

МИКРОЭЛЕКТРОННЫЕ ПРИБОРЫ И СИСТЕМЫ MICROELECTRONIC DEVICES AND SYSTEMS

УДК 615.321

Влияние электрон-фононного взаимодействия на обратные токи p - n -переходов на основе GaAs

А.В. Жуков

Ульяновский государственный университет

Effect of Electron-Phonon Interaction on Reverse Currents of GaAs Based Pn-Junctions

A.V. Zukov

Ulyanovsk State University

Разработан и реализован на примере GaAs алгоритм вычисления параметров электрон-фононного взаимодействия ловушки EL2. На основе данных параметров вычислены полевые зависимости вероятностей безызлучательных переходов с данной ловушки и обратные токи p - n -переходов на GaAs, которые хорошо согласуются с результатами эксперимента.

Ключевые слова: p - n -переходы; обратный ток; генерация; электрон-фононное взаимодействие.

The algorithm for calculating the parameters of the EL2 trap electron-phonon interaction has been developed and implemented on a GaAs example. Based on the given parameters the field dependences of nonradiating junctions from the given trap and the reverse currents of pn-junctions on GaAs, which well correlate with the experiment results, have been calculated.

Keywords: p - n junctions; the reverse current; generation; electron-phonon interaction.

Введение. На величину обратных токов p - n -переходов влияет содержание центров рекомбинации в области пространственного заряда [1, 2]. Наличие центров рекомбинации приводит к росту обратных токов и «мягким» вольт-амперным характеристикам (ВАХ) в предпробойной области [2]. Еще более 50 лет назад С.Т Саа с соавторами была показана ведущая роль центров рекомбинации в формировании обширного участка ВАХ как при прямом смещении (рекомбинация в области пространственного заряда), так и при обратном (генерация через центры рекомбинации) [3]. Тем не менее большинство исследователей по-прежнему применяют классический механизм для описания обратных ВАХ при интерпретации экспериментальных результатов. В то же время

анализ таких результатов для различных структур и материалов показывает, что классический диффузионный механизм формирования обратной ВАХ, как правило, отсутствует [2]. В большинстве случаев наблюдается генерация через центры рекомбинации в области пространственного заряда, усиленная электрическим полем.

Задача электронно-колебательных переходов в современной формулировке впервые возникла в теории спектров молекул. В случае двухатомных молекул она сравнительно проста. На основе принципа Франка – Кондона достигнуто правильное понимание физической ситуации, дано квантово-механическое обоснование этому принципу и выполнены первые квантово-механические расчеты распределения интенсивностей по колебательным подуровням электронного перехода. Современная квантово-механическая теория полос поглощения и люминесценции в случае многоатомных молекул и примесей в ионных кристаллах ведет начало от работ С.И. Пекара, А.С. Давыдова, М.А. Кривоглаза [4–7]. В этих работах раскрыта природа широких электронно-колебательных полос, развиты эффективные методы расчета и получены формулы, хорошо описывающие такие основные свойства этих полос, как стоковый сдвиг, температурная зависимость полуширины, закон зеркальной симметрии Левшина.

Применительно к физике полупроводниковых приборов данное взаимодействие актуально в связи с исследованием электронных процессов, происходящих в области пространственного заряда (ОПЗ) полупроводниковых приборов, а следовательно, в присутствии электрического поля. Первые теоретические исследования ионизации глубоких примесных центров в областях с сильным электрическим полем в полупроводниках с участием квантов колебаний решетки связаны с работами С.Ф. Тимашова [8, 9], Ф.И. Далидчика [10], Р. Пасслера [11], Д. Понса и С. Макрама-Эбейда [11–14]. Эти работы объединяет тот факт, что вероятность таких процессов экспоненциально возрастает с квадратом напряженности электрического поля. В слабых и промежуточных полях результаты, полученные разными авторами, имеют значительные расхождения. К настоящему времени развиты и другие подходы к расчету вероятности туннелирования электрона из центра в электрическом поле в рамках теории многофононных переходов [15, 16]. Такие эффекты важны и для полевых транзисторов. Сопоставление с экспериментом в приведенных публикациях в основном проводилось для ловушки EL-2 в GaAs. В связи с этим авторы этих работ, делая выводы об определяющем вкладе в процесс полевой ионизации глубоких центров электрон-фононного взаимодействия, отмечали, что желательнее проводить большее количество экспериментов на различных образцах, в более широких интервалах напряженности поля и температуры.

