

Проявление в функции Гоффмана особенностей генерационно-рекомбинационных свойств бистабильных дефектов в полупроводниках

© А.Г. Никитина[¶], В.В. Зуев^{¶¶}

Московский инженерно-физический институт (государственный университет),
115409 Москва, Россия

(Получена 20 декабря 2007 г. Принята к печати 15 января 2008 г.)

Теоретически исследованы особенности температурной зависимости концентрации свободных основных носителей в полупроводниках при температурной разрядке бистабильных центров различной электрической активности: двухуровневых акцепторов, двухуровневых доноров, амфотерных центров. Прослежено влияние на разрядку уровня компенсации и отношения величин энергий связи одного и двух электронов на центре. Результаты выражены через особенности поведения функции Гоффмана.

PACS: 61.72.Bb, 61.80.Az, 61.72.Ji, 71.55.-i

1. Введение

Необходимость получения достоверной информации о микроскопическом поведении дефекта при изменении заряда на нем делает актуальной задачу поиска соответствующих методов обработки макроскопических характеристик, в частности температурной зависимости концентрации основных носителей (ТЗКН) в полупроводнике при различных степенях компенсации в соответствующих температурных интервалах. Один из таких методов был предложен в работе [1], развитие его получило в работах [2–7]. Основная идея метода состоит в применении дифференциальной обработки ТЗКН в условиях различного темпа изменения концентрации свободных носителей n и энергии Ферми E_F с температурой T . Было замечено, что если электронные уровни дефектов расположены достаточно далеко друг от друга, то дифференциальная характеристика, функция размерности концентрации

$$Y(E_F) \equiv -k_B T \frac{dn}{dE_F}$$

(k_B — постоянная Больцмана) от энергии Ферми, имеет вид спектральных полос [2–7]. По положению максимумов этой функции на оси E_F и их величине определяют электронный энергетический спектр в запрещенной зоне и концентрацию дефектов соответственно. Сравнивая полуширину полосы с температурой, при которой наблюдается максимум, как было показано в работах [3,4], можно определить, обладает ли данный дефект U^- -свойствами.

Данный метод использовался, в частности, для определения параметров таких дефектов, как вакансии в кремнии [3,4], кислородные термодоноры в Si [7,8] и Ge [9], а также водородосодержащие доноры в кремнии [10].

Цель нашей работы состояла в исследовании влияния особенностей генерационно-рекомбинационных свойств

бистабильных дефектов с различным характером электрической активности в полупроводниках на дифференциальную характеристику температурной зависимости концентрации свободных носителей, т.е. функцию Гоффмана, в условиях различного уровня компенсации.

2. Определение параметров бистабильных двухуровневых дефектов методом дифференциального анализа ТЗКН

2.1. Бистабильный акцепторный двухуровневый центр

2.1.1. Модель бистабильного акцепторного двухуровневого центра. Конфигурационно-координатная модель бистабильного акцепторного двухуровневого центра в среде (кристаллическом или аморфном полупроводнике) может быть представлена следующим образом. Для центра, находящегося в конфигурации Q_1 , реализуются зарядовые состояния -2 (A_1^{2-}) и -1 (A_1^-), а в Q_2 — состояния с зарядом -1 (A_2^-) и 0 (A_2^0) соответственно. При этом в однократно отрицательно заряженном состоянии дефект A^- обладает большей энергией в среде в конфигурации Q_1 , чем в Q_2 . Между этими конфигурациями для центров, находящихся в однократно отрицательно заряженном состоянии, существует возможность динамических переходов. Вероятности таких переходов — ω_{12}^- и ω_{21}^- — зависят от температуры и высоты соответствующих энергетических барьеров W_{12}^- и W_{21}^- . В принятой модели полная ионизация дефекта (удаление второго электрона) возможна лишь тогда, когда он находится в конфигурации Q_2 , т.е. предполагается, что энергия удаления второго электрона в конфигурации Q_1 гораздо больше, чем сумма энергии барьера перехода W_{12}^- и энергии удаления электрона в конфигурации Q_2 .

Для двухуровневых центров существует возможность реализации одной из двух схем электронного спектра

[¶] E-mail: AGNikitina@hotmail.com

^{¶¶} E-mail: VVZuev@MEPHI.ru

в запрещенной зоне полупроводника — прямой или обратный порядок следования электронных уровней. Прямой порядок характеризуется тем, что для такого центра энергия связи второго избыточного электрона E_1 меньше энергии связи первого избыточного электрона E_2 . Для центра с обратным порядком — энергия связи второго избыточного электрона E_1 больше энергии связи первого избыточного электрона E_2 . Такой центр называют еще центром с отрицательной корреляционной энергией или U^- -центром. Это возможно, несмотря на кулоновское отталкивание второго электрона от первого, из-за изменения взаимодействия электронов центра с окружением при локализации второго электрона.

2.1.2. Положительная корреляционная энергия. На рис. 1 представлены результаты численного расчета функции Гоффмана — $Y(E_F)$ для двухуровневого акцепторного центра с прямым порядком следования электронных уровней (т.е. $E_{a2} > E_{a1}$, где E_{a1} и E_{a2} — отсчитанные от дна зоны проводимости E_c энергии электронных переходов между состояниями $A_1^{2-} \rightarrow A_1^-$ и $A_2^- \rightarrow A_2^0$ бистабильного акцепторного центра соответственно). Понятно, что в равновесных условиях такой центр будет проявляться в ТЗКН только в полупроводнике n -типа в соответствующих условиях компенсации — когда возможно первоначальное (при низких температурах) заполнение электронами акцепторных состояний центра с мелких донорных состояний.

