int_0^{\infty} F(s) \exp(-st) ds, \quad (5)$$

где $f(t)$ — измеренное значение емкости, $F(s)$ — функция спектральной плотности.

Для получения значений $F(s)$ необходимо выполнить обратное преобразование Лапласа для функции $f(t)$. Результатом подобной процедуры является спектр четких, резко выраженных пиков, позволяющий получить информацию о количестве уровней и о значениях коэффициентов эмиссии для каждого из них. Основная трудность заключается в том, что для аналитической зависимости $f(t)$ имеется однозначное решение $F(s)$, но в случае экспериментально полученных данных наличие различного вида погрешностей (шумов) ведет к появлению множества решений, которые могут сильно отличаться друг от друга.

Задачу восстановления оригинала $F(s)$ по изображению $f(t)$ можно рассматривать как задачу о нахождении устойчивого решения интегрального уравнения Фредгольма первого рода, относящуюся к классу некорректных задач.

Для поиска устойчивых решений в методе Laplace-DLTS используются алгоритмы, основанные на изложенных в работе [10] способах решения некорректно поставленных задач методами регуляризации, в частности регуляризации Тихонова [11]. Для выбора оптимального (наиболее устойчивого и близкого к истинному) решения целесообразно использовать метод L -кривой [6–8], позволяющий автоматически и однозначно определить значение параметра регуляризации.

Суть метода L -кривой состоит в вычислении кривизны линии, построенной в координатах (норма решения, сглаженность) для набора значений параметра регуляризации λ , и поиске точки с максимальной кривизной. Построенный для случая дискретной некорректной задачи в логарифмических координатах график приобретает характерную L -образную форму с хорошо различимым углом, разделяющим вертикальную и горизонтальную части кривой. Вертикальная часть L -кривой соответствует решениям, в которых наиболее чувствительной к изменениям параметра регуляризации является норма решения. Горизонтальная часть соответствует решениям, в которых более чувствительна

к изменениям параметра регуляризации норма невязки и преобладает влияние погрешности регуляризации.

Таким образом, L -кривая четко показывает оптимум между нормой решения (т.е. его близостью к точному решению) и его стабилизацией (сглаженностью). Одним из важных свойств L -кривой является тот факт, что оптимальное значение параметра регуляризации всегда находится вблизи угла кривой [7], по положению которого можно найти решение с наилучшим балансом между нормой невязки и нормой решения.

Экспериментальные исследования выполнены на автоматизированной установке [12], позволяющей производить измерения зависимостей изотермической релаксации емкости (ИРЕ) в широком температурном диапазоне 17–363 К. Управление установкой осуществляется программно с использованием IBM совместимого компьютера. Программа организована таким образом, что за один цикл нагрева образца при каждой фиксированной температуре производится серия измерений в различных режимах, задаваемых перед началом работы. Анализ массива релаксационных зависимостей позволяет получить семейство зависимостей сигнала DLTS от температуры путем варьирования времен выборки с точностью 0.005 s в интервале времени 0–20 s, а также производить обратное преобразование Лапласа.

Исследовалась партия пластин арсенида галлия ориентации $\langle 100 \rangle$, выращенного по методу Чохральского, n -типа проводимости с концентрацией основных носителей $2.6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Образцы для измерения спектров DLTS представляли собой диоды Шоттки, выпрямляющие контакты которых формировались напылением алюминия.

На рис. 1 представлены исходные экспериментальные зависимости ИРЕ исследуемых кристаллов, измеренные при переключении диода Шоттки из режима прямого смещения в неравновесное обеднение, и полученный на их основе классический спектр DLTS. Методом LL-DLTS анализировался пик DLTS, проявляющийся в диапазоне температур 300–360 К (выделенная область на рис. 1, *b*).

Далее на рис. 2, *a* изображен график L -кривой в логарифмических координатах, полученных для набора значений λ в пределах $[10^{-10}, 1]$. Как упоминалось выше, оптимальное решение должно выбираться максимально близко к положению угла L -кривой (отмечено стрелкой). Это можно делать визуально, анализируя график в логарифмических координатах, или автоматически, вычисляя максимальную кривизну $2D$ -сплайна, аппроксимирующего дискретный набор значений.