Важно обратить внимание, что акт термической эмиссии переводит носитель заряда из локализованного в свободное состояние, т.е. из связанного состояния на уровне электрон попадает в зону проводимости, а дырка – в валентную зону. В соответствии с этим в некоторых работах, в частности в [10], либо основное, либо возбужденное состояние связывают с зонным потенциалом. Строго говоря, это не так. Модель конфигурационных координат разработана для внутрицентровых переходов. Потенциальные кривые описывают энергию решетки в окрестностях дефекта, создающего глубокий уровень, когда электрон находится в основном и возбужденном состояниях. Переход из связанного состояния в свободное не учитывается. Безызлучательный захват в этом случае объясняет механизм многофононного перехода, или способ передачи энергии от дефекта к решетке. Для такого перехода электрон должен быть локализован вблизи дефекта, создающего глубокий уровень. Поэтому однокоординатное приближение и диаграмма конфигурационных координат не отображают зонные потенциалы. Скорее, можно говорить об электронных состояниях, на которые переходят электрон или дырка

при освобождении с ловушки. Энергии этих электронных состояний совпадают с дном зоны проводимости либо с потолком валентной зоны.

Таким образом, однокоординатное приближение можно использовать только для следующей модели: дефект представляет собой квазимолекулу, в которой наблюдаются сильные собственные внутримолекулярные колебания, не подавляющиеся колебаниями решетки из-за слабой связи с ней. Часто электронно-колебательное взаимодействие носит более сложный характер. В таких случаях его невозможно описать одной нормальной координатой. Например, если в системе наблюдается «перемешивание» колебательных состояний из-за эффекта Яна–Теллера, то однокоординатное приближение полностью неприменимо.

В настоящей работе предлагается алгоритм вычисления полевых зависимостей скоростей оптических и безызлучательных переходов, который не использует однокоординатную модель и опирается на экспериментальную форм-функцию оптического перехода. С этой целью применяется общее выражение, полученное в работах [17, 18], для вероятности туннелирования с глубоких рекомбинационных уровней с участием фононов. Это выражение используется для анализа термополевых процессов генерации носителей заряда с рекомбинационных уровней и анализа обратных ВАХ [19, 20]. Экспериментально исследуются обратные токи p – n -переходов на основе эпитаксиального арсенида галлия, выращенного на подложках с ориентацией [111]. Сопоставление эксперимента с расчетами показывает, что обратная ВАХ определяется термогенерацией носителей заряда, ускоренной электрическим полем, с участием ловушки EL2.

Методика эксперимента и экспериментальные результаты. Важным экспериментом является определение параметров электрон-фононного взаимодействия по данным фотоемкостных измерений. Измерение емкости проводилось резонансным методом. Измерителем частоты служил частотомер Ч4-34, для управления которым разработано специальное устройство сопряжения и подключения его к параллельному порту ЭВМ. Монохроматический свет формировался монохроматором МДР-3. ВАХ кремниевых p – n -переходов при прямом и обратном смещениях измерялись на автоматизированном комплексе, созданном на основе приборов, связанных с компьютером каналом общего пользования. Ток измерялся пикоамперметром KEITHLEY 6485, напряжение – цифровым вольтметром В7-40 (напряжение задавалось управляемым источником питания МОТЕСН). В комплексе используются типовые измерительные приборы с классом точности не хуже 0,01 (погрешность измерения напряжения вольтметра В7-40 не превосходит 0,03%). Шаг изменения напряжения смещения 0,02 В.