Видно (рис. 1, кривые 1 и 2), что при незначительном уровне компенсации (т.е. когда концентрация мелких доноров N_d намного меньше концентрации бистабильных акцепторных центров N) будет наблюдаться максимум характеристики $Y(E_F)$, связанный только с состоянием A_2^- . При этом положение максимума характеристики $Y(E_F)$ не соответствует энергии ионизации данного акцепторного уровня, а смещено в область больших отрицательных энергий. Такое поведение характеристики $Y(E_F)$ связано с тем, что в данных условиях компенсации уровень Ферми не пересекает электронный уровень состояния E_{a2} . Следует отметить, что концентрация акцепторных состояний, определенная методом дифференциального анализа ТЗКН при незначительном уровне компенсации, соответствует концентрации компенсирующих мелких донорных центров. Таким образом, когда концентрация компенсирующих донорных центров заметно меньше концентрации бистабильных двухуровневых акцепторных центров, то на характеристике $Y(E_F)$ будет наблюдаться только один максимум, высота и положение которого зависят от уровня компенсации. Это может ошибочно интерпретироваться как возникновение новых дефектов, связанных с компенсацией.

В случае, когда уровень компенсации близок к 0.5 (т.е. $2N_d \approx N$), в определенном интервале энергий E_F , где функция $Y(E_F)$ определяется состоянием E_{a2} , будет наблюдаться полюс (рис. 1, кривая 3). Следовательно, в этих условиях компенсации невозможно корректно определить параметры бистабильных двухуровневых

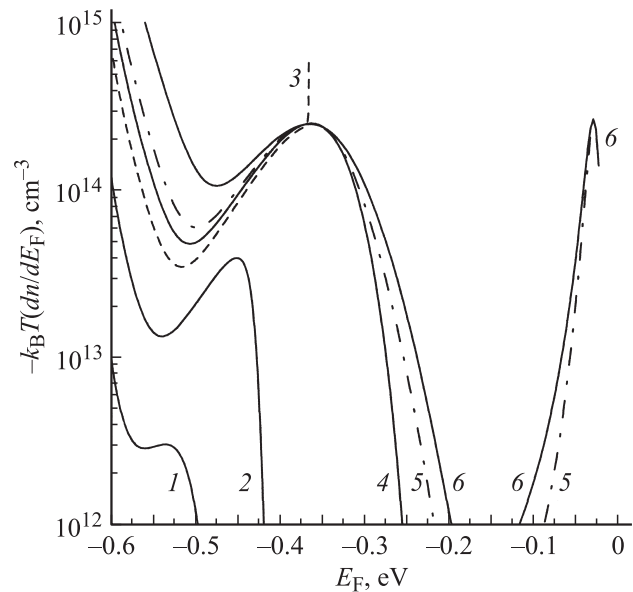


Рис. 1. Результаты численного расчета функции $Y(E_F)$ для бистабильного двухуровневого акцепторного центра с прямым порядком следования электронных уровней ($E_{a1} = 0.13$ эВ и $E_{a2} = 0.37$ эВ) для различных соотношений между концентрациями бистабильных акцепторных центров $N = 10^{15}$ см $^{-3}$ и компенсирующей донорной примеси N_d , 10^{14} см $^{-3}$: 1 — 0.1, 2 — 1, 3 — 6, 4 — 10, 5 — 15.5, 6 — 50.

акцепторных центров по дифференциальному анализу ТЗКН. Наличие полюса у характеристики $Y(E_F)$ связано с тем, что в этой области температур положение уровня Ферми в запрещенной зоне полупроводника меняется немонотонно с изменением температуры. Таким образом, в принципе можно наблюдать смену знака функции Гоффмана.

В случае, когда концентрация компенсирующих мелких доноров сравнима с концентрацией бистабильных двухуровневых акцепторных центров, т.е. $N \approx N_d$ (рис. 1, кривая 4), параметры состояния E_{a2} бистабильных двухуровневых акцепторных центров (т.е. концентрация и положение в запрещенной зоне полупроводника) будут определяться следующими соотношениями:

$$Y_{a2}^{\max}(E_F = E_{F2}^{\max}) = \frac{N}{4},$$

$$E_{F2}^{\max} = E_{a2}, \quad \delta E_F \approx 3.5 k_B T_{a2}^{\max}.$$

Необходимо отметить, что при этом невозможно определить параметры состояния E_{a1} , поскольку в данных условиях компенсации состояние E_{a1} не может быть заполнено электронами даже при низких температурах. Как следствие, в этом случае такое состояние не проявляется ни в ТЗКН, ни в функции Гоффмана.

Когда по уровню компенсации выполняется условие $N < N_d < 1.5N$, на характеристике $Y(E_F)$ будут наблюдаться два максимума. В этом случае с ростом уровня

компенсации (с увеличением концентрации N_d) положение и высота полосы, обусловленной состоянием E_{a2} , не изменяются, а его параметры можно определить по функции Гоффмана:

$$Y_{a2}^{\max}(E_F = E_{F2}^{\max}) = \frac{N}{4},$$

$$E_{F2}^{\max} = E_{a2}, \quad \delta E_F \approx 3.5k_B T_{a2}^{\max}.$$

Полоса, обусловленная состоянием E_{a1} , смещена в область больших отрицательных энергий, а значение максимума $Y_{a1}^{\max}(E_F = E_{F1}^{\max})$ растет с ростом компенсации. Такая картина также может ошибочно интерпретироваться как возникновение новых дефектов, связанных с изменением уровня компенсации.