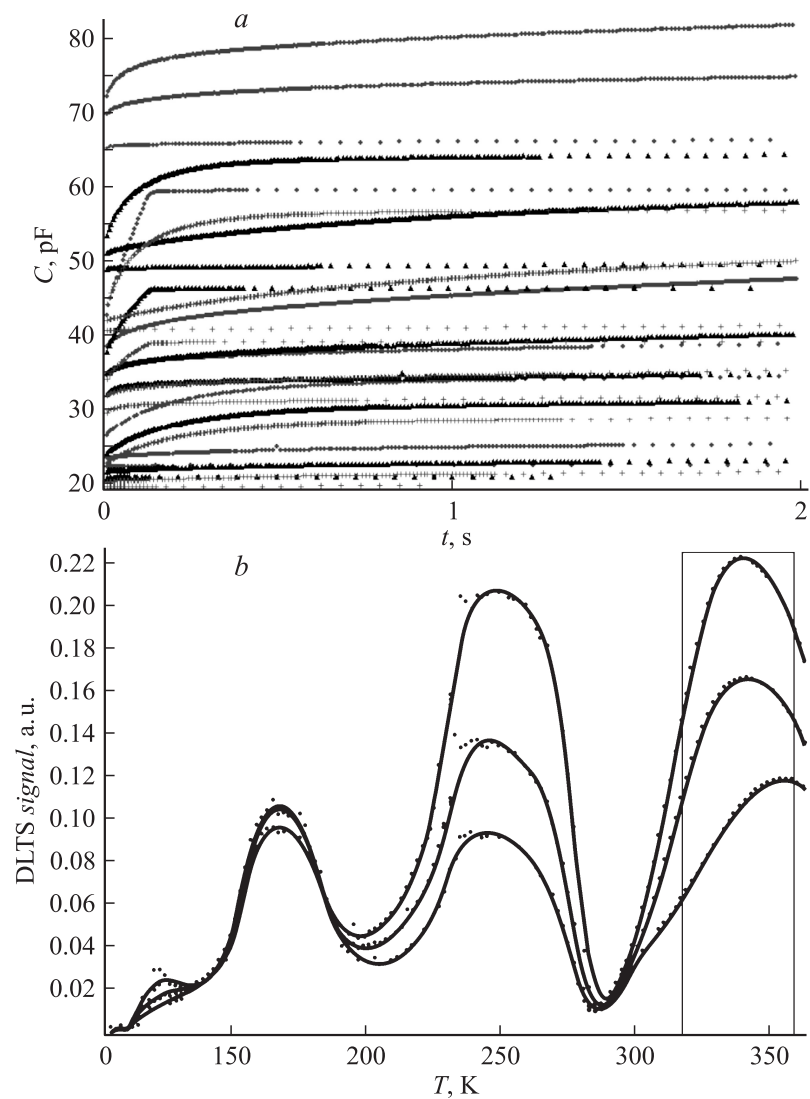


Рис. 1. Экспериментальные зависимости ИРЕ (*a*) и спектр DLTS для диода Шоттки Al/*n*-GaAs (*b*), полученные при $V_d = 2$ В, $V_r = -0.199$ В, $t_{imp} = 10$ мс (здесь V_d — напряжение прямого смещения, V_r — напряжение обратного смещения, t_{imp} — длительность импульса прямого смещения).

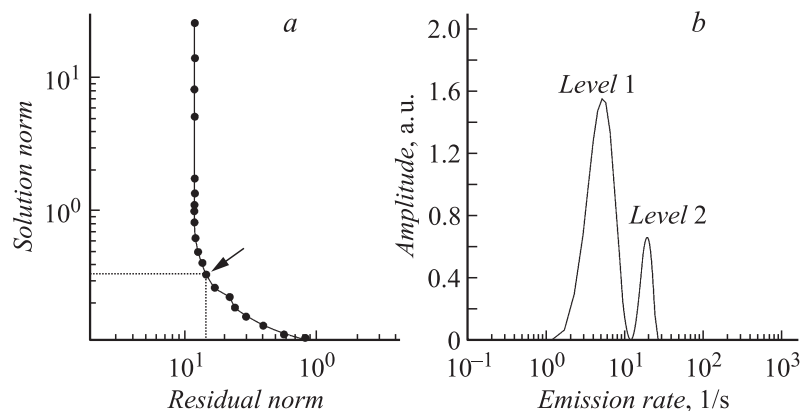


Рис. 2. График L -кривой (а) и спектр Laplace-DLTS при $T = 342$ К (b). Значение параметра регуляризации $\lambda = 0.0178$.

На рис. 2, b изображен спектр Laplace-DLTS, полученный при $T = 342$ К для значения λ , найденного с помощью L -кривой. Как видно, хорошо разрешаются два уровня, неразличимые в исходном (классическом) сигнале DLTS, что позволяет с высокой точностью определить значения коэффициентов эмиссии этих уровней.

Рассчитывая аналогичные спектры Laplace-DLTS при различных значениях температуры из рассматриваемого диапазона, были построены зависимости Аррениуса для двух выделенных уровней (рис. 3, зависимости 1 и 2). Очевидно, что эти зависимости имеют линейный характер. Поэтому, рассчитав коэффициенты уравнений линейной регрессии, мы определили значения энергий активации и сечений захвата для этих глубоких уровней: $E_1 = E_c - (0.7405 \pm 0.0687)$ eV, $E_2 = E_c - (0.6426 \pm 0.0509)$ eV, $\sigma_{n1} = 2.63 \cdot 10^{-10}$ cm², $\sigma_{n2} = 3.59 \cdot 10^{-11}$ cm².

