ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 4, № 2 (2000) с. 208–215

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 4, No. 2 (2000) p. 208–215

ДЕЯКІ ОСОБЛИВОСТІ РЕКОНСТРУКЦІЇ РОЗПОДІЛІВ ГЛИБОКИХ СТАНІВ МЕТОДОМ ІНЖЕКЦІЙНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ

А. С. Опанасюк, І. Ю. Проценко, Н. В. Тиркусова

Сумський державний університет,

вул. Римського–Корсакова, 2, Суми, 40007, Україна

(Отримано 18 березня 1999 р.; в остаточному вигляді — 14 лютого 2000 р.)

У праці розглянуто метод інжекційної спектроскопії глибоких станів у напівізоляторних матеріялах, який дозволяє одержувати інформацію про параметри глибоких пасток безпосередньо з вольт–амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом. Запропонована модифікація методу, що базується на розв'язанні рівняння Фредгольма 1–го роду, яка може бути застосована при кімнатних температурах. Методом комп'ютерного моделювання з'ясовано вплив температури та деяких інших параметрів на коректність результатів, які одержані при реконструкції розподілів глибоких станів. Визначена роздільна здатність методу за енерґіями. Результати розрахунків свідчать про високу інформативність та коректність методу.

Ключові слова: вольт–амперні характеристики, обмежені просторовим зарядом струми, інжекційна спектроскопія, комп'ютерне моделювання.

PACS number(s): 84.37.+g, 87.64.Lg, 07.05.Tp

I. ВСТУП

Дослідження локалізованих станів у напівпровідниках та їх ідентифікація є актуальною науковою задачею, оскільки глибокі центри зумовлюють такі важливі характеристики матеріялу, як час життя носіїв заряду, їхню довжину вільного пробігу та інше. Для визначення параметрів глибоких пасток на сьогодні запропоновано досить багато різних методів [1,2], але більшість із них не можуть бути застосовані до напівізоляторних матеріялів. Однією з найбільш прийнятних у цьому випадку є методика, що базується на вивченні вольт–амперних характеристик (ВАХ) у режимі струмів, обмежених просторовим зарядом (СОПЗ). Серед інших цю методику виділяє простота експериментального обладнання, необхідного для її практичної реалізації, та можливість застосування до широкого кола різноманітних матеріялів. Фактично можливість дослідження глибоких пасток цим методом обмежується лише необхідністю створення інжектного контакту до напівпровідника або діелектрика. Але ця проблема здебільшого може бути вирішена шляхом добору металу з відповідною роботою виходу електронів ($\Phi_m < \Phi_s$ у випадку n–типу провідности або $\Phi_m > \Phi_s$ — p–типу, де Φ_m, Φ_s — робота виходу металу та напівпровідника відповідно), шляхом створення сильнолеґованої області (n^+, p^+) поблизу контакту або іншими методами (наприклад, фотозбудженням носіїв струму) [3].

У фундаментальних працях [3,4] з вивчення СОПЗ у високоомних матеріялах з дефектами було продемонстровано, що концентрація локалізованих станів (N_t) та їхнє енерґетичне положення (E_t) у забороненій зоні (ЗЗ) матеріялу можуть бути отримані з аналізу нелінійностей ВАХ. При цьому у своїй класичній формі метод розрахунку параметрів пасток з ВАХ СОПЗ базується на порівнянні експериментальних кривих із теоретично розрахованими для типових розподілів глибоких центрів: моноенерґетичного, ґауссового, експоненціяльного та інших [5–9]. Такий спосіб одержання інформації про локалізовані стани є типовим прикладом розв'язання прямої задачі і має суттєві недоліки, пов'язані з апріорним заданням моделі розподілу пасток та інтеґральним характером співвідношень, які використовують для аналізу. Усе це призводить до суттєвого зменшення інформативности методу та деякої некоректности одержаних за його допомогою результатів.

Принципово інший підхід запропоновано у працях [10–12]. Автори розвивають метод, який одержав назву методу інжекційної спектроскопії глибоких пасток. Цей метод дозволяє одержувати інформацію про параметри локалізованих станів безпосередньо з експериментальних ВАХ шляхом їх диференційної обробки (зворотна задача). Незважаючи на те, що у [13–15] була продемонстрована висока чутливість й ефективність методу інжекційної спектроскопії при дослідженні глибоких пасток у неорганічних та аморфних матеріялах, він залишається маловідомим і широко не використовується на практиці, очевидно, у зв'язку з тим, що потребує досить складної процедури обробки експериментальних даних. У небагатьох працях [13], [16–19], де застосовувався цей метод, як правило, використовували його низькотемпературне наближення, хоча більшість експериментальних досліджень проводиться при температурах, близьких до кімнатної. На сьогодні залишається остаточно нерозв'язаним питання адекватности реконструкції форми розподілів пасток та коректности визначення їхніх параметрів (концентрації та енерґетичного положення) цим методом, особливо, у випадку вузьких розподілів, характерних для моно– та полікристалічних матеріялів.

II. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ МЕТОДУ

Фундаментальні співвідношення, які пов'язують величини, що можуть бути виміряні експериментально (U, j), та ті, що визначають зарядоперенос у зразках у присутності пасток (n_f, ρ), можуть бути одержані шляхом спільного розв'язання рівнянь неперервности струму та Пуассона і матимуть вигляд [10]:

$$\frac{1}{j} = \frac{1}{e\mu L}\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e}\int_{n_{f_c}}^{n_{f_L}} \frac{dn_f(x)}{n_f^2(x)\rho(x)} \equiv Y, \tag{1}$$

$$\frac{U}{j^2} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e(e\mu)^2}\int_{n_{f_c}}^{n_{f_L}} \frac{dn_f(x)}{n_f^3(x)\rho(x)} \equiv Z, \tag{2}$$

де j — густина струму, що протікає через зразок; U — зовнішня напруга; L — товщина зразка; μ — рухливість носіїв заряду; ε — діелектрична проникливість матеріялу; ε_0 — діелектрична стала; e — заряд електрона; $n_f(x)$ — концентрація вільних носіїв при інжекції, яка залежить від координати; n_{f_0} — концентрація носіїв на катоді ($x = 0$); n_{f_L} — концентрація носіїв на аноді ($x = L$).

Густина об'ємного заряду в матеріялі (на аноді), яка відповідає за обмеження наскрізного струму через зразок, визначається співвідношенням:

$$\rho(x) = e\left[(n_f(x) - n_0) + \sum_{j=1}^{n}(n_{t_j}(x) - n_{t_{j_0}})\right],$$

де n_0 — рівноважна концентрація носіїв заряду; n_{t_j} — фактична концентрація носіїв, що захоплені у пастки j–групою рівнів; $n_{t_{j_0}}$ — рівноважна концентрація носіїв, що захоплені у пастки j–групою рівнів.

Рівняння (1) та (2) визначають ВАХ СОПЗ зразка у параметричному вигляді для довільних розподілів локалізованих станів у ЗЗ напівпровідника і можуть бути використані для розрахунку теоретичних кривих, якщо відома концентрація і глибина залягання центрів захоплення. Параметром інтеґрування при цьому є концентрація носіїв заряду на аноді, тоді як концентрація зарядів на катоді у випадку необмеженої інжекції вважається нескінченною ($n_{f_L} \to \infty$).

У подальшому для визначености будемо вважати, що у зразок здійснюється інжекція електронів, а пастки розподілені за товщиною зразка рівномірно.

Узявши першу і другу похідні від Z за Y, легко знайти співвідношення, які придатні для одержання інформації про спектр пасток безпосередньо з експериментальних ВАХ:

$$Z' = \frac{dZ}{dY} = \frac{d(U/j^2)}{d(1/j)} = \frac{L}{e\mu n_{f_L}}, \tag{3}$$

$$Z'' = \frac{d^2Z}{dY^2} = \frac{d}{d(1/j)}\frac{d(U/j^2)}{d(1/j)} = \frac{\rho_L L^2}{\varepsilon\varepsilon_0}. \tag{4}$$

Оскільки ВАХ СОПЗ прийнято наводити в подвійних логарифмічних координатах із використанням похідної $\alpha = d(\ln j)/d(\ln U)$, остаточно одержимо:

$$n_{f_L} = \frac{1}{k_1}\frac{jL}{e\mu U}, \tag{5}$$

$$\frac{\rho_L}{e} = k_1 k_2 \frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2}, \tag{6}$$

де параметри k_1 і k_2, що враховують відхилення напруженості електричного поля та концентрації локалізованих носіїв на аноді від їхніх середніх значень у міжелектродному проміжку, дорівнюють [12]:

$$k_1 = \frac{2\alpha - 1}{\alpha}, \tag{7}$$

$$k_2 = \frac{\alpha - 1}{\alpha}(1 + B), \tag{8}$$

а змінна B залежить від другої похідної $j(U)$ і має вигляд

$$B = -\left[\frac{d\alpha}{d(\ln U)}\right]/\alpha(2\alpha - 1)(\alpha - 1). \tag{9}$$

У низькотемпературному наближенні, коли функцію Фермі–Дірака можна замінити на функцію Гевісайда, з використанням рівнянь (5) та (6) легко одержати робоче співвідношення, яке дозволяє розрахувати функцію розподілу щільности локалізованих станів за енерґіями [12] :

$$h(E) \approx \frac{1}{e}\frac{d\rho}{dE_F} = \frac{1}{kT}\frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2}\frac{2\alpha - 1}{\alpha^2}(1 + C), \tag{10}$$

де $C = (2 - 3\alpha)B + d[\ln(1 + B)]/d(\ln U)$; $h(E) = dN_t/dE$ — функція, яка описує просторовий та енерґетичний розподіл пасток (у подальшому приймається, що зразок є просторово однорідним, тобто $h = h(x)$).

Енерґетичний масштаб може бути визначений за допомогою співвідношення:

$$E_F = kT\ln\frac{L}{N_c e\mu} + kT\ln\frac{j}{U}\frac{\alpha}{2\alpha - 1}, \tag{11}$$

де N_c — ефективна щільність вільних станів у зоні провідности.

У фізичному плані можливість одержання інформації про параметри розподілів пасток з ВАХ СОПЗ ґрунтується ось на чому. При зміні напруги, що прикладається до зразка, унаслідок інжекції носіїв заряду квазірівень Фермі починає рухатись поміж розподіленими у ЗЗ матеріялу локалізованими станами в напрямку краю зони провідности. Таке зміщення приводить до заповнення пасток носіями заряду і, як наслідок, зміни провідности структури. Оскільки напруга й густина струму пов'язані з концентрацією пасток та положенням квазірівня Фермі, виникає можливість сканування енерґетичних розподілів глибоких станів.

