

Применимость упрощенной модели Шокли–Рида–Холла для полупроводников с различными типами дефектов

© А.Н. Яшин[¶]

Институт физики твердого тела и полупроводников Национальной академии наук Белоруссии, 220072 Минск, Белоруссия

(Получена 27 января 2005 г. Принята к печати 15 февраля 2005 г.)

Исследованы ограничения на максимальную концентрацию дефектов, при которой в теории рекомбинации Шокли–Рида–Холла все еще применимо часто используемое предположение о равенстве времен жизни электронов и дырок. На примере легированного кремния рассмотрена зависимость данной концентрации от уровня инжекции и различных параметров дефектов. Исследованы случаи, когда полупроводник содержит дефекты только одного типа, а также нескольких типов. Проведенный анализ позволяет определить параметры образца, при которых для расчета времен жизни носителей заряда может быть использована упрощенная модель рекомбинации.

1. Введение

Измерения времен жизни носителей заряда в полупроводниках используются для определения различных параметров дефектов, в частности их концентраций и положений энергетических уровней в запрещенной зоне. Обычно результаты такого рода измерений моделируются с помощью теории Шокли–Рида–Холла (ШРХ) (Shokley–Read–Hall) [1–3]. При этом для упрощения расчетов часто предполагают, что времена жизни электронов τ_n и дырок τ_p или, что эквивалентно, избыточные концентрации носителей заряда Δn и Δp примерно равны [2,4,5]. По терминологии Шокли и Рида [1,6], такое условие соответствует так называемой упрощенной модели ШРХ. Но проблема в том, что применение такого упрощенного подхода не всегда оправдано. Как показано в работе [1], концентрация дефектов N_t не должна превышать некоторую критическую величину N_{crit} , иначе данные измерений времен жизни не будут достоверными. Чем больше концентрация N_t , тем больше возможная ошибка. В то же время величина N_{crit} существенно зависит от многих параметров как самих дефектов, так и полупроводникового материала. В работе [1], в частности, исследована зависимость N_{crit} от положения уровня дефекта в запрещенной зоне E_t для различных значений отношения коэффициентов захвата носителей на уровень дефекта $\gamma = c_p/c_n$. Однако в общем случае приведенные в работе [1] графики позволяют лишь весьма грубо оценить величину N_{crit} , поскольку при расчетах использовалась формула самой же упрощенной теории ШРХ. По сути исследовался случай, когда $\tau_n/\tau_p = \Delta n/\Delta p \approx 1$. Однако интерес представляет как раз обратный случай, когда имеется существенное неравенство указанных величин. Подход, использованный в нашей работе, а именно применение неупрощенной теории, позволяет установить критическую концентрацию при произвольном отношении τ_n/τ_p .

Согласно статьям [7,8], в кремнии p -типа, содержащем ряд радиационных центров, в частности E -центры, вре-

мена жизни носителей существенно неравны. Поэтому для таких образцов следовало бы ожидать значительных ограничений на концентрацию дефектов в случае использования упрощенной модели рекомбинации. Этот вопрос рассмотрен в данной работе.

С увеличением уровня инжекции значения времен жизни носителей заряда выравниваются. Соответственно должны ослабляться ограничения на концентрацию дефектов. В настоящей работе рассмотрены условия, при которых данные ограничения сохраняются и при немалой инжекции.

В работах [1,7,8] расчеты выполнены для случая, когда времена жизни носителей определяются лишь одним типом дефектов. Нами исследуется применимость упрощенной модели ШРХ и для более реальной ситуации — когда рекомбинация идет одновременно через уровни различных центров.