В случае, когда уровень компенсации близок к 1.5, т.е. $N_d \approx 1.5N$, в определенном интервале энергий E_F , где функция $Y(E_F)$ определяется состоянием E_{a1} , будет наблюдаться полюс (рис. 1, кривая 5). В этих условиях невозможно определить параметры состояний E_{a1} по дифференциальному анализу ТЗКН. Наличие полюса у характеристики $Y(E_F)$ связано с тем, что в этой области температур положение уровня Ферми в запрещенной зоне полупроводника меняется немонотонно с изменением температуры.

В случае, когда концентрация компенсирующих мелких доноров равна или больше (сравнима) удвоенной концентрации бистабильных двухуровневых акцепторных центров ($N_d \geq 2N$), параметры бистабильных двухуровневых акцепторных центров (т.е. концентрация и электронный энергетический спектр в запрещенной зоне полупроводника) можно определить по функции Гоффмана следующим образом (рис. 1, кривая 6):

$$Y_{a1}^{\max}(E_F = E_{F1}^{\max}) = \frac{N}{4},$$

$$E_{F1}^{\max} = E_{a1} - \Delta W^-, \quad \delta E_F = 3.5k_B T_{a1}^{\max};$$

$$Y_{a2}^{\max}(E_F = E_{F2}^{\max}) = \frac{N}{4},$$

$$E_{F2}^{\max} = E_{a2}, \quad \delta E_F \approx 3.5k_B T_{a2}^{\max}.$$

Следует отметить, что положение максимума $Y(E_F)$ -характеристики E_{F1}^{\max} определяется не только энергией электронного состояния E_{a1} , но и энергетическими затратами на изменение конфигурации ΔW^- между состояниями A_1^- и A_2^- . Тот факт, что энергетические затраты на изменение конфигурации дефекта определяют положение максимума функции Гоффмана, является отличительной особенностью проявления бистабильности центра в дифференциальной характеристике ТЗКН.

2.1.3. Отрицательная корреляционная энергия. При определении параметров бистабильных двухуровневых акцепторных центров с отрицательной корреляционной энергией (т.е. $E_{a2} < E_{a1}$) по функции Гоффмана также будет наблюдаться ряд особенностей. Если концентрация мелких доноров меньше концентрации бистабильных акцепторных U^- -центров, то на характеристике

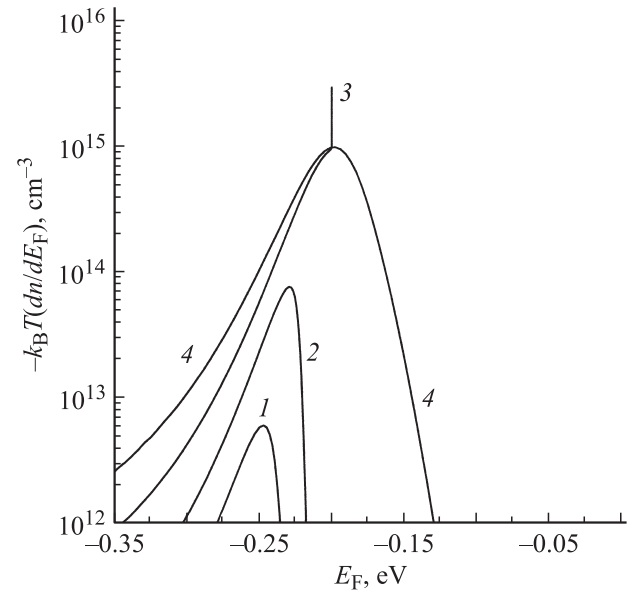


Рис. 2. Результаты численного расчета $Y(E_F)$ для бистабильного двухуровневого акцепторного центра с обратным порядком следования электронных уровней ($E_{a1} = 0.37$ эВ и $E_{a2} = 0.13$ эВ) для различных соотношений между концентрациями бистабильных акцепторных центров $N = 10^{15}$ см $^{-3}$ и компенсирующей донорной примеси N_d , 10^{14} см $^{-3}$: 1 — 0.1, 2 — 1, 3 — 10, 4 — 50.

$Y(E_F)$ будет наблюдаться один максимум, положение на оси E_F и высота на оси Y которого зависят от степени компенсации (рис. 2, кривые 1 и 2). Следовательно, в этих условиях корректное определение параметров бистабильных акцепторных U^- -центров невозможно.

В случае точной компенсации бистабильных акцепторных U^- -центров мелкими донорами (рис. 2, кривая 3), затруднительно ввести понятие полуширины полосы функции Гоффмана, так как $Y(E_F)$ имеет особую форму — полюс. Максимальное значение характеристики $Y(E_F)$ (полюс) находится около значения

$$E_F^{\max} = \frac{1}{2} [(E_{a1} + E_{a2}) - \Delta W^-].$$

Наличие полюса у функции Гоффмана $Y(E_F)$ делает невозможным определение параметров бистабильных двухуровневых акцепторных центров с отрицательной корреляционной энергией (бистабильных акцепторных U^- -центров). В этом случае полюс функции Гоффмана обусловлен стабилизацией (пиннингом) уровня Ферми, т.е. $dE_F/dT = 0$ в соответствующем интервале температур.