При довільних температурах задача реконструкції розподілів локалізованих центрів зводиться до знаходження функції $h(E)$ із згортки:

$$n_s = \int_E n_s(E)dE = \int_E h(E)f(E-E_F)dE, \qquad (12)$$

де n_s — повна концентрація носіїв заряду в матеріялі, $f(E-E_F)$ — функція Фермі–Дірака.

З цією метою у працях [12], [14] запропоновано концепцію так званого домінуючого рівня, тобто рівня, який переважає у статистиці захоплення зарядоносіїв пастками. Положення домінуючого рівня визначаємо співвідношенням [14] :

$$E_d^* = -\frac{d(ln\theta^*)}{d(1/kT)} = E_a - \frac{d(ln\mu)}{d(1/kT)} - \frac{2\alpha-3}{\alpha(2\alpha-1)}\frac{dE_a}{dlnU} + \frac{1}{1+C}\frac{dC}{d(1/kT)} \qquad (13)$$

де $\theta^* = \frac{dn_f/dE_F}{dn_s/dE_F}$; $E_a = \frac{d(lnj)}{d(1/kT)}$ — енерґія активації СОПЗ.

Остання величина може бути знайдена експериментально шляхом зміни температури під час вимірювання ВАХ. Тоді при помірних температурах і за наявности в досліджуваному матеріялі розподілів пасток, які описуються функціями, що змінюються досить повільно, співвідношення (12) можна записати у вигляді:

$$h(E_d^*) = \frac{dn_s}{dE_f}\left(\frac{1}{1+\exp[(E_d^*-E_f)/kT]}\right)^{-1}. \qquad (14)$$

Уведення домінуючої енерґії E_d^* дозволило авторам також відмовитись від використання виразу (11) при визначенні енерґетичного масштабу під час реконструкції розподілів глибоких пасток і одержати незалежний метод розрахунку цієї величини.

Коректність методу інжекційної спектроскопії частково була перевірена у працях [13–17] як шляхом комп'ютерного моделювання, так і експериментально. Одержані результати свідчать про добру збіжність параметрів реконструйованих розподілів з реальними параметрами глибоких центрів у досліджених матеріялах. Але апробація методу була проведена для випадку молекулярних та аморфних матеріялів, концентрація глибоких пасток у яких значно вища (на 2–4 порядки), ніж у традиційних напівпровідниках (Si, GaAs, CdTe та інших). Водночас, для аморфних матеріялів характерна присутність у ЗЗ широких розмитих розподілів пасток. Тому автори [12] використовували для моделювання саме такі розподіли. Таким чином, на сьогодні залишається остаточно нез'ясованою можливість використання методу інжекційної спектроскопії для дослідження глибоких пасток у моно– та полікристалічних матеріялах типових напівпровідників, не визначені остаточно роздільна здатність, межі застосування та обмеження методу. Аналіз літератури свідчить, що необхідна додаткова перевірка коректности та достовірности результатів, одержаних цим методом, та дослідження впливу ряду експериментальних чинників, зокрема температури вимірювання, фактора спінового виродження та інших на точність визначення параметрів глибоких центрів. Необхідність розв'язання цих проблем і визначила мету статті.

III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Для дослідження впливу температури та інших чинників на достовірність реконструкції розподілів пасток із ВАХ СОПЗ методом інжекційної спектроскопії ми використовували процедуру комп'ютерного моделювання, яка включала розв'язання спочатку прямої, а потім зворотної задачі.

При моделюванні були взяті значення параметрів глибоких станів і фізичних констант матеріялу, які характерні для напівпровідників типу Si, GaAs, CdTe [20]. Відлік енерґії залягання пасток проводили від краю зони провідности.

При розв'язанні прямої задачі ми за відомим розподілом глибоких центрів у ЗЗ матеріялу розраховували теоретичні ВАХ СОПЗ.

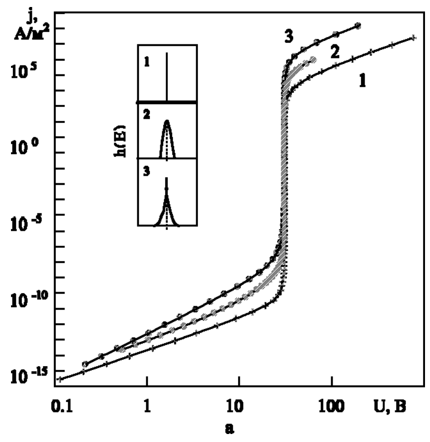
На першому етапі при припущенні, що глибокі стани є моноенерґетичними, описуються ґауссовим розподілом або функцією іншого вигляду (вхідний розподіл, див. вставки на рис. 1), були одержані залежності ρ — E_F та $(1/e)d\rho/dE_F - E_F$. При розрахунках цих величин ми виходили з таких міркувань.

Інжекція електронів у зразок приводить до виникнення просторового заряду. При цьому, якщо зразок знаходиться в термодинамічній рівновазі, носії заряду розподіляються між вільними та зв'язаними станами. Концентрація електронів з енерґією E визначається статистикою Фермі–Дірака:

$$n_s(E) = n_f(E) + n_t(E) = h(E)f(E-E_F), \qquad (15)$$

де $f(E-E_F) = 1/[1+g\exp((E-E_F)/kT)]$; g — фактор спінового виродження, який, залежно від зарядового стану пасток, набуває значення 1/2, 1 або 2.