Фотоемкостные измерения осуществлялись при температуре 80 К в следующей последовательности. С помощью монохроматора задавалась определенная частота падающего на образец света. К образцу в течение 30 с прикладывалось напряжение прямого смещения порядка величины диффузионного потенциала. Затем напряжение переключалось на обратное. Измерялась кинетика увеличения емкости при освещении. По достижении релаксационным процессом насыщения свет выключался и измерялась кинетика уменьшения емкости в темноте. При таком алгоритме измерений величину скорости оптической эмиссии в зависимости от частоты света можно вычислить по формуле [2]

$$e_v^0(\nu) = (\tau_{on}^{-1} - \tau_{of}^{-1}) / \Phi,$$

где τ_{on}^{-1} – постоянная времени релаксации емкости при включении обратного напряжения; τ_{of}^{-1} – постоянная времени релаксации емкости при выключении света; Φ – световой поток в ОПЗ.

В работах [2, 4, 5] показано, что скорость оптической эмиссии является интегралом свертки форм-функции оптического перехода с вероятностью чисто электронного перехода, которая пропорциональна силе осциллятора и плотности состояний. В первом приближении плотность состояний представим в виде корневой функции:

$$e_p^t(v) = \int_{-\infty}^{\infty} q(\varepsilon) A_0 \sqrt{E_c - \varepsilon} d\varepsilon, \quad (1)$$

где $A_0 \sqrt{E_c - \varepsilon}$ – вероятность чисто электронного перехода; $q(\varepsilon)$ – функция, содержащая информацию о вкладе в вероятность перехода фоновой подсистемы.

В работах [3, 4] показано, что $q(\varepsilon)$ с точностью до постоянного коэффициента равняется форм-функции оптического перехода. В настоящей работе эта функция определялась путем численного решения интегрального уравнения (1). Результаты решения приведены на рис.1.

Обратные ВАХ, измеренные при нескольких температурах, приведены на рис.2. Они демонстрируют сильную зависимость обратного тока от приложенного напряжения, но относительно слабую зависимость от температуры проведения эксперимента. И это несмотря на то, что концентрация носителей заряда в квазинейтральной части слаболегированной области составляла 10^{-15} см^{-3} , а ширина ОПЗ достигала 2 мкм. Такая зависимость указывает на ускорение процессов генерации в сильных электрических полях при обратном смещении.

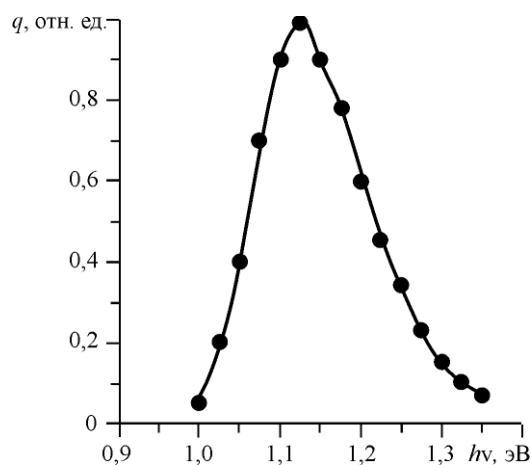


Рис.1. Форм-функция оптического перехода ловушки EL2, рассчитанная на основании данных фотоемкостных измерений

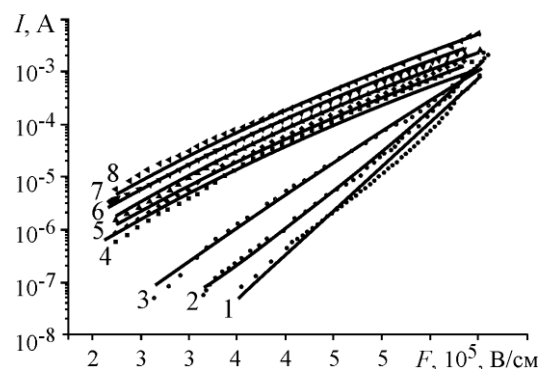


Рис.2. Экспериментальные обратные ВАХ p-n-переходов на основе GaAs (точки) и модельные кривые (сплошные линии) при разных температурах, К: 1 – 88; 2 – 170; 3 – 230; 4 – 295; 5 – 303; 6 – 313; 7 – 323; 8 – 333