Когда концентрация компенсирующих мелких донорных центров равна или больше удвоенной концентрации бистабильных двухуровневых акцепторных дефектов с отрицательной корреляционной энергией (рис. 2, кривая 4), то параметры полосы характеристики $Y(E_F)$ будут связаны с параметрами дефектов следующими

соотношениями:

$$Y^{\max}(E_F = E_F^{\max}) = N,$$

$$E_F^{\max} = \frac{(E_{a1} + E_{a2}) - \Delta W^-}{2}, \quad \delta E_F \approx 1.8k_B T^{\max}.$$

Необходимо отметить, что ширина полосы δE_F на полувысоте характеристики $Y(E_F)$ зависит от уровня компенсации (возрастает с ростом уровня компенсации), а концентрация состояний, определенная по максимуму функции Гоффмана, соответствует концентрации акцепторных центров с отрицательной корреляционной энергией. Значение E_F^{\max} содержит суммарную информацию об энергетических параметрах центра. Сужение пика характеристики $Y(E_F)$ ($\delta E_F \approx 1.8k_B T^{\max}$) — отражение особенности генерационно-рекомбинационных свойств центров с отрицательной корреляционной энергией: отдавать или принимать носители парами.

2.2. Бистабильный донорный двухуровневый центр

2.2.1. Модель бистабильного донорного двухуровневого центра. Двухуровневый донорный центр может находиться в трех зарядовых состояниях: 0, +1 и +2. Когда центр находится в конфигурации Q_1 , то реализуются зарядовые состояния 0 и +1, а в Q_2 — состояния +1 и +2. При этом в конфигурации Q_1 однократно ионизованный двухуровневый донорный центр (состояние A^+) обладает большей энергией, чем в конфигурации Q_2 . Для бистабильного двухуровневого донорного центра, находящегося в состоянии A^+ , существует возможность динамических переходов между этими конфигурациями. Вероятности таких переходов — ω_{12}^+ и ω_{21}^+ — зависят от температуры и высоты соответствующих энергетических барьеров W_{12}^+ и W_{21}^+ .

2.2.2. Прямой порядок уровней. Результаты численного расчета функции Гоффмана для двухуровневого донорного центра с прямым порядком следования электронных уровней представлены на рис. 3 (т.е. когда выполняется условие $E_{d1} < E_{d2}$, где E_{d1} и E_{d2} — отсчитанные от дна зоны проводимости E_c энергии электронных переходов при реакциях $A_1^0 \rightarrow A_1^+$ и $A_2^+ \rightarrow A_2^{2+}$ бистабильного донорного центра соответственно). E_{d1} и E_{d2} находятся в верхней половине запрещенной зоны электронного полупроводника.

Видно, что, когда компенсирующие центры отсутствуют (кривая 1, рис. 3) или когда концентрация мелких акцепторов N_a намного меньше концентрации исследуемых бистабильных двухуровневых центров N (кривая 2, рис. 3): $N_a \ll N$, на характеристике $Y(E_F)$ наблюдаются два максимума. Параметры бистабильных двухуровневых донорных центров определяются следу-

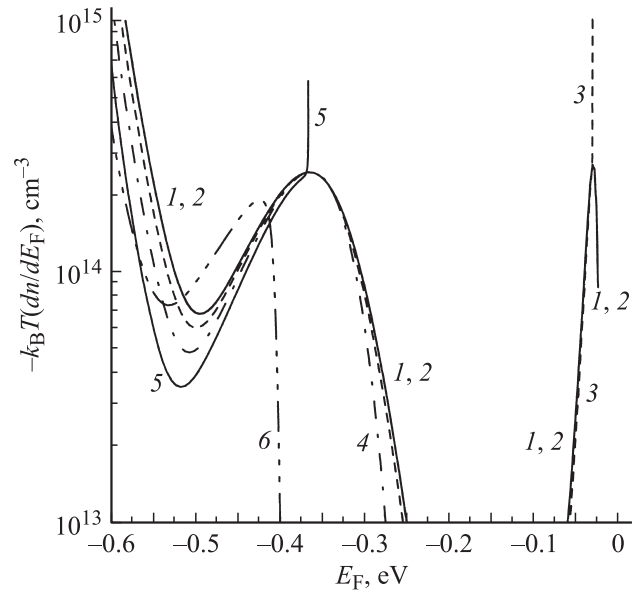


Рис. 3. Результаты численного расчета $Y(E_F)$ для бистабильного двухуровневого донорного центра с прямым порядком следования электронных уровней ($E_{d1} = 0.13$ эВ и $E_{d2} = 0.37$ эВ) для различных соотношений между концентрациями бистабильных донорных центров $N = 10^{15}$ см $^{-3}$ и компенсирующей акцепторной примеси N_a , 10^{14} см $^{-3}$: 1 — 0, 2 — 0.1, 3 — 4.5, 4 — 10, 5 — 14.5, 6 — 18.