Повна концентрація носіїв, а отже, і величина просторового заряду для деякого довільного положення квазірівня Фермі, задається згорткою (12). Із цього співвідношення диференціюванням легко знайти вираз, який описує збільшення концентрації електронів у матеріялі при зміні положення квазірівня Фермі.



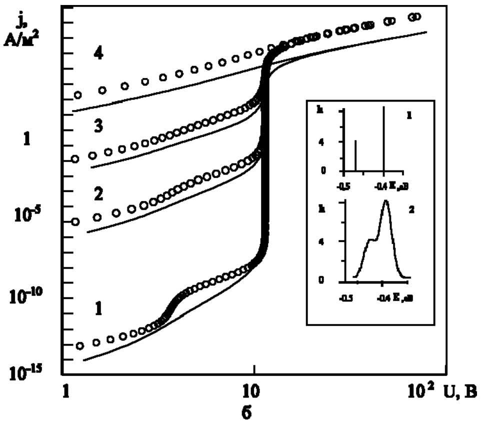


Рис. 1. ВАХ розраховані для різних типів розподілу локалізованих станів, які наведені на вставках. Один рівень з параметрами $E_t = 0.57$ еВ, $N_t = 10^{20}$ м$^{-3}$: монорівень (1); ґауссовий розподіл $h(E) = N_t/\sigma(2\pi)^{1/2}\exp[-(E - E_t)^2/2\sigma^2]$, де $\sigma = 0.025$ еВ, $j * 10$ (2); подвійний експоненціяльний розподіл $h(E) = N_t/(2kT_c)\exp[-|E - E_t|/(kT_c)]$, де $kT_c = 0.025$ еВ, $j * 100$ (3). $T = 150$ К. (а) Два рівні з параметрами $E_{t_1} = 0.40$ еВ, $N_{t_1} = 1.2 \cdot 10^{19}$ м$^{-3}$, $E_{t_2} = 0.47$ еВ, $N_{t_2} = 2.5 \cdot 10^{19}$м$^{-3}$. Розрахунок для випадку монорівнів ($\circ, j * 10$) та ґауссових розподілів з $\sigma = 0.025$ еВ (суцільна лінія). $T = 100$ К (1), 150 К (2), 200 К (3) та 300 К (4). (б)

На рис. 2 як приклад наведені результати розрахунків функцій ρ — E_F та $(1/e)d\rho/dE_F - E_F$ для випадку монорівня (а) та розподілів, що описуються функцією Ґаусса (б) або подвійною експонентою (в). Вхідні розподіли $h(E)$ зображені суцільними лініями, тоді як розрахункові залежності ρ — E_F та $(1/e)d\rho/dE_F - E_F$ при різних температурах — штриховими та штрихпунктирними. Обчислювання проведено як для випадку $g = 1$ (а, б), так і для $g = 2$ (в).

З рисунка видно, що залежності $(1/e)d\rho/dE_F$ від E_F мають вигляд розмитих кривих із максимумами, форма яких не залежить від E_t та N_t. Водночас на залежностях ρ — E_F спостерігається вихід на насичення, коли квазірівень Фермі перетинає максимум розподілу пасток.

На другому етапі з використанням інтеґральних рівнянь (1), (2) були розраховані теоретичні ВАХ при різних параметрах модельних розподілів та температурах (рис. 1). Для поліпшення сприйняття інформації густина струму на ВАХ у випадку ґауссового та подвійного експоненційного розподілів помножена на 10 та 100 відповідно. Слід відзначити, що теоретичні залежності струм–напруга, які наведені на рис. 1а, подібні. Це зумовлено тим, що розрахунки проводили для досить вузьких розподілів. При збільшенні розмитости розподілів ВАХ набувають вигляду, наведеного у [3,4].

Обчислювання ВАХ для випадку монорівня проводили також із використанням точного параметричного методу та методу реґіональних наближень [4]. Установлено, що криві, розраховані з використанням параметричного та інтеґрального методів, збігаються, тоді як метод реґіональних наближень, який найчастіше використовується з такою метою, дає значні похибки. Це свідчить про коректність розрахунку кривих струм — напруга з використанням співвідношень (1), (2).

Для розв'язання зворотної задачі ВАХ СОПЗ були оброблені за допомогою диференційної методики. При цьому використано як її низькотемпературне наближення (співвідношення (10), (11)), так і модифікацію, запропоновану у працях [12,14,21]. У результаті знову був реконструйований розподіл пасток в матеріялі (вихідний розподіл). При цьому для знаходження похідних у кожній точці ВАХ вони апроксимувались згладжувальним сплайном [22].

Результати порівняння вхідного та вихідного розподілів пасток, розрахованих з використанням низькотемпературного наближення, для випадку декількох типових моделей глибоких станів наведені на рис. 2. Як видно з рисунка, при низьких температурах вимірювання параметри вихідних розподілів досить добре збігаються з параметрами вхідних. При цьому дискретні енерґетичні рівні відтворюються як дифузні криві з шириною, що залежить від температури (рис. 2а), тоді як інші розподіли реконструюються з деяким розширенням (рис. 2б,в). Значення функцій у максимумах теж залежить від температури і при її підвищенні зменшується, водночас площа під кривими залишається незмінною.