Обсуждение полученных результатов. При обратном напряжении ОПЗ прибора обеднена свободными носителями заряда, равновесие между рекомбинацией и генерацией сдвинуто в сторону генерации. Обратный ток определяется выражением

$$I_{\text{обр}} = qs \int_0^{F_{\text{max}}} dF \int_0^W R dx,$$

где s – площадь p-n-перехода; F – напряженность электрического поля; R – скорость рекомбинации.

Следует отметить, что скорость термической эмиссии зависит от температуры экспоненциально. Поэтому, если уровень рекомбинационного центра отличается от середины запрещенной зоны на $3-5 kT$, то, как правило, либо скорость эмиссии электронов, либо дырок намного больше, чем скорость противоположного перехода. Это условие применимо для ловушек типа EL2, имеющих рекомбинационные центры вблизи середины зоны GaAs. Энергетически уровень расположен ближе к зоне проводимости, откуда он и отсчитывается. Будем считать, что данные центры равномерно распределены по ОПЗ прибора. В этом случае для обратного тока диода применимо простое выражение [2]:

$$I_{\text{обр}} = qsWN_t e_p^t, \quad (2)$$

где W – ширина ОПЗ; N_t – концентрация рекомбинационных центров; e_p^t – скорость термической эмиссии дырок из валентной зоны на уровень ловушки EL2.

Обратный ток определяется самым медленным процессом, а именно скоростью эмиссии с большей энергией активации, которая в случае EL2 связана с эмиссией дырок, так как уровень ловушки расположен ближе к зоне проводимости, чем к валентной зоне.

Увеличение напряжения обратного смещения на $p-n$ -переходе приводит к росту напряженности электрического поля ОПЗ. При этом скорость термической эмиссии также растет с ростом поля. Полевую зависимость скорости термической эмиссии можно вычислить с использованием выражения для вероятности электронно-колебательного перехода, полученного в работах [17, 18].

Для дальнейших вычислений использовалась форм-функция (см. рис.1), измеренная при ориентации пластины [111] и минимальной напряженности электрического поля $5 \cdot 10^4$ В/см. Для расчетов необходимо знать выражение для форм-функции при температурах проведения эксперимента. Для того чтобы их вычислить, в первую очередь определялись параметры электрон-фононного взаимодействия. Для этого численно рассчитаны первые моменты экспериментальной форм-функции, приведенной на рис. 1:

$$M_n = \int v^n q(v) dv, \quad (3)$$

$$M_1 = E_t - S\hbar\omega, \quad (4)$$

где v – частота падающего света; E_t – энергия чисто электронного перехода; S – фактор Хуанга–Риса, показывающий число фононов, испускаемых при тепловыделении; $\hbar\omega$ – энергия фонона, участвующего в электронно-колебательных переходах.

Центральные моменты распределения вычисляются посредством моментов (3). Они связаны с параметрами электрон-фононного взаимодействия центра рекомбинации [2]:

$$\langle M_2 \rangle = M_2 - M_1^2 / M_0 = 4\pi^2 S(\hbar\omega)^2 \text{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right), \quad (5)$$

$$\langle M_3 \rangle = M_3 - 3M_1M_2 / M_0 + 2M_1^3 / M_0^2 = -8\pi^3 S(\hbar\omega)^3. \quad (6)$$

Расчет по формулам (3)–(6) позволил вычислить параметры электрон-фононного взаимодействия ловушки EL2 при температуре 86 К, при которой проводились фотокостные эксперименты: $E_t = 1,04$ эВ; $S = 3$; $\hbar\omega = 0,03$ эВ.