ющим образом:

$$Y_{d1}^{\max}(E_F = E_{F1}^{\max}) = \frac{N}{4},$$

$$E_{F1}^{\max} = E_{d1} - \Delta W^+, \quad \delta E_F = 3.5k_B T_{d1}^{\max},$$

$$Y_{d2}^{\max}(E_F = E_{F2}^{\max}) = \frac{N}{4}, \quad E_{F2}^{\max} = E_{d2}, \quad \delta E_F \approx 3.5k_B T_{d2}^{\max}.$$

При этом полуширина полос функции Гоффмана по отношению к T_{d1}^{\max} и T_{d2}^{\max} соответствует прямому порядку следования электронных уровней. Видно также, что положение максимума характеристики $Y(E_F)$, который связан с состоянием E_{d1} , определяется не только энергией ионизации этого состояния, но и затратами на изменение конфигурации $\Delta W^+ \equiv W_{21}^+ - W_{12}^+$ между состояниями A_1^+ и A_2^+ .

В случае, когда уровень компенсации близок к 0.5, т.е. $2N_a \approx N$, в соответствующем интервале энергий E_F , где функция Гоффмана определяется состоянием E_{d1} , будет наблюдаться полюс (кривая 3, рис. 3). Это обстоятельство делает невозможным корректное определение положения электронного уровня E_{d1} в запрещенной зоне полупроводника и концентрации этих состояний. Наличие полюса у характеристики $Y(E_F)$ связано с тем, что в этой области температур положение уровня Ферми в запрещенной зоне полупроводника изменяется немонотонно с изменением температуры.

В определенных условиях компенсации, когда выполняется условие $0.5N < N_a < N$, на характеристике $Y(E_F)$

наблюдаются два максимума. Причем положение высокоэнергетического максимума не изменяется с ростом уровня компенсации (с увеличением концентрации N_a), а низкоэнергетический максимум (соответствующий состоянию E_{d1}) смещается в область больших энергий, при этом уменьшается значение $Y_{d1}^{\max}(E_F = E_{F1}^{\max})$. Таким образом, в данных условиях компенсации по функции Гоффмана можно определить достоверно только параметры электронного уровня E_{d2} :

$$Y_{d2}^{\max}(E_F = E_{F2}^{\max}) = \frac{N}{4},$$

$$E_{F2}^{\max} = E_{d2}, \quad \delta E_F \approx 3.5k_B T_{d2}^{\max}.$$

Поскольку высота и положение низкоэнергетического пика зависят от уровня компенсации, такая картина также может ошибочно интерпретироваться как возникновение новых дефектов, связанных с компенсацией при обработке ТЗКН с использованием функции Гоффмана.

В определенных условиях компенсации, когда выполняется условие $N < N_a < 1.5N$, будет наблюдаться только один максимум (рис. 3, кривая 4). При этом параметры состояния E_{d2} определяются следующими соотношениями:

$$Y_{a2}^{\max}(E_F = E_{F2}^{\max}) = \frac{N}{4},$$

$$E_{F2}^{\max} = E_{a2}, \quad \delta E_F \approx 3.5k_B T_{a2}^{\max}.$$

В данных условиях компенсации состояние E_{d1} не может быть заполнено электронами даже при низких температурах, поэтому это состояние не проявляется в ТЗКН. В этом случае невозможно определить параметры состояния E_{d1} с помощью функции Гоффмана.

Если уровень компенсации близок к 1.5, т.е. $N_a \approx 1.5N$, то в интервале энергий E_F , в котором функция $Y(E_F)$ определяется состоянием E_{d2} , будет наблюдаться полюс (рис. 3, кривая 5). Наличие полюса делает невозможным оценку концентрации бистабильных двухуровневых центров и затрудняет определение положения соответствующего электронного уровня в запрещенной зоне полупроводника.

Если выполняется условие $1.5N < N_a < 2N$, то будет наблюдаться один максимум (рис. 3, кривая 6). В этом случае как положение, так и высота максимума функции Гоффмана зависят от степени компенсации и не несут однозначную информацию о параметрах бистабильного двухуровневого донорного центра.

2.2.3. Обратный порядок следования электронных энергетических уровней. На рис. 4 представлены результаты численного расчета характеристики $Y(E_F)$ для бистабильных донорных центров с отрицательной корреляционной энергией (т.е. когда выполняется неравенство $E_{d1} > E_{d2}$). Здесь, как и в случае бистабильных акцепторных U^- -центров, будет также наблюдаться ряд особенностей при определении параметров дефектов по характеристике $Y(E_F)$. Так, в отсутствие компенсации

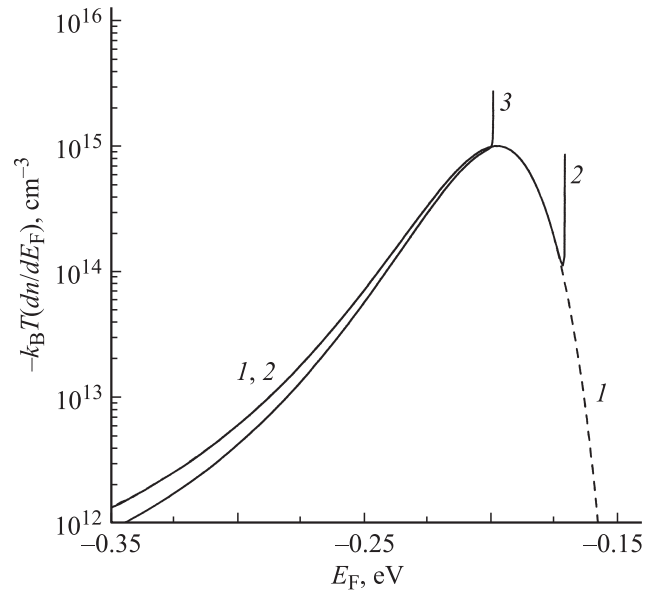


Рис. 4. Результаты численного расчета $Y(E_F)$ для бистабильного двухуровневого донорного центра с обратным порядком следования электронных уровней ($E_{d1} = 0.37$ эВ и $E_{d2} = 0.13$ эВ) для различных соотношений между концентрациями бистабильных донорных центров $N = 10^{15}$ см $^{-3}$ и компенсирующей акцепторной примеси N_a , 10^{14} см $^{-3}$: 1 — 0, 2 — 0.1, 3 — 9.5.