Використання співвідношень низькотемпературного наближення призводить до викривлення форми реконструйованих розподілів порівняно з формою вхідних розподілів, особливо при підвищених (близьких до кімнатної) температурах (рис. 2). При цьому, якщо при розрахунках брали фактор виродження одиницю, максимуми вхідних та вихідних розподілів збігались, при $g = 2$ відбувався зсув положення максимуму реконструйованого розподілу щодо вхідного. Розглянемо причини, які призводять до похибок при відтворенні профілю розподілів пасток.

У низькотемпературному наближенні, як було відзначено раніше, функцію Фермі–Дірака у (12) можна замінити на функцію Гевісайда. Тоді, оскільки у режимі СОПЗ концентрація інжектованих носіїв n_i

значно перевищує рівноважну, але водночас суттєво менша від концентрації пасток, одержимо співвідношення для розрахунку щільности глибоких станів:

$$\frac{1}{e}\frac{d\rho}{dE_F} = \frac{dn_i}{dE_F} \approx \frac{dn_t}{dE_F} = h(E). \quad (16)$$

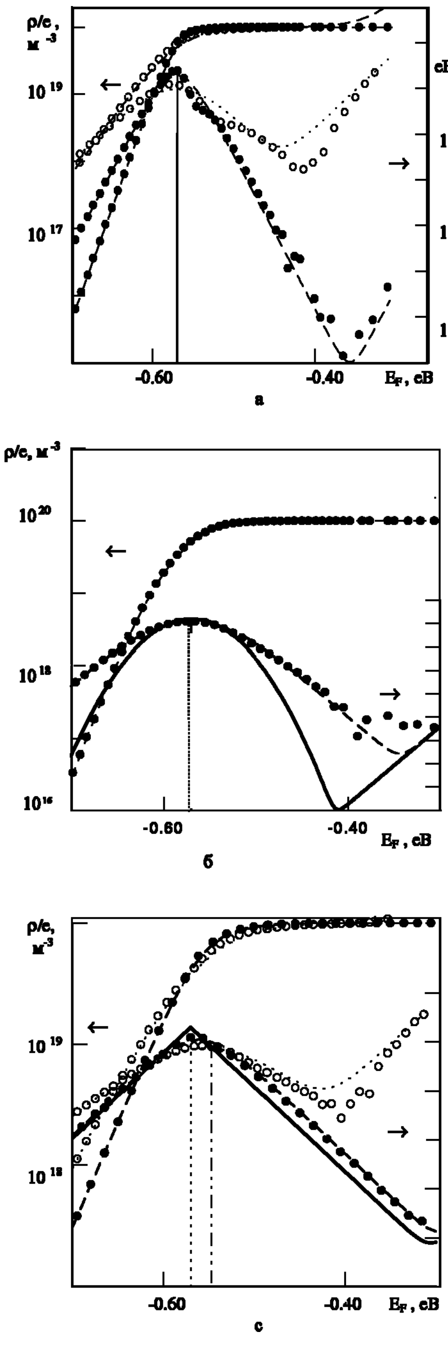


Рис. 2. Густина об'ємного заряду та розподіл локалізованих станів у ЗЗ матеріялу для випадку $E_t = 0.57$ еВ, $N_t = 10^{20}$ м$^{-3}$, $N_c = 1.79 \cdot 10^{25}$ м$^{-3}$: монорівень $g = 1$ (а); ґауссовий розподіл $\sigma = 0.025$ еВ, $g = 1$ (б); подвійний експоненціяльний розподіл, $kT_c = 0.025$ еВ, $g = 2$ (в). Вхідні розподіли $h(E)$ — суцільні лінії, розраховані залежності $\frac{1}{e}\frac{d\rho}{dE_F}$ — штрихові та штрихпунктирні лінії, вихідні розподіли — $T = 150$ K (•), $T = 300$ K (∘).

Реально при використанні виразу (10) відтворюється розподіл носіїв заряду, локалізованих на глибоких центрах, який, як видно з (12), при довільній температурі відрізняється від розподілу пасток. Проаналізуймо цю відмінність.

Нехай у ЗЗ матеріялу знаходиться моноенерґетичний рівень пасток, тоді

$$h(E) = N_t \delta(E - E_F), \quad (17)$$

де δ — дельта–функція.

При підстановці виразу (17) у співвідношення (13) одержимо:

$$\frac{dn_t}{dE_F} = \frac{gN_t \exp(\frac{E_t - E_F}{kT})}{kT(1 + g\exp\frac{E_t - E_F}{kT})^2}. \quad (18)$$

Із рівняння видно, що дискретні рівні повинні відтворюватись як вузькі розподіли у формі дифузних кривих з півшириною, що визначається температурою

$$E_{1/2} = kT \ln\frac{3 + \sqrt{8}}{3 - \sqrt{8}} = 3.5kT. \quad (19)$$

Очевидно, що з підвищенням температури вимірювання похибка при реконструюванні форми моноенерґетичного рівня збільшується. Цей висновок підтверджується результатами комп'ютерного моделювання, що наведені на рис. 2а.