Для вычисления вероятности термополевого перехода при различных температурах, отличных от 86 К, можно построить форм-функцию по ее моментам для каждой необходимой температуры. В случае распределения, которое близко к нормальному, достаточно иметь несколько первых моментов и воспользоваться формулой Эджворта [2]. Эта формула позволяет численно вычислить форм-функцию на основе гауссовой кривой и ее производных, которые табулированы:

$$f(\varepsilon) = M_0 \sigma^{-1} \left[\varphi(\xi) - \frac{\gamma_1}{3} \varphi^{(3)}(\xi) + \frac{\gamma_2}{4} \varphi^{(4)}(\xi) + \frac{10\gamma_1}{6} \varphi^{(6)}(\xi) + \dots \right],$$

где $\xi = (\varepsilon - E_t) / \sigma$; $\sigma^2 = 4\pi^2 S(\hbar\omega)^2 \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)$; $\varphi(\xi) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\xi^2/2)$;

$$\gamma_1 = \langle M_3 \rangle \sqrt{M_0} / \langle M_2 \rangle^{3/2}; \quad \gamma_2 = \langle M_4 \rangle M_0 / \langle M_2 \rangle^2 - 3.$$

Первый член формулы дает гауссову кривую. Второй член придает $q(\varepsilon)$ некоторую асимметрию, третий и четвертый члены уточняют $q(\varepsilon)$ около максимума и на крыльях.

Вероятность чисто электронного перехода можно вычислить по формуле [6]:

$$W_0(E_t - \varepsilon) = A \frac{eF}{2\sqrt{2m^*(E_t - \varepsilon)}} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m^*(E_t - \varepsilon)}^3}{3e\hbar F}\right),$$

где A – нормировочный множитель; m^* – эффективная масса; E_t – энергия чисто электронного перехода.

Обратный ток вычислялся по формулам (1) и (2). Ширина ОПЗ и напряженность электрического поля в ОПЗ определялись на основании измерений вольт-фарадных характеристик (см. рис. 2, сплошные линии). Согласие расчетов и эксперимента подтверждает адекватность использованной модели.

Заключение. Очевидно, что электрон-фононное взаимодействие оказывает определяющее влияние на величину обратных токов p - n -переходов. Это влияние необходимо учитывать в большинстве других случаев. Особенно это важно делать, когда центры рекомбинации имеют квазимолекулярную природу, как, например, исследованные комплексы вакансии галлия с серой, теллуrom и оловом [17–21]. Ловушка EL2 в арсениде галлия также может быть отнесена к подобным центрам. В таких центрах рекомбинации могут проявляться сильные локальные или квазилокальные колебания, которые приводят к усилению электрон-фононного взаимодействия.

Для интерпретации обратных токов таких структур необходимо уметь находить параметры этого взаимодействия и вычислять вероятность безызлучательного перехода. На основании общего выражения для вероятности электронно-колебательного перехода и параметров электрон-фононного взаимодействия вычислены полевые зависимости обратного тока. Отметим, что параметры электрон-фононного взаимодействия можно получить различными способами, некоторые из которых приведены в работах [17–21].

Литература

1. Lutz J., Schlangenotto H., Scheuermann U., Doncker R. Semiconductor power devices. – Heidelberg–Dordrecht–London–New York: Springer, 2011. – 536 p.
2. Булярский С.В., Грушко Н.С. Генерационно-рекомбинационные процессы в активных элементах. – М.: МГУ, 1997. – 462 с.