2. Соотношения между параметрами полупроводника в модели ШРХ

Согласно теории рекомбинации ШРХ, в случае дефектов с одним уровнем в запрещенной зоне при заданном уровне инжекции Δp величина Δn определяется из решения квадратного уравнения. Зная эти величины, можно вычислить времена жизни носителей заряда [3,9]. Для электронов справедливо соотношение

$$\tau_n = N_t^{-1} \left(p_0 + \Delta p + n_0 \frac{\Delta p}{\Delta n} \right)^{-1} \times \left(\frac{n_0 + n_1 + \Delta n}{c_p} + \frac{p_0 + p_1 + \Delta p}{c_n} \right). \quad (1)$$

Здесь n_0 и p_0 — концентрации электронов и дырок в условиях термодинамического равновесия, $p_1 = n_i \times \exp(-\Delta e_t)$, $n_1 = n_i \exp(\Delta e_t)$, где

$$\Delta e_t = \frac{E_t - E_i}{k_B T},$$

n_i и E_i — концентрация носителей и уровень Ферми в собственном полупроводнике, k_B — постоянная

[¶] E-mail: yash@ifftp.bas-net.by

Больцмана, T — температура. Время жизни дырок можно найти из формулы (1) с помощью соотношения $\Delta n/\Delta p = \tau_n/\tau_p$.

Для полупроводника p -типа отклонение от условия равенства величин Δn и Δp будем характеризовать параметром $x = 1 - \Delta n/\Delta p$, для полупроводника n -типа — параметром $x = 1 - \Delta p/\Delta n$. Тогда вместо формулы (1) для легированного акцепторами полупроводника получим

$$\tau_n = (c_p N_t)^{-1} \left(p_0 + \Delta p + \frac{n_0}{1-x} \right)^{-1} \times \left[(p_0 + p_1) \left(\frac{n_1}{p_0} + \gamma \right) + \Delta p (\gamma + 1 - x) \right]. \quad (2)$$

Отсюда следует, что при малом уровне инжекции ($\Delta p \ll p_0$, где p_0 — равновесная концентрация) лишь существенное неравенство величин Δn и Δp (когда $|x| \approx 1$) изменяет время жизни неосновных носителей заряда, и то лишь при весьма низком уровне легирования. Однако время жизни основных носителей более чувствительно к величине x , поскольку

$$\tau_p = \frac{\tau_n}{1-x}.$$

Упрощенная модель ШРХ соответствует приближению $x \approx 0$. Ошибка от ее использования определяется сравнением значений времен жизни носителей при $x = 0$ и $x \neq 0$. Погрешность может быть существенной в тех случаях, когда релаксация измеряемого параметра определяется или основными носителями или носителями обоих типов. Примером может служить методика, использованная в работе [1], где измерялось обусловленное оптической инжекцией изменение фотопроводимости.

Задав x , т.е. приемлемое отношение времен жизни, можем найти концентрацию дефектов N_t , ему соответствующую. Так, для полупроводника p -типа соотношение, связывающее эти величины, имеет вид

$$x = \frac{N_t}{p_0 + p_1} \frac{(1-x)p_0 - \gamma p_1}{(p_0 + p_1)(\gamma + n_1/p_0) + \Delta p(\gamma + 1 - x)}. \quad (3)$$

При малом уровне инжекции, когда $\Delta p \ll p_0$, будем иметь

$$N_t = \frac{x(p_0 + p_1)^2(\gamma + n_1/p_0)}{(1-x)p_0 - \gamma p_1}.$$

В работе [1] анализировалась не эта величина, а

$$N_{\text{crit}} = \frac{(N_a + p_1)[\gamma(N_a + p_1) + n_1]}{|N_a - \gamma p_1|}.$$

Последнее выражение можно представить в виде $N_t/|x|$, если, как и в работе [1], сделать дополнительные предположения:

$$x \ll 1, \quad p_0 = N_a \gg p_1.$$

Мы эти условия отбросим, прямо воспользовавшись упрощенной формулой (3).

Положение уровня дефекта в запрещенной зоне ($E_t = E_i - 0.18$ эВ) и малость коэффициента $\gamma \approx 1.8 \cdot 10^{-3}$ обеспечивают значение x , близкое к 1, уже при небольших концентрациях дефекта Fe_i в p -Si [1]. При уровне легирования $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и уровне инжекции $\Delta p < 10^{13} \text{ см}^{-3}$ для концентрации дефектов $N_t = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ получим $x \approx 0.99$. Поэтому Fe_i -центры могут заметным образом повлиять на времена жизни носителей заряда в таком образце.