Коли у ЗЗ матеріялу присутні локалізовані стани, які розподілені за енерґією рівномірно $h(E) = AN_t =$ const, легко одержати, що $n_t = h(E)$. Таким чином, видно, що подібні розподіли цим методом реконструюються точно. Похибка, яка виникає при відтворенні довільного розподілу пасток, знаходиться між цими двома граничними випадками і не перевищує $2kT$. Результати моделювання для глибоких рівнів, що мають ґауссовий розподіл або описуються експонентою, підтверджують цей висновок.

Розгляньмо вплив параметра g у випадку монорівня на положення кривої $(1/e)d\rho/dE_F$ – E_F. Легко показати, що похідна dn_t/dE_F у співвідношенні (18) має максимум при $E_{F_{max}} = E_t + kT\ln g$, а значення функції у максимумі дорівнює $(dn_t/dE_F)_{E_{F\,max}} = N_t/(4kT)$. Таким чином, оскільки параметр g, як правило, невідомий, диференційний метод дозволяє визначити енерґію залягання моноенерґетичних рівнів з точністю $\sim kT\ln 2$ (для матеріялів з двократно виродженою зоною провідности $\sim kT\ln 4$). Аналогічний висновок можна зробити для інших модельних розподілів пасток. Відзначимо, що похибка знаходження енерґетичного положення рівня залежить від температури вимірювання.

Оскільки, як свідчать результати моделювання, низькотемпературне наближення не дозволяє одержати точну форму та параметри розподілів пасток при кімнатних температурах, для розв'язання цієї задачі ми використовували також наближення, запропоноване в [12,14]. Приклади розрахунків домінуючої енерґії, яка необхідна для реалізації цієї методики, наведені на рис. 3. Обчислення E_d^* проведено таким чином. Для вибраної модельної функції $h(E)$ розраховували ВАХ СОПЗ при різних температурах поблизу заданої T, потім з використанням співвідношення (13) визначали енерґію активації E_a, а отже, і E_d^*. Для моделювання ми вибрали розподіли пасток, які описуються функцією Ґаусса з різною дисперсією σ. Глибина залягання пасток та їх концентрація наведені у підписах під рисунками. Як видно з рис. 3а, у випадку розмитих розподілів пасток ($\sigma \geq 0.1$ еВ) домінуючий рівень енерґії, як і стверджують автори [12], дійсно збігається з енерґією Фермі у досить широкому інтервалі значень E. При зменшенні півширини енерґетичних розподілів та підвищенні температури інтервал відповідности положення рівня E_d^* положенню енерґії квазірівня Фермі суттєво зменшується (рис. 3б), що свідчить про обмеженість підходу, запропонованого в [12].

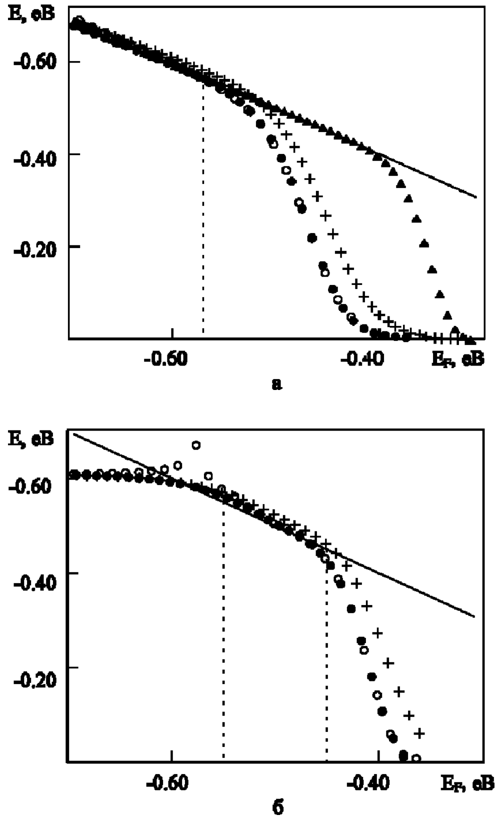


Рис. 3. Залежність положення енерґії активації E_a (+) та домінуючого рівня E_d^* ($\bullet - T = 300$ К; $\blacktriangleleft$ — $T = 150$ К)) від положення рівня Фермі E_F для різних розподілів локалізованих станів, $E_F^{'}(\circ)$ — положення рівня Фермі, розраховане з використанням методу [12] ($T = 300$ К): ґауссовий розподіл з параметрами $E_t = 0.57$ еВ, $N_t = 10^{20}$ м$^{-3}$, $g = 1$, $\sigma = 0.1$ еВ (а); два ґауссових розподіли з параметрами $\sigma = 0.025$ еВ, $g = 1$, $E_{t_1} = 0.55$ еВ, $N_{t_1} = 2 \cdot 10^{20}$ м$^{-3}$, $E_{t_2} = 0.45$ еВ, $N_{t_2} = 2.5 \cdot 10^{20}$ м$^{-3}$ (б).