(рис. 4, кривая 1) параметры пика характеристики $Y(E_F)$ будут определяться следующими соотношениями:

$$Y^{\max}(E_F = E_F^{\max}) = N,$$

$$E_F^{\max} = \frac{(E_{d1} + E_{d2}) - \Delta W^+}{2}, \quad \delta E_F \approx 1.8k_B T^{\max}.$$

Если концентрация мелких акцепторов меньше концентрации бистабильных донорных U^- -центров, то характеристика $Y(E_F)$ практически не отличается от некомпенсированного случая (рис. 4, кривая 2).

В случае точной компенсации бистабильных донорных U^- -центров мелкими акцепторами (рис. 4, кривая 3) характеристика $Y(E_F)$ имеет особую форму — полюс. В этих условиях затруднительно ввести понятие полуширины пика характеристики $Y(E_F)$. Максимальное значение характеристики $Y(E_F)$ (полюс) находится около значения

$$E_F^{\max} = \frac{(E_{d1} + E_{d2}) - \Delta W^+}{2}.$$

Наличие полюса у характеристики $Y(E_F)$ делает невозможным определение параметров бистабильных двухуровневых U^- -доноров.

Наличие полюса у характеристики $Y(E_F)$ связано со стабилизацией (пиннингом) уровня Ферми, т.е. $dE_F/dT = 0$ в соответствующем интервале температур.

2.3. Бистабильный амфотерный центр

Модель бистабильного амфотерного центра была предложена и рассмотрена подробно нами в работах [11,12].

2.3.1. Положительная корреляционная энергия. На рис. 5 представлены результаты численного расчета $Y(E_F)$ для бистабильного амфотерного центра с прямым порядком следования электронных уровней (т.е. $E_a < E_d$, где E_a и E_d — энергии акцепторного состояния и донорного состояния амфотерного центра в запрещенной зоне полупроводника, отсчитанные от дна зоны проводимости E_c соответственно). Видно, что в случае некомпенсированного полупроводника будет наблюдаться максимум характеристики $Y(E_F)$, связанный только с донорным уровнем амфотерного центра (рис. 5, кривая 1). При незначительном уровне компенсации (т.е. концентрация мелких доноров N_d намного меньше концентрации амфотерных центров N) можно наблюдать дополнительный пик, который связан с акцепторным состоянием дефекта. При этом положение максимума функции Гоффмана не соответствует энергии ионизации данного акцепторного уровня, а смещено в область больших отрицательных энергий (рис. 5, кривые 2 и 3). Такое поведение характеристики $Y(E_F)$ связано с тем, что в данных условиях компенсации с изменением температуры уровень Ферми не пересекает электронный уровень акцепторного состояния бистабильного амфотерного центра. Следует отметить, что концентрация акцепторных состояний, определенная методом дифференциального анализа ТЗКН при незначительном уровне компенсации, соответствует концентрации компенсирующих мелких донорных центров, которая существенно отличается от концентрации донорных состояний бистабильных амфотерных центров, определенной тем же способом. Так что представляется затруднительным связывать полученные результаты с одним и тем же дефектом.

Когда уровень компенсации близок к 0.5 (т.е. $2N_d \approx N$), в определенном интервале энергий E_F , где функция Гоффмана определяется акцепторным состоянием бистабильного амфотерного центра, будет наблюдаться полюс (рис. 5, кривая 4). В этих условиях невозможно определить параметры акцепторных состояний по дифференциальному анализу ТЗКН. Наличие полюса у характеристики $Y(E_F)$ связано с тем, что в этой области температур положение уровня Ферми в запрещенной зоне полупроводника меняется немонотонно с изменением температуры.

Только в случае, когда концентрация компенсирующих мелких доноров равна или больше (сравнима) концентрации амфотерных центров (рис. 5, кривая 5), параметры амфотерных дефектов (т.е. концентрация и электронный энергетический спектр в запрещенной зоне полупроводника) можно определить из следующих