Согласно данным из теоретических работ [7,8], при тех же параметрах N_a , Δp и N_t , что указаны выше для Fe_i -центров, такое же большое значение $x \approx 0.99$ в кристаллическом p -Si должны обеспечивать радиационные E -центры (фосфор-вакансия). Заметим, однако, что при таких концентрациях, используя приведенные в [7,8] значения параметров центров ($E_t = E_i + 0.13$ эВ, $\gamma = 10$), не удастся удовлетворить условие электронейтральности. Расчет же по формуле (3) дает на 2 порядка меньшее значение $x \approx 0.01$. Действительно, x должно быть мало в данном случае, поскольку слишком мала вероятность заполнения E -центров электронами. Так, при $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $N_t = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $\Delta p = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ только $10^{-3} N_t$ нейтральных E -центров становятся отрицательно заряженными. Этого недостаточно, чтобы обеспечить заметное отличие неравновесных концентраций свободных носителей в зонах и соответственно существенное неравенство времен жизни носителей. Заметим также, что нам удалось воспроизвести результаты работы [1] для p -Si с центрами Fe_i и Fe_V , в частности данные по временам жизни носителей. Ввиду этого, нам представляются не обоснованными предложенные в [7] методики определения концентрации дефектов по зависимости времен жизни носителей от уровня инжекции.

3. Зависимость применимости модели ШРХ от положения уровня энергии дефектов

Рассмотрим зависимость концентрации дефектов от положения их уровня энергии $N_t(\Delta E_t)$ при конкретных значениях x , N_a и γ , используя упрощенную теорию ШРХ. Это нам позволит определить концентрацию дефектов с конкретным значением E_t , при которой неравенство времен жизни носителей равно $\tau_p/\tau_n = 1 - x$. Тем самым мы установим предельную концентрацию, вплоть до которой можно использовать упрощенную модель ШРХ. И при этом ошибка не превысит указанного отношения времен жизни носителей.

Воспользуемся формулой (3). Для определенности рассмотрим случай полупроводника p -типа с $(-/0)$ -дефектами, т.е. дефектами с зарядовыми состояниями $(-/0)$. Искомая зависимость $N_t(\Delta E_t)$ для малого уровня инжекции ($\Delta p \ll N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$) и различных γ в кремнии p -типа представлена на рис. 1 сплошными линиями 1 и 2. Мы положили $|x| = 0.5$. Заметим, что

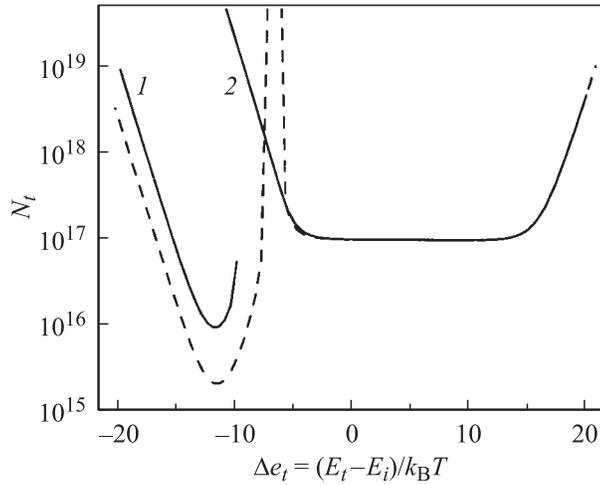


Рис. 1. Зависимости концентрации $(-)/0$ -дефектов (N_t) в p -Si от положения их уровня энергии (E_t) при $\gamma = 100$ и малом уровне инжекции. $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $|x| = 0.5$. Сплошная кривая 1 соответствует области $x < 0$, сплошная кривая 2 — области $x > 0$, пунктирные кривые — приближению $p_0 = N_a$.