Отметим, что в работе [5] исследуемый пик DLTS определяется как отклик сигнала DLTS на релаксацию одного ГУ с энергией активации $E = E_c - (0.855 \pm 0.0313)$ eV. Полученные методом Laplace-DLTS данные позволяют установить причину возникновения большого значения абсолютной погрешности при определении энергии активации в рамках традиционного метода DLTS. Она определяется тем обстоятельством, что анализируемый пик DLTS является суперпозицией сигналов от

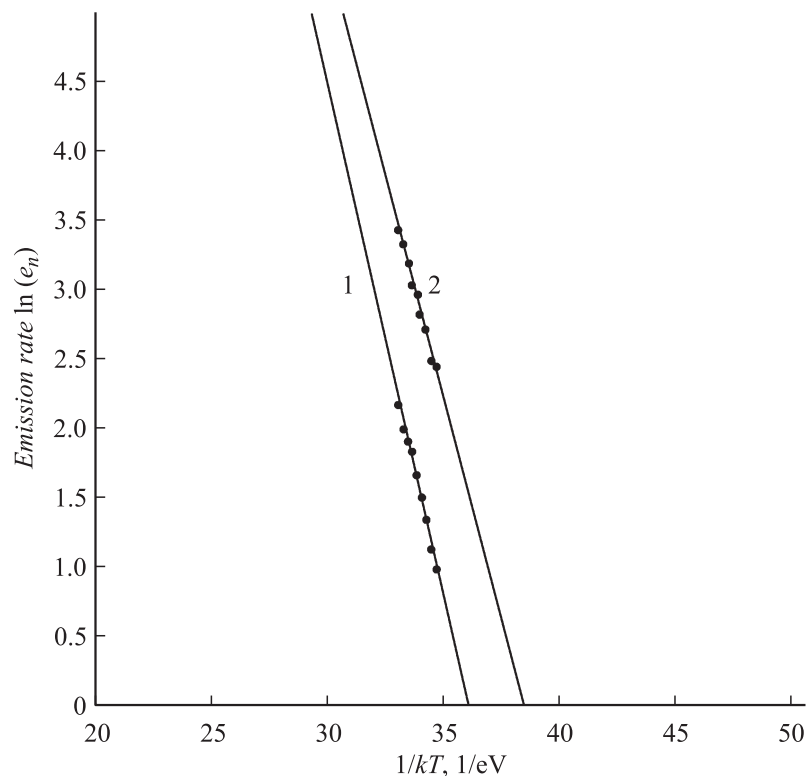


Рис. 3. Зависимости Аррениуса диода Шоттки Al/n-GaAs, рассчитанные для ГУ в диапазоне температур 300–360 К методом Laplace-DLTS.

двух ГУ, значения энергий активации которых (E_1 и E_2) лежат в границах доверительного интервала, определенного статистическим методом [5]

Таким образом, метод LL-DLTS обладает значительно большей разрешающей способностью, чем традиционный метод DLTS. Это обусловлено тем, что в основе модифицированного метода лежит задача восстановления функции спектральной плотности по экспериментальным зависимостям изотермической релаксации емкости, т.е. решение интегрального уравнения (5). При реализации метода LL-DLTS мы,

делая обратное преобразование Лапласа, выделяем экспоненциальные сигналы из более сложного интегрального сигнала. В то же время традиционный метод DLTS представляет собой задачу классификации ГУ в рамках упрощенной математической модели релаксации емкости и детально разработан только для случая строго экспоненциального процесса релаксации. Поскольку метод LL-DLTS лишен этого недостатка, он является не только более точным, но и более универсальным.

Список литературы

- [1] *Lang D.V.* // J. Appl. Phys. 1974. V. 45. N 7. P. 3023–3033.
- [2] *Берман Д.Л., Лебедев А.А.* Емкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. Л.: Наука, 1981. 176 с.
- [3] *Nolte D.D., Haller E.E.* // J. Appl. Phys. 1987. V. 62. N 3. P. 900–906.
- [4] *Dobaczewski L., Kaczor P., Hawkins I.D., Peaker A.R.* // J. Appl. Phys. 1994. V. 76. N 1. P. 194–198.
- [5] *Татухин Е.Е., Каданцев А.В., Бормонтов А.Е., Задорожний В.Г.* // ФТП. 2010. Т. 44. N 8. С. 1031–1037.
- [6] *Lawson C.L., Hanson R.J.* Solving least squares problems. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1974. 340 p.
- [7] *Hansen P.C.* // SIAM Review. 1992. V. 34. P. 561–580.
- [8] *Левин М.Н., Татаринцев А.В., Ахкубеков А.Э.* // ФТП. 2009. Т. 43. В. 5. С. 613–616.
- [9] *Dobaczewski L., Peaker A.R., Binde Nielsen K.* // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. N 9. P. 4689–4728.
- [10] *Provencher S.W.* // Computer Phys. Commun. 1982. V. 27. P. 213–227.
- [11] *Тихонов А.П., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.
- [12] *Каданцев А.В., Котов Г.И., Левин М.Н., Татаринцев А.В., Шлык Ю.К.* // ПТЭ. 2004. № 6. С. 138–139.