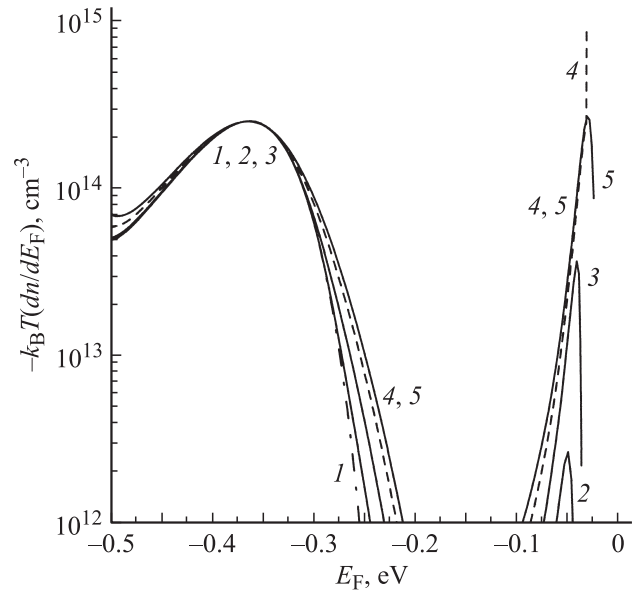


Рис. 5. Результаты численного расчета $Y(E_F)$ для бистабильного амфотерного центра с прямым порядком следования электронных уровней ($E_{a1} = 0.13$ эВ и $E_{d2} = 0.37$ эВ) для различных соотношений между концентрациями бистабильных амфотерных центров $N = 10^{15}$ см $^{-3}$ и компенсирующей донорной примеси N_d , 10^{14} см $^{-3}$: 1 — 0, 2 — 0.1, 3 — 1, 4 — 5, 5 — 10.

соотношений:

$$Y^{\max}(E_F = E_{Fi}^{\max}) = \frac{N_i}{4},$$

$$E_{F1}^{\max} = E_a - \Delta W^0 \quad \text{и} \quad E_{F2}^{\max} = E_d, \quad \delta E_{Fi} \approx 3.5 k_B T_i^{\max},$$

где $i = 1, 2$. Следует отметить, что положение максимума функции Гоффмана, который обусловлен акцепторным состоянием бистабильного амфотерного центра, определяется не только энергией ионизации этого состояния E_a , но и энергетическими затратами на изменение конфигурации $\Delta W^0 \equiv W_{21}^0 - W_{12}^0$ между состояниями A_1^0 и A_2^0 .

2.3.2. Отрицательная корреляционная энергия. Определение параметров бистабильных амфотерных центров с отрицательной корреляционной энергией (т.е. $E_a > E_d$) по функции Гоффмана сопровождается рядом особенностей. Так, в отсутствие компенсирующих центров затруднительно ввести понятие полуширины полосы функции Гоффмана, поскольку функция $Y(E_F)$ имеет особую форму (рис. 6, кривая 1) — полюс около значения

$$E_F^{\max} = \frac{E_a + E_d - \Delta W^0}{2}.$$

Наличие полюса, который обусловлен стабилизацией уровня Ферми, делает невозможным определение параметров бистабильных амфотерных центров с отрицательной корреляционной энергией по дифференциальному анализу ТЗКН в данных условиях компенсации.

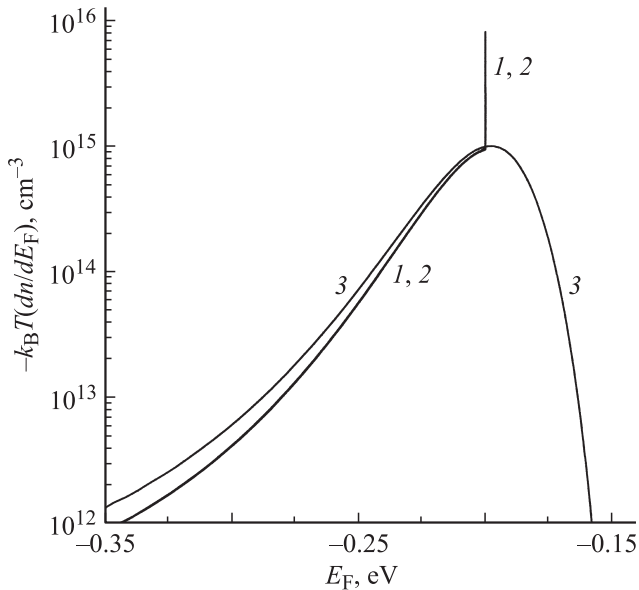


Рис. 6. Результаты численного расчета $Y(E_F)$ для бистабильного амфотерного центра с обратным порядком следования электронных уровней ($E_{a1} = 0.37$ эВ и $E_{d2} = 0.13$ эВ) для различных соотношений между концентрациями бистабильных амфотерных центров $N = 10^{15}$ см $^{-3}$ и компенсирующей донорной примеси N_d , 10^{14} см $^{-3}$: 1 — 0, 2 — 0.1, 3 — 10.

Если концентрация мелких доноров меньше концентрации бистабильных амфотерных U^- -центров, то характеристика $Y(E_F)$ практически не отличается от некомпенсированного случая (рис. 6, кривая 2).

В случае, когда концентрация компенсирующих центров сравнима с концентрацией бистабильных амфотерных U^- -центров (рис. 6, кривые 3 и 4), параметры дефектов определяются по следующим соотношениям:

$$Y^{\max}(E_F = E_F^{\max}) = N_t,$$

$$E_F^{\max} = \frac{E_a + E_d - \Delta W^0}{2}, \quad \delta E_F \approx 1.8 k_B T^{\max}.$$

Таким образом, положение максимума функции Гоффмана определяется не только энергиями ионизации донорного и акцепторного состояний, но и энергетическими затратами на изменение конфигурации центра ΔW^0 . Здесь имеет место сужение полосы на полувысоте δE_F .

3. Обсуждение результатов

Максимум функции Гоффмана обусловлен тем, что с повышением температуры темп генерации αN^- (при $N^- \gg n$, где α — коэффициент эмиссии электрона, N^- — концентрация центров генерации) расчет за счет температурного роста коэффициента эмиссии, а далее за счет заметного опустошения центров генерации N^- — падает. Таким образом, генерационно-рекомбинационные свойства дефектов определяют темп

изменения концентрации свободных носителей со смещением уровня Ферми, dn/dE_F .