такое значение x в указанном образце могли бы обеспечить, например, радиационные $E4$ -центры ($\Delta e_t = 5.41$, $\gamma = 6.83$) при концентрации $N_t \approx 6.8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ [10,11]. При том же уровне легирования в кремнии n -типа данные центры дали бы $x = 0.5$ уже при концентрации $N_t \approx 1.3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Для p_0 использовано приближение

$$p_0 \approx N_a + \frac{N_t p_1}{p_0 + p_1}.$$

Кривая 1 на рис. 1 соответствует тем значениям E_t и N_t , которые обеспечивают $x < 0$, т.е. избыток неравновесных электронов. Для кривой 2 имеем $x > 0$ и соответственно избыток неравновесных дырок. В сравнении с равновесным значением при $x < 0$ степень заполнения уровня дефектов основными носителями увеличивается, при $x > 0$ — уменьшается.

На рис. 1 пунктиром представлена та же зависимость $N_t(\Delta e_t)$, но рассчитанная при условии $p_0 = N_a$. Такое упрощенное условие электронейтральности было использовано при построении аналогичных зависимостей в работе [1]. Именно такого рода кривые получили бы авторы [1], если бы рассматривали случай немалого x . В зависимости имеется разрыв в окрестности точки

$$\Delta e_0 = \ln \frac{\gamma n_i}{p_0}.$$

Можно показать, что ширина соответствующего „пробела“ равна

$$\ln \frac{1 + |x|}{1 - |x|},$$

что, например, при $x = 0.5$ составляет примерно $k_B T$. Заметим, что область $x < 0$ находится слева от пробела, тогда как справа от него $x > 0$. В работе [1] кривые

$N_{\text{crit}}(\Delta e_t)$ в точках $\Delta e_t = \Delta e_0$ устремлялись в бесконечность и не имели пробела. Действительно, при $x \rightarrow 0$ пробел исчезает.

Как видно из рис. 1, учет зависимости концентрации свободных носителей от концентрации дефектов может существенно модифицировать кривые $N_t(\Delta e_t)$ в сравнении с приближением $p_0 = N_a$. В первую очередь это относится к области $x < 0$, где значение p_1 может принимать большие значения. Теперь между областями отрицательных и положительных x нет пробела. Более того, область $x > 0$ распространяется на всю запрещенную зону в отличие от области $x < 0$, которая либо примыкает к зоне основных носителей заряда (как на рис. 1), либо вообще отсутствует. Заметим, что различия со случаем $p_0 = N_a$ проявляются тем сильнее, чем больше параметр γ .

Сплошные кривые на рис. 1 соответствуют неупрощенной модели ШРХ, но эту зависимость можно сопоставить с расчетом в рамках интересующей нас упрощенной модели, когда $x \approx 0$. Надо лишь в случае, когда одному и тому же значению Δe_t соответствуют два значения N_t , выбрать меньшее из них. Так, из сплошной кривой на рис. 1 получим одну из кривых на рис. 2 ($\gamma = 100$). Аналогичным образом, меняя параметр γ , строятся и остальные кривые на рис. 2. Все они относятся к случаю $(-)/0$ -центров при малом уровне инжекции и уровне легирования $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Таким способом для каждого Δe_t мы найдем максимальную концентрацию дефектов, при которой использование упрощенной модели оправдано. Вплоть до этой концентрации ошибка не превысит принятого нами предела $\tau_p/\tau_n = 1 - x$.

Как видно из рис. 2, концентрация дефектов, допустимая упрощенной моделью ШРХ с заданным значением $|x| = 0.5$, может быть существенно меньше N_a . Последнее имеет место, если мал коэффициент γ , а сам дефект является достаточно глубоким. И наоборот, в

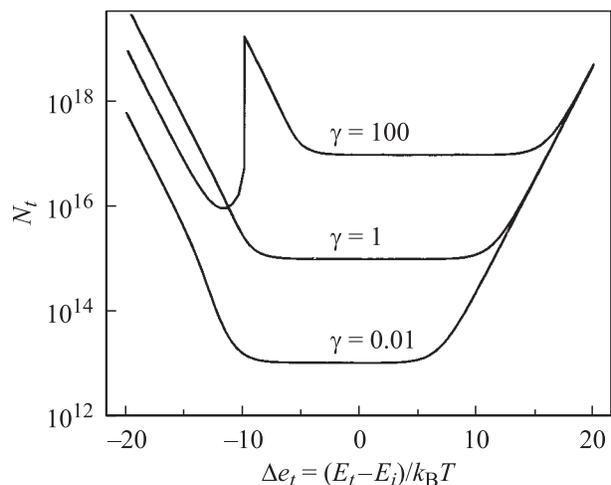


Рис. 2. Зависимости допустимой упрощенной моделью ШРХ концентрации $(-)/0$ -дефектов в p -Si от положения их уровня энергии для значений $\gamma = 0.01, 1, 100$ при малом уровне инжекции. $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $|x| = 0.5$.