3. *Sah Chih-Thing, Noyce R.N., Shockley W.* Carrier generation and recombination in p-n junctions and p-n junction characteristics // Proc. IRE. – 1957. – Vol. 45. – N 9. – P. 1228–1243.
4. *Пекар С.И.* О влиянии деформации решеток электронами на оптические и электрические свойства кристаллов // УФН. – 1953. – Т. 50. – С. 197.
5. *Пекар С.И.* Исследования по электронной теории кристаллов. – М.: Гостехиздат, 1951. – 257 с.
6. *Давыдов А.С.* Теория безызлучательных переходов в молекулах, находящихся в растворе // ЖЭТФ. – 1953. – Т. 24. – С. 397–408.
7. *Кривоглаз М.А.* Теория тепловых переходов // ЖЭТФ. – 1954. – Т. 25. – С. 191–207.
8. *Тимашов С.Ф.* О термической ионизации глубоких центров в слое объемного заряда в полупроводниках // ФТТ. – 1972. – Т. 14. – С. 171.
9. *Тимашов С.Ф.* Об эффекте Френкеля при термополевой ионизации глубоких центров в слое объемного заряда в полупроводниках // ФТТ. – 1974. – Т. 16. – С. 804.
10. *Далидчик Ф.И.* Многофононные туннельные процессы в однородном электрическом поле // ЖЭТФ. – 1978. – Т. 74. – Вып. 2. – С. 472.
11. *Passler R.* Temperature dependences of the nonradiative multiphonon carrier-capture and injection properties of deep trap in semiconductors // Phys. Stat. Sol. – 1978. – Vol. 85. – P. 203.
12. *Makram-Ebeid S.* Effect of electric field on deep-level transients in GaAs and GaP // Appl. Phys. Lett. – 1980. – Vol. 37. – N. 5. – P. 464.
13. *Makram-Ebeid S., Lannoo M.* Quantum model for phonon assisted tunnel ionization of deep levels in semiconductors // Phys. Rev. – 1982. – Vol. 25. – N. 10. – P. 6406.
14. *Makram-Ebeid S., Lannoo M.* Electric-field-induced phonon-assisted tunnel ionization from deep levels in semiconductors // Phys. Rev. Lett. – 1982. – Vol. 48. – N. 18. – P. 1281.
15. *Абакумов В.Н., Меркулов И.А., Перель В.И., Ясиевич И.Н.* К теории многофононного захвата электрона на глубокий центр // ЖЭТФ. – 1985. – Вып. 4. – С. 1472–1485.
16. *Карнус В., Перель В.И.* Многофононная ионизация глубоких центров в полупроводниках в электрическом поле // ЖЭТФ. – 1986. – Т. 91. – С. 2319.
17. Частотная дисперсия крутизны в полевых транзисторах на основе δ -легированных структур / *В.А. Гергель, Э.А. Ильичев, А.В. Тарнавский и др.* // Физика и техника полупроводников. – 1991. – Т. 25. – Вып. 11. – С. 1870–1876.
18. *Булярский С.В., Грушко Н.С., Жуков А.В.* Расчет полевой зависимости скорости эмиссии носителей заряда с глубоких центров с помощью экспериментальной форм-функции оптического перехода // ЖЭТФ. – 1999. – Т. 89. – № 3. – С. 876–882.
19. *Булярский С.В., Грушко Н.С., Жуков А.В.* Вычисление вероятности оптического перехода в сильных электрических полях // ЖЭТФ. – 2000. – Т. 118. – № 5. – С. 1092–1228.
20. *Булярский С.В., Грушко Н.С., Жуков А.В.* Полевая зависимость скорости термической эмиссии дырок с комплекса $V_{\text{Ga}}S_{\text{As}}$ в арсениде галлия // ФТП. – 2000. – Т. 34. – Вып. 1. – С. 41.
21. *Булярский С.В., Жуков А.В.* Анализ механизмов переноса тока, определяющих характер обратных вольт-амперных характеристик барьеров металл – GaAs // ФТП. – 2001. – Т. 35. – Вып. 5. – С. 560.

Статья поступила
после доработки 9 октября 2015 г.

Жуков Андрей Викторович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Ульяновского государственного университета. *Область научных интересов:* физика полупроводников и полупроводниковых приборов, диагностика их качества и прогнозирование надежности. **E-mail: ZhukovAndreyV@mail.ru**