Так как U^- -центры отдают носители парами, а не по одному электрону, как это характерно для одноуровневых дефектов или для центров с положительной корреляционной энергией, понятно, что для U^- -центров темп dn/dE_F должен быть примерно в 2 раза больше, чем в обычном случае. Этим обстоятельством объясняется сужение полосы характеристики $Y(E_F)$ для U^- -центров.

В свою очередь, бистабильность дефекта особым образом проявляется в дифференциальной характеристике. Генерационно-рекомбинационные свойства таких дефектов определяются не только параметрами электронных переходов, но и энергетическими затратами, связанными с изменением конфигурации центра [11,12]. Следовательно, применяя метод дифференциальной обработки ТЗКН к исследованию бистабильных дефектов, необходимо учитывать, что энергетические затраты на изменение конфигурации существенным образом влияют на спектр функции $Y(E_F)$ — изменяется положение максимумов.

Необходимо отметить, что полуширина полосы функции Гоффмана зависит от уровня компенсации (растет с ростом уровня компенсации). Таким образом, могут возникнуть трудности с определением по функции Гоффмана — обладает ли дефект отрицательной корреляционной энергией.

Следует отметить также, что если в определенных условиях компенсации уровень Ферми не пересекает электронный уровень дефекта с изменением температуры, то в этом случае метод дифференциального анализа ТЗКН не позволяет корректно определять концентрацию дефектов и их энергетический спектр в запрещенной зоне полупроводника.

4. Заключение

Нами получены следующие результаты.

— Показано, что вид функции $Y(E_F)$ для бистабильных двухуровневых центров существенным образом зависит от уровня компенсации.

— Показано, что вид функции $Y(E_F)$ для бистабильных центров определяется не только параметрами электронных уровней, но и энергетическими затратами, обусловленными изменением конфигурации дефекта.

— При определенных условиях компенсации характеристика $Y(E_F)$ может иметь полюс (разрыв), который обусловлен либо немонотонной температурной зависимостью уровня Ферми (при монотонной ТЗКН), либо его стабилизацией (пиннингом) в соответствующем интервале температур. В этом случае невозможно корректно определить концентрацию дефектов методом дифференциального анализа ТЗКН.

— Зависимость полуширины функции Гоффмана от уровня компенсации может привести к ошибочным выводам при использовании метода дифференциального

анализа ТЗКН для выявления наличия у дефекта отрицательной корреляционной энергии.

— Возникновение новых максимумов характеристики $Y(E_F)$ и их смещение для разных условий компенсации может ошибочно восприниматься как изменение концентрации центров и их энергетического спектра в запрещенной зоне полупроводника или образование новых дефектов или кластеров в зависимости от условий компенсации, которые могут меняться при термообработке или при воздействии ионизирующего излучения.

Следовательно, для корректной интерпретации результатов исследования с целью получения информации о микроскопическом поведении дефекта при изменении заряда на нем данные, полученные методом дифференциального анализа ТЗКН, необходимо дополнять данными, которые получены другими физическими методами [13], например измерения фотопроводимости.

Список литературы

- [1] A. Rose. Phys. Rev., **97**, 1538 (1955).
- [2] H.J. Hoffman. Appl. Phys. A, **19**, 307 (1979).
- [3] H.J. Hoffman. Phys. Rev. Lett., **45**, 1733 (1980).
- [4] H.J. Hoffman. Phys. Rev. B, **23**, 5603 (1981).
- [5] H.J. Hoffman. J. Appl. Phys., **52**, 4070 (1981).
- [6] H.J. Hoffman. Appl. Phys. A, **27**, 39 (1982).
- [7] H.J. Hoffman, H. Nakayama, T. Nishino, Y. Hamakawa. Appl. Phys. A, **33**, 47 (1984).
- [8] Л.Ф. Макаренко, В.П. Маркевич, Л.И. Мулин. ФТП, **19**, 1935 (1985).
- [9] V.V. Litvinov, G.V. Palchik, V.J. Urenev. Phys. Status Solidi A, **108**, 311 (1988).
- [10] Ю.М. Покотило, А.Н. Петух, В.В. Литвинов, В.Г. Цвырко. ФТП, **39**, 802 (2005).
- [11] А.Г. Никитина, В.В. Зуев. ФТП, **41**, 549 (2007).
- [12] А.Г. Никитина, В.В. Зуев. ФТП, **42**, 141 (2008).
- [13] А.Г. Гончарова, В.В. Зуев. ФТП, **25**, 1249 (1991).

Редактор Т.А. Полянская

Determination of electronic properties and concentration of bistable defects by the method of differential treatment of temperature dependence of free carrier concentration

A.G. Nikitina, V.V. Zuev

Moscow Engineering Physics Institute
(State University),
115409 Moscow, Russia

Abstract Application of differential treatment of temperature dependence of free carrier concentration in semiconductors at presence of the bistable centers both with positive, and with negative correlation energy and for various doping levels has been investigated. It is revealed, that the form of the differential characteristic depends on a doping level and energy consumption for change of a configuration of the bistable defect. Such situation can wrongly be perceived as change of concentration of the centers and their electronic spectrum in the band-gap of the semiconductor or formation of new defects or their clusters that are depending on doping level.