случае дефектов с большими значениями γ использование упрощенной модели ШРХ обычно оправдано даже при низких уровнях легирования. Заметим, что наши графики имеют качественные отличия от соответствующих графиков из работы [1].

4. Зависимость применимости модели ШРХ от уровня инжекции

Из формулы (3) следует, что при фиксированном x концентрация N_t возрастает с повышением уровня инжекции Δp . Поэтому, если даже при малом Δp допустимые упрощенной моделью концентрации N_t невелики, то с ростом Δp это ограничение снимается [1]. Однако для некоторых дефектов зависимость $N_t(\Delta p)$ может быть слабой. В таком случае применимость упрощенной модели ШРХ может быть ограниченной и в случае немалого уровня инжекции.

Как это видно из формулы (3), в полупроводнике p -типа ($n_0 \ll p_0$) инжекция слабо влияет на величину N_t , если

$$\Delta p \ll \frac{\gamma(p_0 + p_1) + n_1}{\gamma + 1}.$$

Аналогичное условие для полупроводника n -типа:

$$\Delta n \ll \frac{\gamma^{-1}(n_0 + n_1) + p_1}{\gamma^{-1} + 1}.$$

Если $\gamma > 1$, то при одном и том же уровне легирования неравенство легче выполняется при легировании акцепторами, если же $\gamma < 1$, то донорами. Это подтверждается примером радиационных $E4$ -центров в p -Si и n -Si [10,11]. Для этого случая получаем

$$\Delta p \text{ (см}^{-3}\text{)} \ll 2.9 \cdot 10^{11} + 0.9 p_0$$

и соответственно

$$\Delta n \text{ (см}^{-3}\text{)} \ll 2.9 \cdot 10^{11} + 0.1 n_0.$$

Дополнив приведенные выше условия неравенствами $\Delta p \ll p_0$ и $\Delta n \ll n_0$, найдем ограничение на уровень инжекции, при котором можно говорить о независимости от него времен жизни носителей заряда. Это следует из формулы (2). Для p -Si с Fe_i -центрами получим

$$\Delta p \text{ (см}^{-3}\text{)} \ll 1.5 \cdot 10^{10} + 1.4 \cdot 10^{-3} p_0.$$

Поэтому зависимость времен жизни от уровня инжекции в таком образце должна наступать при существенно более низком уровне легирования, чем в p -Si с $E4$ -центрами [1,10].

5. Рекомбинационные центры разных типов

В реальных полупроводниках обычно присутствуют рекомбинационные центры и ловушки разных типов. В этом случае для параметра x можно получить выра-

жение, обобщающее формулу (3). Для полупроводника p -типа

$$x = \sum_k \frac{N_{tk}[(1-x)p_0 - \gamma_k p_{1k}]}{(p_0 + p_{1k})[(p_0 + p_{1k})(\gamma_k + n_{1k}/p_0) + \Delta p(\gamma_k + 1 - x)]}. \quad (4)$$

Здесь для различения разных типов дефектов, где это необходимо, использован индекс k . В работе [1] высказано утверждение, что в случае множества типов дефектов для каждого из них должно выполняться ограничение на концентрацию, справедливое для случая образца с дефектами данного типа. Другими словами, суммарная допустимая концентрация N_t не меньше суммы допустимых концентраций N_{tk} для каждого типа дефектов в отдельности. Однако из формулы (4) следует, что это не всегда так. Одни дефекты могут создавать избыток неравновесных свободных электронов, другие — дырок.