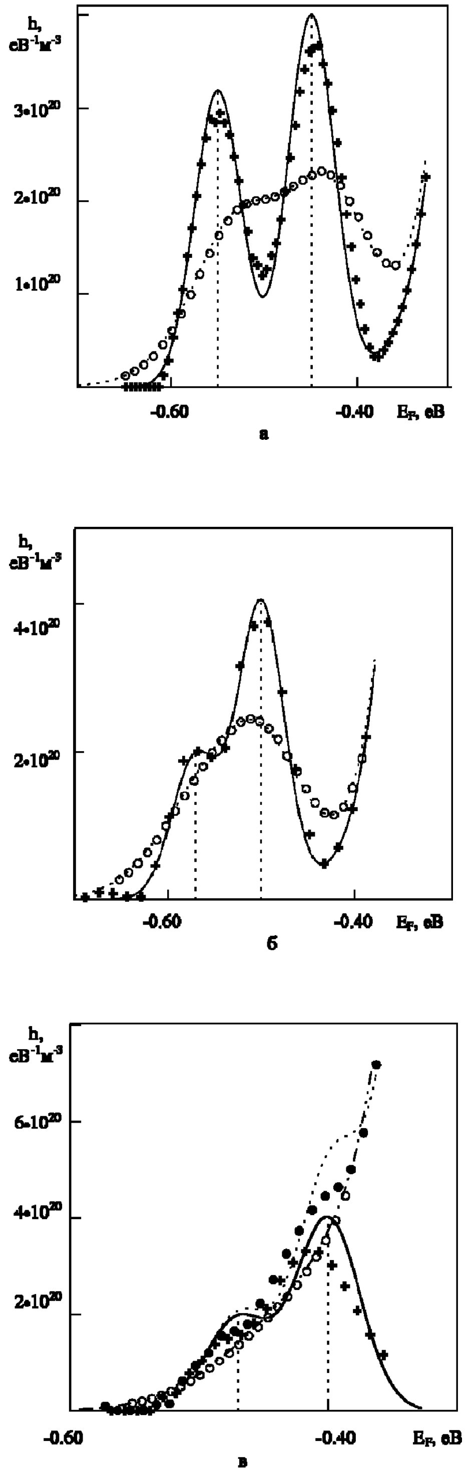


Рис. 4. Розподіл локалізованих станів у ЗЗ матеріялу у випадку двох ґауссових рівнів з параметрами: $\sigma = 0.025$ еВ, $g = 2$, $E_{t_1} = 0.55$ еВ, $N_{t_1} = 2 \cdot 10^{20}$ м$^{-3}$; $E_{t_2} = 0.45$ еВ, $N_{t_2} = 2.5 \cdot 10^{20}$ м$^{-3}$ (а); $E_{t_1} = 0.57$ еВ, $N_{t_1} = 1.2 \cdot 10^{19}$ м$^{-3}$; $E_{t_2} = 0.50$ еВ, $N_{t_2} = 2.5 \cdot 10^{19}$ м$^{-3}$ (б); $E_{t_1} = 0.47$ еВ, $N_{t_1} = 1.2 \cdot 10^{19}$ м$^{-3}$; $E_{t_2} = 0.40$ еВ, $N_{t_2} = 2.5 \cdot 10^{19}$ м$^{-3}$ (в). Вхідні розподіли $h(E)$ — суцільні лінії, розрахунок із використанням низькотемпературного наближення ($\circ$). Розрахунок з використанням запропонованого методу: (+) — без урахування концентрації вільних носіїв; ($\bullet$) — урахована концентрація вільних носіїв ($T = 300K$).

У результаті розрахунків було також установлено, що для розподілів з $\sigma < 0.1$ еВ їхня форма з використанням співвідношення (14) відтворюється лише приблизно. При зменшенні σ похибки реконструкції функції $h(E)$ суттєво збільшувались. У зв'язку з цим ми застосували методику знаходження функції розподілу пасток із згортки (12), яка базується на розв'язанні рівняння Фредгольма 1–го роду [23]. Відомо, що задачі такого типу належать до класу некоректних, оскільки малі похибки правої частини рівняння призводять до значних похибок результату. Для розв'язання цієї поблеми ми використовували метод реґуляризації Тихонова [24,25]. Вибір параметра реґуляризації здійснювався як з використанням принципу нев'язки, так і способом визначення квазіоптимального значення параметра.

Результати обчислювань наведені на рис. 4. Як видно з рисунка, форма розподілів пасток запропонованим методом відтворюється майже точно навіть для дуже вузьких розподілів, близьких до монорівнів ($\sigma = 0.015$ еВ). Похибка у визначенні концентрації глибоких станів при цьому не перевищує $3-5\%$, тоді як енерґія залягання рівня (положення максимуму функції $h(E)$) визначається точно. Для більш розмитих розподілів похибка відтворення їхньої форми значно зменшується. Для порівняння слід підкреслити, що при використанні низькотемпературного наближення моноенерґетичні рівні відтворюються у вигляді дифузних кривих з півшириною $\sim 3.5kT$, а інші розподіли реконструюються з розширенням $\sim 2kT$.

Як було встановлено шляхом моделювання [23], результати розрахунків у випадку, коли параметр реґуляризації знаходили з використанням принципу нев'язки та квазіоптимального значення параметра, відрізняються незначно. Але з точки зору практичного використання метод квазіоптимального значення більш прийнятний, оскільки не потребує знання похибок при визначенні функції n_s у (12).

Установлено, що роздільна здатність високотемпературного методу залежить від співвідношення концентрацій глибоких станів, їхньої півширини та глибини залягання і для рівнів, близьких до дискретних, становить $\sim (2 \div 3)\ kT$. Якщо монорівні або вузькі ґауссові розподіли розташовані за енерґіями ближче, вони відтворюються як один розподіл (рис. 3б).