Если обратимся к примеру кремния с радиационными центрами $E1$ и $E4$, то в p -Si при всех уровнях легирования дефекты обоих типов создают избыток неравновесных дырок. Поэтому повышение концентрации одного типа дефектов действительно снижает допустимую концентрацию дефектов другого типа. Однако в n -Si ситуация несколько иная. $E4$ -центры практически всегда создают избыток неравновесных электронов (при $N_d > 3.3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$, если не рассматривать случай очень больших концентраций дефектов). В то же время $E1$ -центры ($E_t = E_i + 0.40 \text{ эВ}$) могут создавать избыток как электронов, так и дырок. В литературе существует значительный разброс в значениях коэффициента захвата электронов этими центрами, так что возможные значения параметра γ лежат в интервале 1.8–394 [12]. Соответственно крайним значениям γ в указанном интервале $E1$ -центры создают избыток дырок, если N_d меньше $2.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ или $1.1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. В этом случае суммарная допустимая концентрация превысит сумму допустимых концентраций для каждого типа дефектов. При этом использование упрощенной модели ШРХ оправдано при более высоком N_t , чем в случае образца с дефектами лишь одного типа.

6. Заключение

Упрощенная модель рекомбинации ШРХ может быть использована при измерениях времен жизни носителей заряда, только если концентрация дефектов не превосходит некоторого граничного значения. Последние определяются параметрами самих центров, уровнем и типом легирования полупроводника, его температурой. Кроме того, результат зависит от погрешности, которая считается приемлемой при нахождении времен жизни носителей. Допустимое значение концентрации дефектов может быть на несколько порядков ниже уровня легирования. При малом уровне инжекции времена жизни носителей в таких образцах существенно разнятся.

При оценке допустимой концентрации дефектов следует корректно учитывать роль последних в балансе носителей заряда. В первую очередь это касается дефектов, уровни энергии которых лежат вдали от зоны неосновных носителей. Даже если уровень инжекции не мал, для некоторых дефектов ограничения на допустимую их концентрацию могут быть существенны. В то же время в полупроводнике с несколькими типами дефектов такого рода ограничения могут быть слабее, чем в случае дефектов одного типа.

Знание предельных концентраций дефектов необходимо для получения надежных результатов при измерениях времен жизни носителей заряда с помощью методики, основанных на упрощенной модели рекомбинации ШРХ.

Список литературы

- [1] D. Macdonald, A. Cuevas. *Phys. Rev. B*, **67**, 075 203 (2003).
- [2] S. Rein, T. Rehr, W. Warta, S.W. Glunz. *J. Appl. Phys.*, **91**, 2059 (2002).
- [3] J.S. Blakemore. *Semiconductor Statistics* (Oxford, Pergamon, 1962).
- [4] H. Bleichner, P. Jonsson, N. Keskitalo, E. Nordlander. *J. Appl. Phys.*, **79**, 9142 (1996).
- [5] D.L. Meier, J.-M. Hwang, R.B. Campbell. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **35**, 70 (1988).
- [6] W. Shockley, W.T. Read. *Phys. Rev.*, **87**, 835 (1952).
- [7] S.Zh. Karazhanov. *Semicond. Sci. Technol.*, **16**, 276 (2001).
- [8] S.Zh. Karazhanov. *J. Appl. Phys.*, **88**, 3941 (2000).
- [9] S.C. Choo. *Phys. Rev. B*, **1**, 687 (1970).
- [10] H. Bleichner, P. Jonsson, N. Keskitalo, E. Nordlander. *J. Appl. Phys.*, **79**, 9142 (1996).
- [11] N. Keskitalo, P. Jonsson, K. Nordgren, H. Bleichner, E. Nordlander. *J. Appl. Phys.*, **83**, 4206 (1998).
- [12] H.-J. Schultze, A. Frohnmeyer, F.-J. Niedernostheide, F. Hille, P. Tutto, T. Pavelka, G. Wachutka. *J. Electrochem. Soc.*, **148**, G655 (2001).

Редактор Т.А. Полянская

Applicability of a simplified Shockley–Read–Hall model for semiconductors with different defect types

A.N. Yashin

Institute of Physics of Solids and Semiconductors,
National Academy of Sciences of Belorussia,
220072 Minsk, Belorussia