Ще одним чинником, який знижує роздільну здатність методу для мілких пасток, є вплив концентрації вільних носіїв. На рис. 4в наведено випадок, коли локалізовані стани, що мають малу глибину залягання (або концентрацію), диференціяльним методом не розрізняються. Низькоенерґетична межа E_{min}, яка лімітує застосування методу, може бути визначена із співвідношення

$$\theta_{max} = N_c / \int_{E_{F0}}^{E_{min}} h(E) \exp(-E/kT) dE \leq 10^{-2},$$

де θ — фактор Ламперта [4].

Для параметрів пасток та фізичних констант матеріялу, що використані у праці, ця межа при кімнатній температурі становить ~ 0.30–0.40 еВ і зменшується при зниженні температури вимірювань та збільшенні концентрації станів. Таким чином, розглянутий метод, як і традиційна методика ВАХ СОПЗ, може бути застосований для вивчення достатньо глибоких центрів.

Результати комп'ютерного моделювання свідчать про високу інформативність і досить високу точність диференціяльного методу інжекційної спектроскопії пасток у запропонованій модифікації. Цей метод може бути з успіхом застосований як для дослідження розподілів локалізованих станів, близьких до моноенерґетичних, так і ширших у полі–, монокристалічних та аморфних високоомних напівпровідниках або інших матеріялах. Фактично необхідною і достатньою умовою застосування методу є обмеження зарядопереносу крізь зразок просторовим зарядом, який виникає у випадку інжекції носіїв із контакту.

---

[1] П. Блад, Д. В. Ортон, Зарубежная радиоэлектроника **2**, 3 (1981).

[2] В. Ю. Воробьёв, В. И. Добровольский, В. И. Стриха, *Методы исследований полупроводников* (Вища школа, Київ, 1988).

[3] К. Као, В. Хуанг, *Перенос электронов в твердых телах, в 2-х т.* (Мир, Москва, 1984).

[4] М. Ламперт, П. Марк, *Инжекционные токи в твердых телах* (Мир, Москва, 1973).

[5] A. Rose, Phys. Rev. **97**, 1538 (1955).

[6] P. Mark, W. Helfrich, J. Appl. Phys. **33**, 205 (1962).

[7] J. Sworakovski, K. Pigon, J. Phys. Chem. Solids **30**, 419 (1969).

[8] S. Nespurek, P. Semejtek, Czech. J. Phys. B **22**, 160 (1972).

[9] J. S. Bonham, Aust. J. Chem. **26**, 927 (1973).

[10] J. C. Pfister, Phys. Status Solidi A **24**, k15 (1974).

[11] S. Nespurek, J. Sworakowski, Phys. Status Solidi A **41**, 619 (1977).

[12] O. Zmeskal, F. Schauer, S. Nespurek, J. Phys. C **18**, 1873 (1985).

[13] S. Nespurek, J. Obrda, J. Sworakowski, Phys. Status Solidi A **46**, 273 (1978).

[14] F. Shauer, S. Nespurek, O. Zmeskal, J. Phys. C **19**, 7231 (1986).

[15] J. Sworakowski, S. Nesprek, Vacuum **39**, 7 (1989).

[16] C. Manfredotti, C. De Blasi, S. Galassini, Phys. Status Solidi A **36**, 569 (1976).

[17] А. С. Опанасюк, А. П. Чекалов, Вісн. Сум. ун–ту **1**, 29 (1994).

[18] А. С. Опанасюк, Н. В. Тыркусова, В. И. Харченко, А. Н. Бобров, Вісн. Сум. ун–ту **1(7)**, 131 (1997).

[19] В. О. Любчак, А. С. Опанасюк, Н. В. Тиркусова, В. І. Харченко, Укр. фіз. журн. **44**, 741 (1999).

[20] *Физико–химические свойства полупроводниковых веществ. Справочник* (Наука, Москва, 1979).
[21] S. Nespurek, J. Sworakowski, Radiat. Phys. Chem. **36**, 3 (1990).
[22] С. Б. Стечкин, Ю. Н. Субботин, *Сплайны в вычислительной математике* (Наука, Москва, 1976).
[23] А. С. Опанасюк, Н. В. Тиркусова, Вісн. Сум. ун–ту **17**, 28 (2000).
[24] А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин, *Методы решения некорректных задач* (Наука, Москва, 1974).
[25] А. Ф. Верлань, В. С. Сизиков, *Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы* (Наукова думка, Київ, 1986).

SOME PECULIARITIES OF THE RECONSTRUCTION OF DEEP TRAPS DISTRIBUTIONS VIA THE INJECTING SPECTROSCOPY METHOD

A. S. Opanasyuk, I. Yu. Protsenko, N. V. Tirkusova
Sumy State University,
2 Rymskyi–Korsakov Str., Sumy, UA–40007, Ukraine

The analyzed in this paper method of the deep states injecting spectroscopy of semiconducting materials enables one to obtain the information about the trap parameters directly via space–charge–limited current–voltage characteristics. The suggested methodology is based on Fredholm equation of the first order and can be realized at the room temperature. The method of computer modelling clarifies the effect of temperature and some other parameters on the correctness of the results got after the reconstruction of deep trap distribution. The method validity on energy variety is verified. The calculations prove the method to be highly informative and precise.